

# Qüestió

Quaderns d'Estadística  
i Investigació Operativa

Any 1992, volum 16, núms. 1, 2, 3

Entitats patrocinadores:

Universitat de Barcelona

Universitat Politècnica de Catalunya

Institut d'Estadística de Catalunya



Generalitat de Catalunya  
**Institut d'Estadística  
de Catalunya**



## EDITORIAL

### PRESENTACIÓ DE LA NOVA ETAPA DE **Qüestió**

**Qüestió** comença ara una nova etapa amb la participació de l'Institut d'Estadística de Catalunya i de les universitats catalanes que han creat, consolidat i acreditat la revista. Aquesta petita efemèride ofereix l'oportunitat i quasi imposa l'obligació d'explicar tant les bases de la col·laboració que ara s'inicia com les finalitats que es pretenen assolir.

El Parlament de Catalunya i el Govern de la Generalitat han manifestat reiteradament la voluntat unànime de desenvolupar un sistema coherent, eficaç i fiable d'estadístiques oficials, que produeixi i difongui la informació necessària per conèixer la realitat econòmica, demogràfica i social de Catalunya. Amb aquesta finalitat han desplegat un ordenament legislatiu rigorós i meticulós que regula els aspectes jurídics i administratius i que també abasta matèries de formació i de recerca. Així és oportú de destacar les disposicions següents que es relacionen amb aquests darrers assumptes.

La Llei 14/1987, d'Estadística, confereix a l'Institut d'Estadística de Catalunya la funció de "Contribuir a l'avenç i a la millora de la investigació estadística i al perfeccionament professional del personal estadístic". El Decret 341/1989, de creació de l'Institut d'Estadística de Catalunya, recull textualment la disposició esmentada.

La Llei 30/1991, del Pla Estadístic de Catalunya 1992-1995, fixa l'objectiu central del Pla i els objectius operatius. Respecte als objectius corresponents a les activitats instrumentals necessàries per a l'optimització del sistema estadístic de Catalunya, estableix que: "La decisió d'iniciar aquestes activitats estadístiques ha de satisfer els criteris de decisió de preferència següents: a) que llur aplicació contribueixi a generar economies d'escala en termes de temps o de recursos emprats; b) que siguin tècnicament necessaris o convenients per assolir progressivament l'homogeneïtat en el tractament de dades i millorar la qualitat i la fiabilitat de les estadístiques catalanes; c) que contribueixi a la formació del personal de l'administració i dels usuaris de la informació estadística; d) que constitueixi un avenç tecnològic i innovador de la metodologia estadística d'aplicació progressiva a Catalunya".

D'acord amb aquestes disposicions, l'Institut d'Estadística de Catalunya ha proposat una activitat de difusió estadística, que els Decrets del Programa Anual d'Actuació Estadística per a 1992 i 1993 la inclouen amb les consideracions i precisions següents: "Un element bàsic per a la millora dels procediments estadístics emprats en les institucions participants en el Pla Estadístic de Catalunya consisteix en la potenciació i creació de publicacions tècniques que, amb caràcter periòdic, il·lustren els avenços produïts en el camp de l'estadística teòrica i aplicada, prioritzant les línies editorials més properes als àmbits temàtics i territorials de l'estadística de Catalunya".

L'actuació de l'Institut d'Estadística de Catalunya es concretarà en l'edició d'una revista a la qual donen suport la participació activa de les universitats catalanes i altres institucions similars d'àmbit estatal o estranger.

La Direcció de l'Institut d'Estadística de Catalunya, en decidir vincular aquesta actuació a l'edició de **Qüestió**, ha considerat una sèrie de raons i motivacions, entre les quals es poden destacar les següents: el reconeixement a la labor que les universitats i els investigadors han desenvolupat en la revista, de vegades amb molta voluntat i pocs recursos materials, la intenció de contribuir a la continuïtat d'aquesta iniciativa estimul·lant i el desig d'establir una nova col·laboració fructífera per a les institucions que hi participen i per a la societat.

Generalment els instituts d'estadística, per la naturalesa del seu treball, mantenen relacions intenses amb els organismes que fan recerca estadística i en especial amb les universitats. Malgrat que aquesta observació és un lloc comú, és interessant de recordar algunes referències i anècdotes històriques.

A la primera meitat del segle XIX es va crear l'Estadística Matemàtica, com a una nova ciència basada en la teoria de les probabilitats, i alhora es van fundar els primers Instituts Oficials d'Estadística, com a uns organismes nous regits pel principi del secret estadístic individual.

El matemàtic, físic i astrònom A. Quetelet (1796-1874), com altres científics de la seva època, va aplicar la llei normal de probabilitat a l'estudi dels errors de les mesures físiques i astronòmiques. Però influït per algunes idees de Laplace, Fourier i Poisson, va introduir aquelles tècniques a l'anàlisi de les mesures del cos humà i dels fenòmens socials. A causa de l'amplitud dels seus plantejaments metodològics, Quetelet va ser el creador de l'Observatori astronòmic de Brussel·les; el responsable del Cens de 1829, que es va publicar separatament al de 1830 a Bèlgica i Holanda; el fundador de la Commission Centrale de Statistique (1841) i l'impulsor de la col·laboració internacio-

nal que més tard va donar lloc a l'International Statistical Institute. La Commission Centrale va constituir el model d'institut d'estadística que molts estats europeus van adoptar.

Recordem també que, molt més pròxim a l'època actual, P. Mahalanobis (1893, 1972) va crear i dirigir l'Indian Statistical Institute (1931), va ser director del Departament d'Estadística de la Universitat de Calcuta (1941-1945) i va ser Consultor Honorari en Matèria Estadística del Govern de l'Índia des de 1949. D'entre els seus resultats matemàtics, se'n destaca la Distància de Mahalanobis i d'entre les seves aportacions metodològiques, la tècnica de les enquestes pilot i la difusió de la teoria de les mostres per suplir estadístiques oficials insuficients o deficientes. És interessant indicar que el seu interès en aquestes recerques tan variades va ser degut tant a problemes de biometria com als reptes que l'estadística oficial li plantejava.

Tanmateix, en remarcar les àrees d'interès comú de l'estadística oficial i de la recerca universitària, s'han de destacar també les grans diferències que hi ha entre aquestes dues especialitzacions del treball estadístic, que generalment suposen oficis diferents. L'estadística oficial, que es dedica amb prioritat a la feina feixuga de produir dades estadístiques, ha quedat moltes vegades molt lluny de les preocupacions i dels interessos universitaris. Afortunadament l'època actual ofereix nous reptes de col·laboració per raons de canvis científics, tecnològics, polítics i socials, encara que és difícil donar-ne un panorama complet se'n poden destacar alguns que obren noves possibilitats.

El tractament de dades amb tècniques de recuperació de la informació, mecanismes de lectura òptica, construcció de bases de dades i consulta amb sistemes d'intel·ligència artificial plantegen problemes científics i informàtics que van des de la construcció de noves lògiques fins a la producció de software. En tots aquests temes les grans operacions dels instituts d'estadística són una referència fonamental, i alguns programes de la Comunitat Europea assignen recursos importants a aquestes finalitats específiques.

Els instituts d'estadística, a fi que puguin fer el seu treball segons les bases científiques més avançades, han de conèixer els nous mètodes d'estadística matemàtica que es van descobrint o inventant en els centres de recerca. Per altra banda, els instituts produeixen i difonen cada cop més dades, que són el material bàsic per a investigacions posteriors i que fan possible que d'altres organismes, siguin institucions públiques o empreses privades, les analitzin i realitzin més estudis teòrics i aplicats.

Més enllà del secret estadístic, els assumptes de protecció del dret de la intimitat i

privacitat dels ciutadans, enfront de possibles abusos de la informàtica han sensibilitzat la societat, especialment els móns professionals i els ambients universitaris que s'hi relacionen. El tema no és trivial ja que, com ocorre en el cas de la sida, l'accés a algunes dades individuals protegides és necessari per a certes investigacions científiques.

La difusió massiva de resultats i de tècniques estadístiques a tota la societat i l'extensió dels usos i abusos de les enquestes d'opinió requereix unes actuacions didàctiques i uns aclariments conceptuals tant per part dels organismes oficials d'estadística com de les universitats i dels centres d'ensenyament.

Aquest petit ventall de temes mostra que hi ha moltes matèries d'interès comú i molts assumptes de responsabilitat moral compartida, que ofereixen un camp extensísim de reflexió i de col.laboració.

**Qüestiió** ara emprèn aquesta nova etapa amb la voluntat d'oferir un marc general i integrador dels diversos aspectes de les ciències estadístiques amb la il.lusió de fomentar la cultura estadística en la societat. D'acord amb aquestes finalitats, d'una banda, mantindrà i potenciarà els temes que ha tractat fins ara i el rigor que ha exigít constantment. D'altra banda, introduirà temes que acostin l'estadística oficial i la producció de dades a les institucions i als grups de recerca i sobretot contribuirà a estendre i difondre els principis científics i jurídics de l'estadística en la societat.

La nova experiència pot ser estimulante, tant en l'àmbit de la cultura catalana com en el món acadèmic internacional, la qual cosa ha estat sempre una vocació clara de la revista. Els resultats i l'èxit depenen dels organismes que hi estan implicats, de les persones que hi participen directament, dels col.laboradors i dels lectors. **Qüestiió** prega a tothom que hi aportí una col.laboració tan activa com els sigui possible.

## Sumari

Editorial: Presentació de la nova etapa de <b>Qüestió</b> .....	III
---	-----

### *Articles originals*

Estudio comparativo de distintas funciones núcleo para la obtención del mejor ajuste según el tipo de datos. ....	3
<b>J.E. Martínez Falero, E. Ayuga Téllez y C. González García</b>	
Geometría estadística en los espacios de distancia y secuencia: dos aplicaciones. ....	27
<b>Eladio Barrio, Celia Buades y Andrés Moya</b>	
Some remarks on the individuals-score distance and its applications to statistical inference. ....	43
<b>Antonio Miñarro and Josep M. Oller</b>	
Ampliación al espacio de una aplicación de la integración en el campo complejo para la solución de una cuestión de informática gráfica. ....	59
<b>Miguel Ángel Lerma Usero</b>	
Heurística complementaria a enfoques duales para la planificación de la producción. ....	77
<b>S. Lozano, J. Larrañeta y L. Onieva</b>	
Contrastes de hipótesis basados en la $(r,s)$ -divergencia: aplicación a distribuciones multinomiales y normales multivariantes. ....	99
<b>Morales, D., Pardo, L., Salicrú, M. y Menéndez, M.L.</b>	
Un contraste en modelos de germen y grano. ....	117
<b>Plaza Delgado, M. y Montes Suay, F.</b>	
Quantile plots in the analysis of heteroscedastic models. ....	135
<b>M. Pepió and C. Polo</b>	
Circulaciones y flujo máximo con cotas paramétricas. ....	147
<b>H.I. Calvete y P. Mateo</b>	
 <i>Secció docent i problemes</i>	
A mathematical model for the lottery. ....	177
<b>M. Nikulin</b>	
 <i>Novetats de software</i> .....	195
 <i>Resums en anglès</i> .....	199





## ESTUDIO COMPARATIVO DE DISTINTAS FUNCIONES NÚCLEO PARA LA OBTENCIÓN DEL MEJOR AJUSTE SEGÚN EL TIPO DE DATOS

J.E. MARTÍNEZ FALERO\*, E. AYUGA TÉLLEZ†,  
C. GONZÁLEZ GARCÍA\*

*En este artículo se presenta una contribución a la selección de la función núcleo y del parámetro de alisado que mejor se adaptan a las características muestrales en muestras de tamaño pequeño (25). Para ello se obtuvieron 200 realizaciones muestrales procedentes de 5 distribuciones continuas, prácticamente todas ellas con soporte  $[0,1]$ ; y se agruparon en función de sus características muestrales. En cada grupo de los obtenidos se ajustaron funciones de densidad correspondientes a 8 núcleos diferentes, con anchos de ventana variables entre 0'2 y 4'8, calculando posteriormente un ancho de ventana medio mejor para cada grupo. Este ancho de ventana se comparó con los anchos de ventana óptimos para cada realización muestral, obtenidos por minimización del error cuadrático medio integrado y por validación cruzada. El análisis del sesgo y la eficiencia de los valores del estadístico "ancho de ventana correspondiente al error óptimo medio por grupo menos ancho de ventana óptimo de cada muestra", y de la bondad del ajuste de las funciones estimadas a las distribuciones de partida, permite determinar la función núcleo y el ancho de ventana que mejor se adaptan a las características muestrales.*

**A comparative study of different kernel functions according to data type.**

**Keywords:** Funciones núcleo, parámetro de alisado, agrupamiento.

---

\*Profesor Titular de Universidad. Estadística e I.O.

†Profesor Titular de Escuela Universitaria. Matemática Aplicada.

—Departamento de Economía y Gestión de las Explotaciones e Industrias Forestales.

—E.T.S.I. de Montes. Universidad Politécnica de Madrid. Ciudad Universitaria s/n. 28040 — Madrid.

—Article rebut el juliol de 1991.

—Acceptat el febrer de 1992.

## 1. INTRODUCCIÓN

A partir de que Glivenko (1934) demostrara la convergencia casi segura del histograma de frecuencias a la densidad, los estudios de estimación no paramétrica de esta función han sido numerosos, adquiriendo especial relevancia durante los años 80, paralelamente al desarrollo de la capacidad de procesamiento de los ordenadores, y como consecuencia de los numerosos cálculos que precisa cualquiera de los estimadores propuestos.

Entre los estimadores no paramétricos de las funciones de densidad, se pueden destacar: los estimadores basados en la definición de una función núcleo o “kernel” (Rosenblatt, 1956; Parzen, 1962; Nadaraya, 1989); los derivados de la “verosimilitud penalizada” (Scott, *et al.*, 1980; Silverman, 1986); las series de estimadores ortogonales (Cencov, 1962); el método “PPDE” (Friedman, *et al.*, 1984); y los métodos basados en los  $k$ -puntos más próximos (Loftsgaarden y Quesenberry, 1965).

Tanto estos trabajos, como la mayoría de las referencias disponibles se centran en la definición de distintos estimadores y en la comprobación de la convergencia teórica a la función de densidad; sin embargo, los estudios relativos a la especificidad de los distintos métodos en cuanto a precisión, adecuación a la estructura de los datos analizados y al tiempo de CPU requerido para la estimación son escasos. En este sentido se pueden señalar los trabajos de Epanechnikov (1969) y Deheuvels (1977) referidos a la precisión y los de Scott y Factor (1981), Silverman (1982) y Härdle (1991) en cuanto al tiempo de CPU.

De los diferentes procedimientos de optimización, los mejor estudiados matemáticamente (y aquellos para los que existe un mayor número de aplicaciones a datos reales), son los basados en la definición de una función núcleo. Para su empleo es necesario elegir tanto el “núcleo” como un valor del parámetro de alisado, ambos determinarán la expresión final de la función de densidad estimada.

El núcleo es una función  $K(x)$ , a partir de la cual se puede establecer el siguiente estimador no paramétrico de cualquier función de densidad  $f(x)$  (Rosenblatt, 1956):

$$f_n(x, h_n) = \frac{1}{nh_n} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_i}{h_n}\right)$$

donde  $h_n$  es el parámetro de alisado y  $X_1, \dots, X_n$  los datos observados.

Nadaraya (1989) establece las siguientes condiciones para la función núcleo:

- a)  $K(x) = K(-x)$
- b)  $\int K(x) dx = 1$
- c)  $\sup_{-\infty < x < \infty} |K(x)| \leq A < \infty$
- d)  $\int x^i K(x) dx = 0, \quad i = \overline{1, s-1}$   
con  $s$  par y mayor o igual que 2;
- e)  $\int x^s K(x) dx \neq 0$
- f)  $\int x^s |K(x)| dx < \infty$

Respecto a las propiedades estadísticas de estos estimadores, Parzen (1962) demostró que si el parámetro de alisado,  $h_n$ , tiende a cero cuando  $n \rightarrow \infty$  entonces el estimador núcleo es asintóticamente insesgado y asintóticamente normal. Estudios más completos sobre la convergencia de este estimador son los realizados por Devroye (1983) y Devroye y Penrod (1984), que establecieron la convergencia de los estimadores núcleo en el espacio de funciones integrables y en el de funciones de cuadrado integrable.

El parámetro de alisado  $h_n$ , también llamado “ancho de ventana” o “ancho de banda”, es un número positivo que cumple la condición de Parzen. Scott y Factor (1981) y Marron (1987) presentan recopilaciones de los métodos o algoritmos de cálculo más empleados. En general, el ancho de ventana se determina de forma que se minimice algún tipo de error, Hall y Marron (1988) proponen minimizar la integral del error cuadrático sobre el rango de variación de la variable aleatoria:

$$ECI(h_n) = \int [f_n(x, h_n) - f(x)]^2 dx$$

y Devroye y Györfi (1985) minimizar la integral de las diferencias en valor absoluto entre el estimador y la función:

$$ABSEMC(h_n) = \int |f_n(x, h_n) - f(x)| dx$$

Sin embargo, el proceso de minimización de estas medidas es substancialmente más complejo (ver por ejemplo Izenman, 1991) que la optimización de la medida propuesta por Rosenblatt (1956), la cual se define como el error cuadrático medio

integrado (o el riesgo medio de la función de pérdida cuadrática entre la función y su estimador); y toma la siguiente expresión:

$$U(h_n) = \int E[f_n(x; h_n) - f(x)]^2 dx$$

En este artículo se realiza una comparación por simulación en ordenador, del ajuste de distintas funciones núcleo, con diferentes anchos de ventana, a muestras pequeñas (tamaño 25) caracterizadas por distintos parámetros muestrales.

La comparación de la eficiencia de algoritmos por simulación en ordenador presenta algunas dificultades: en primer lugar, deberán elegirse los algoritmos a comparar; en nuestro caso ocho funciones núcleo y dos valores del ancho de banda que pueden obtenerse sin conocer la distribución de los datos (uno derivado de la minimización del error cuadrático medio integrado y otro obtenido por validación cruzada). En segundo lugar deberá seleccionarse un conjunto representativo de problemas para la comparación de los algoritmos, para lo cual se simuló 200 realizaciones muestrales procedentes de cinco distribuciones continuas, que se agruparon en 10 clases en función de sus características muestrales. Finalmente, ha de definirse la “bondad o calidad” de los algoritmos a comparar para elegir el mejor, en nuestro caso la función núcleo y el ancho de ventana que mejor se adapten a cada grupo muestral.

Para conseguir este objetivo, en cada una de las realizaciones muestrales se calculó una estimación de la función de densidad con ocho funciones núcleo diferentes, y con anchos de banda comprendidos entre 0’2 y 4’8. Posteriormente se calculó el ancho de ventana con menores desviaciones medias en cada grupo. Este ancho de ventana se comparó con los dos anchos de ventana calculados para cada realización muestral. El análisis del sesgo y la eficiencia de los valores del estadístico: *“ancho de ventana correspondiente al mínimo error medio por grupo de muestras menos ancho de ventana óptimo correspondiente a cada muestra”* y de la bondad del ajuste de las funciones estimadas a las distribuciones de partida, permite determinar la mejor función núcleo a partir de las características muestrales.

## 2. FUNCIONES NÚCLEO Y ANCHOS DE BANDA EMPLEADOS

Existen numerosas funciones que cumplen las propiedades necesarias para ser funciones núcleo. Para el presente estudio se han escogido ocho funciones  $K(x)$  entre las más conocidas, y que permiten el cálculo del parámetro de alisado óptimo. Estas funciones son las siguientes

$$\begin{aligned}
K_1 &= \begin{cases} \frac{4}{3} - 8x^2 + 8|x|^3, & |x| < \frac{1}{2} \\ \frac{8}{3}(1 - |x|)^3, & \frac{1}{2} \leq |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases} \\
K_2 &= \frac{1}{2}e^{-|x|} \\
K_3 &= \begin{cases} \frac{3}{4\sqrt{5}} - \frac{3x^2}{20\sqrt{5}}, & |x| \leq \sqrt{5} \\ 0, & |x| > \sqrt{5} \end{cases} \\
K_4 &= \begin{cases} 0.54 + 0.46 \cos \pi x, & |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases} \\
K_5 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}} \\
K_6 &= \frac{3}{2} \left(1 - \frac{x^2}{3}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}} \\
K_7 &= \frac{15}{8} \left(1 - \frac{2}{3}x^2 + \frac{1}{15}x^4\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}} \\
K_8 &= \begin{cases} \frac{15}{16}(1 - x^2)^2, & |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}
\end{aligned}$$

La función Gaussiana ( $K_5$ ) y la propuesta por Epanechnikov (1969) ( $K_3$ ) han sido las más utilizadas en los estudios realizados con estimadores núcleo. La popularidad de la función Gaussiana se debe al conocimiento de sus propiedades y el frecuente empleo de la función de Epanechnikov a la economía en cálculos que representa su uso.

Respecto a los parámetros de alisado se han considerado dos valores para la simulación: el que se denomina en el presente trabajo Optimo.-1, que es un estimador del ancho de ventana que proporciona un menor error medio integrado; y un segundo valor, que denominamos Optimo.-2, y que se obtiene por el método de validación cruzada máximo verosímil.

El error medio integrado para los estimadores núcleo de una función de densidad puede expresarse como:

$$U(h_n) = \frac{1}{nh_n} \int K^2(x) dx + h_n^{2s} \frac{\left( \int x^s K(x) dx \right)^2}{(s!)^2} \int |f^{(s)}(x)|^2 dx + O \left[ \frac{1}{nh_n} + h_n^{2s} \right]$$

(Nadaraya 1989). Minimizando esta expresión se encuentra el óptimo asintótico del parámetro de alisado que depende de la densidad desconocida  $f$ , de la función núcleo elegida y de la muestra. El valor óptimo viene dado por la fórmula:

$$h_n = A(K) B(f) n^{-\frac{1}{(2s+1)}}$$

siendo:

$$A(K) = \left[ \frac{\int K^2(x) dx}{2s \left( \frac{\int x^s K(x) dx}{s!} \right)^2} \right]^{\frac{1}{(2s+1)}}$$

$$B(f) = \left[ \int |f^{(s)}(x)|^2 dx \right]^{-\frac{1}{(2s+1)}}$$

Este valor no puede obtenerse directamente en el caso de estimar una densidad desconocida, ya que depende de la derivada de orden  $s$  de dicha función. Se hace preciso, por tanto, estimar el óptimo. Para ello se suele utilizar el algoritmo iterativo de Scott *et al.*, (1977) que utiliza  $f_n^{(s)}$  (derivada  $s$ -ésima de la función estimada) como estimador asintóticamente insesgado (Nadaraya, 1989) de  $f^{(s)}$ , procediendo de la siguiente forma:

*Primero* se toma una estima inicial de  $h_n$ , por ejemplo el rango muestral ( $h_n^0$ ).

*Segundo*, con este valor se estima la derivada de la función de densidad,  $f_n^{(s)0}$ .

*Tercero*, se calcula el valor  $h_n^1$  con la expresión dada para el valor óptimo y empleando la estimación anterior.

*Cuarto*, se repiten los pasos anteriores de tal forma que para la iteración  $i$ -ésima tendremos:

$$h_n^{i+1} = A(K) B(f_n^i) n^{-\frac{1}{(2s+1)}},$$

lo que proporciona una secuencia de valores  $h_n^i$  que convergen a la solución del algoritmo, que tomaremos como estimación del óptimo.

El segundo valor del ancho de ventana se obtiene por el método de validación cruzada máximo verosímil (Duin, 1976 y Hermans y Habbema, 1976), procediendo de la siguiente forma:

*Primero* se obtiene el estimador núcleo de la función de densidad en los valores muestrales según la ecuación:

$$\hat{f}_{h_n,i}(X_i) = \frac{1}{(n-1)h_n} \sum_{j=i}^{n-1} K\left(\frac{X_i - X_j}{h_n}\right),$$

*Segundo* se determina el valor del parámetro que optimiza la función de pseudoverosimilitud:

$$L(h) = \prod_i \hat{f}_{h_n,i}(X_i)$$

El algoritmo de optimización de la función anterior ha sido el método adaptativo aplicado como procedimiento de optimización global bayesiana (ver apéndice).

### 3. SELECCIÓN DEL CONJUNTO DE PROBLEMAS PARA COMPARACIÓN

Una simulación extensiva por el método de Monte Carlo requiere encontrar algoritmos más rápidos que los actuales para el cálculo de la estimación. Con objeto de comparar los distintos núcleos se obtuvieron 200 realizaciones muestrales sobre el espacio de funciones continuas, con las siguientes características:

1<sup>o</sup> Se definieron cinco tipos de funciones de densidad que se consideraron representativas del conjunto de funciones continuas con soporte aproximado  $[0,1]$  (ver figura 1):

- a) Distribución uniforme.
- b) Distribución  $N(0.5, 0.2)$ .
- c) Distribución  $N(0.5, 0.4)$ .
- d) Una distribución asimétrica a la izquierda,  $\beta(3, 6)$ .
- e) Una distribución bimodal, cuya función de densidad es 0.5 por la densidad de una  $N(0.25, 0.125)$  más la de la otra  $N(0.75, 0.125)$ .

2<sup>o</sup> Se obtuvieron 200 realizaciones muestrales de tamaño 25 sobre las mencionadas distribuciones de la siguiente manera: primero se generaron 200 muestras de tamaño 25 de una distribución uniforme  $(0,1)$  con diferente RUN-TIME; a continuación se generaron otros 200 números aleatorios truncados a enteros de 1 a 5 que representan a las cinco distribuciones de partida; finalmente los datos uniformes se transformaron en las muestras correspondientes a las cinco distribuciones utilizando el GPSS (Chisman, 1992).

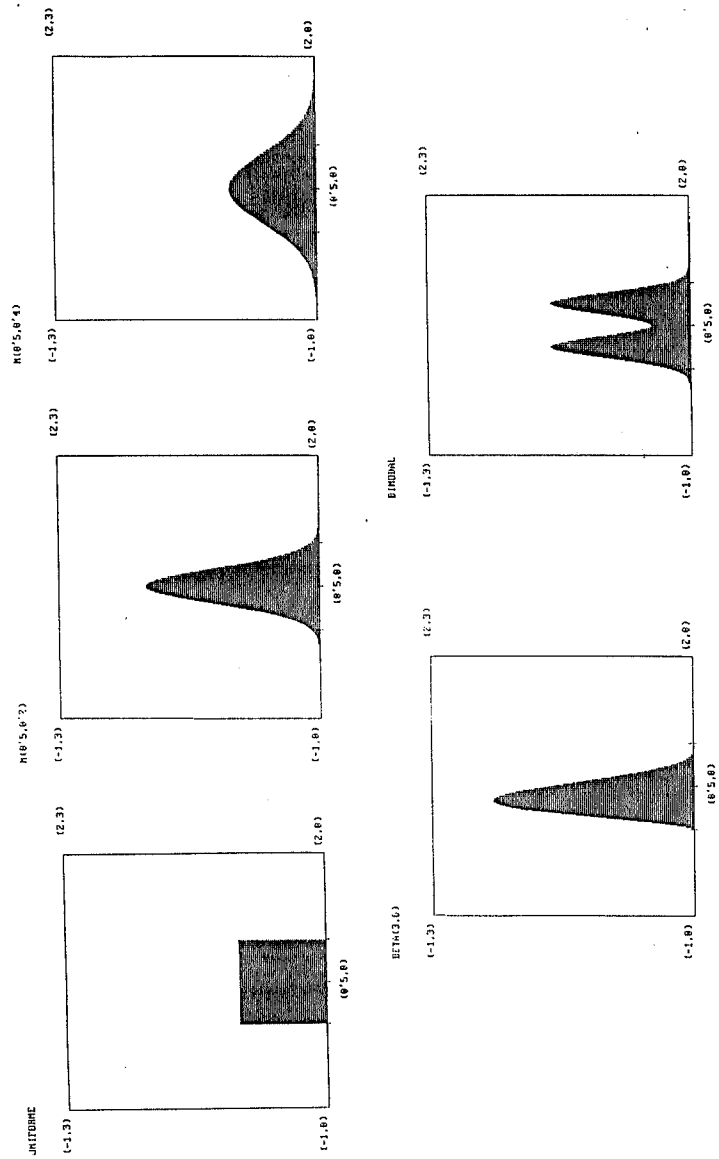


Figura 1.



Para efectuar la comparación se ha procedido a agrupar los 200 conjuntos de datos, utilizando un método divisivo y politético (Hill, 1975), en función de sus características muestrales. Para ello se obtuvieron la varianza, el coeficiente de asimetría de Fisher, el coeficiente de apuntamiento y el número de modas de las 200 muestras. La finalidad de esta agrupación es determinar el comportamiento de las distintas funciones núcleo en grupos homogéneos por características muestrales, de forma que puedan establecerse pautas de ajuste a partir, simplemente, de estas características.

Para aplicar el método de agrupación se requiere partir de una matriz presencia-ausencia de distintos descriptores para cada uno de los 200 datos analizados. Los descriptores seleccionados fueron:

- Descriptor 1: Varianza alta, cuando la varianza de la muestra es mayor que la varianza media muestral más la mitad de la desviación típica muestral, ( $V > \bar{V} + .5\bar{S}$ )
- Descriptor 2: Varianza media, ( $V \in [\bar{V} - .5\bar{S}, \bar{V} + .5\bar{S}]$ )
- Descriptor 3: Varianza baja ( $V < \bar{V} - .5\bar{S}$ )
- Descriptor 4: Asimetría alta, ( $As > \bar{As} + .5\bar{S}_{As}$ )
- Descriptor 5: Asimetría media ( $As \in [\bar{As} - .5\bar{S}_{As}, \bar{As} + .5\bar{S}_{As}]$ )
- Descriptor 6: Asimetría baja ( $As < \bar{As} - .5\bar{S}_{As}$ )
- Descriptor 7: Apuntamiento alto, ( $Ap > \bar{Ap} + .5\bar{S}_{Ap}$ )
- Descriptor 8: Apuntamiento medio ( $Ap \in [\bar{Ap} - .5\bar{S}_{Ap}, \bar{Ap} + .5\bar{S}_{Ap}]$ )
- Descriptor 9: Apuntamiento bajo ( $Ap < \bar{Ap} - .5\bar{S}_{Ap}$ )
- Descriptor 10: Una moda
- Descriptor 11: Más de una moda

Los descriptores definidos, se han seleccionado de forma que permitan establecer la pertenencia de cualquier realización muestral a los parámetros definidos. Incluso desde un punto de vista cualitativo, es fácil establecer si una realización muestral tiene varianza alta, media o baja, y proceder de idéntica forma con la simetría y el apuntamiento; la determinación del número de modas también es posible a la vista del histograma de frecuencias.

A partir de esta matriz se procede a la clasificación dicotómica de los datos de partida mediante la definición de dos gradientes. El primer gradiente es el factor que absorbe máxima variación, obtenido mediante el análisis factorial de correspondencias, y define una ordenación de las muestras seleccionadas en función de todos los parámetros descriptores. El segundo gradiente se forma a partir de los descriptores más significativos en la ordenación del primer gradiente, y permite la clasificación dicotómica de las muestras. Al mismo tiempo este segundo gradiente facilita la definición de un umbral que permite la clasificación automática

de cualquier otra realización muestral en alguno de los dos grupos definidos a partir de los valores cuantitativos de la varianza, el coeficiente de asimetría, el de apuntamiento y del número de modas. El proceso se repite iterativamente, en cada uno de los dos grupos establecidos, hasta definir el número de grupos deseados (en nuestro caso 10).

El resultado de aplicar este método de clasificación se presenta en la figura 2. En el apéndice se presenta, también, la pertenencia de las muestras analizadas a cada uno de los grupos obtenidos.

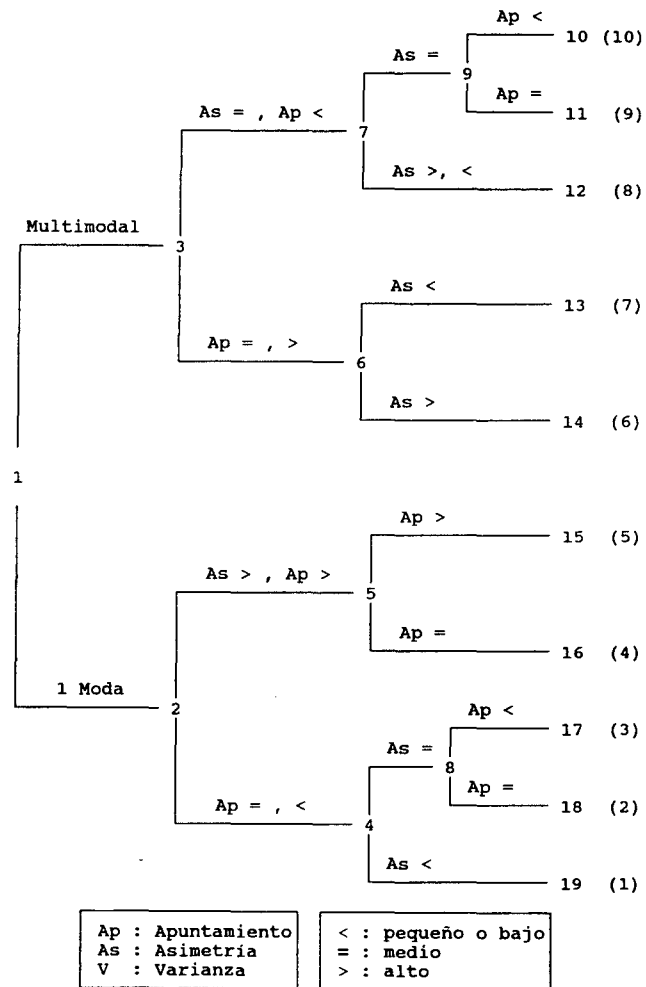


Figura 2. Agrupación de muestras.  
Entre paréntesis aparece la denominación de grupos adoptada para las figuras 3, 4 y 5.

#### 4. COMPARACIÓN DE LOS NÚCLEOS Y ANCHOS DE VENTANA

Para proceder a la comparación de algoritmos se requiere disponer de algún índice del error que se produce en cada grupo por el hecho de aplicar diferentes funciones núcleo con distintos anchos de ventana. Más adelante, se formulan algunas medidas en este sentido. Por otra parte, la aplicación de estos índices no siempre permite determinar unívocamente la mejor función núcleo; por este motivo, también se presentan medidas generales de la bondad del ajuste de las funciones núcleo.

La principal dificultad para la obtención de una medida del error en cada grupo muestral procede de que los grupos están formados por muestras procedentes de diferentes distribuciones de probabilidad; por tanto debe prescindirse de la utilización del error medio integrado. Por otra parte, no basta con determinar la función núcleo que mejor se adapte a las muestras del grupo, es necesario definir un ancho de ventana adecuado. Estas consideraciones aconsejan acudir a alguna medida del error propia de cada realización muestral y establecer un promedio de esa medida para todo el grupo, que sea función del valor del parámetro de alisado. En este sentido, para cada una de las realizaciones muestrales, y cada función núcleo, se obtuvo el error cuadrático integrado, para valores de  $h_n$  comprendidos entre 0'2 y 4'8:

$$ECI(h_n) = \int [f_n(x, h_n) - f(x)]^2 dx$$

La media del ECI para las muestras de cada grupo, y cada núcleo, que denominaremos MECIGN, es una función del ancho de banda y proporciona una estimación del error por grupo al aplicar las distintas función núcleo:

$$MECIGN_{ij}(h_n) = \frac{1}{n_i} \sum_{k \in G_i} \int [f_{kjn}(x, h_n) - f_k(x)]^2 dx$$

donde  $G_i$  es el grupo  $i$   
 $j$  representa al núcleo  $j$   
 $n_i$  es el número de muestras en el grupo  $i$ .  
 $f_k(x)$  es la función de densidad a partir de la que se generó la muestra  $k$ , y  
 $k$  representa a las distintas realizaciones muestrales.

En la figura 3 se muestran los valores del MECIGN para el grupo 1 y el núcleo 1, así como los valores del ancho de banda para las muestras del grupo obtenidas por los procedimientos óptimo-1 y óptimo-2.

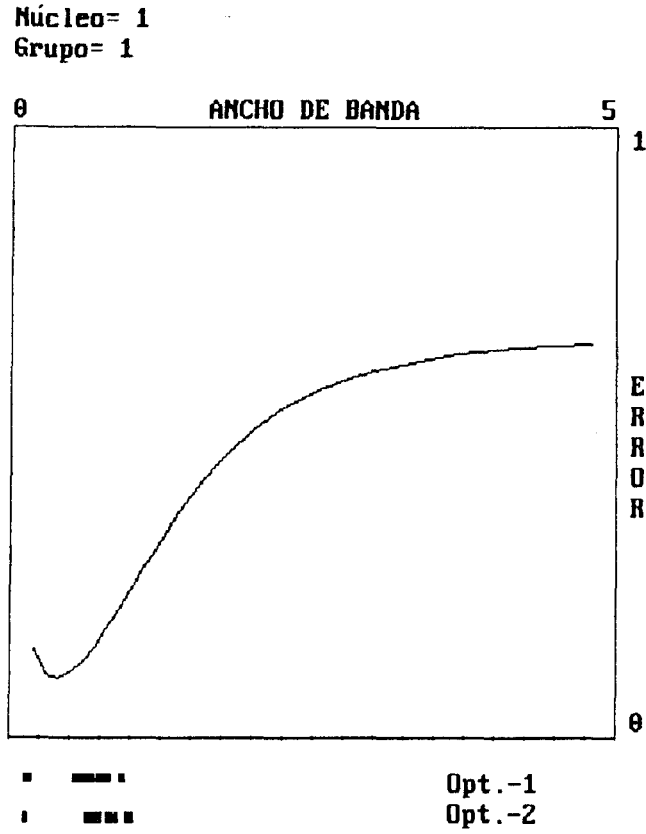


Figura 3.

El MECIGN también permite determinar un mejor valor medio del parámetro de alisado para cada grupo y cada función núcleo ( $h_{G-N}^*$ ). La comparación de este valor con los anchos de ventana óptimo-1 y óptimo-2, en las realizaciones muestrales de cada grupo, puede proporcionar otras medidas del error. En este sentido se definió una nueva variable que, para cada muestra del grupo, representa la diferencia entre el mejor ancho de ventana del grupo y el ancho óptimo definido por los dos procedimientos independientes de la distribución de partida:

$$\begin{aligned} d_{k1} &= h_{Gi-Nj}^* - h_{k,01} \quad (k1 = 1, \dots, n_{Gi}) \\ d_{k2} &= h_{Gi-Nj}^* - h_{k,02} \quad (k2 = 1, \dots, n_{Gi}) \end{aligned}$$

donde  $n_{Gi}$  es el número de muestras en el grupo  $i$   
 $N_j$  representa el núcleo  $j$ .  
 $h_{k,01}$  es el valor del ancho de ventana para la muestra  $k$ ,  
obtenido por el procedimiento óptimo-1  
 $h_{k,02}$  es el valor del ancho de ventana para la muestra  $k$ ,  
obtenido por el procedimiento óptimo-2

La media y la varianza de esta variable, en cada grupo, representa el sesgo y la eficiencia, respecto del mejor  $h_n$  del grupo al calcular automáticamente el ancho de ventana. Las figuras 4 y 5 muestran estos valores presentando las gráficas de los diez grupos y en cada una los valores para los ocho núcleos.

Con objeto de comprobar la existencia de algún núcleo que proporcione sistemáticamente mejores ajustes en muestras de tamaño pequeño se ha estimado el error cuadrático medio integrado para cada núcleo:

$$U(h_n) = \int E \left[ \hat{f}_n(x, h_n) - f(x) \right]^2 dx$$

a partir de las muestras procedentes de la misma distribución de partida:

$$\hat{U}_{ij}(h_n) = \int \left\{ (1/n_i) \sum_{k \in F_i} \left[ \hat{f}_{kjn}(x, h_n) - f_{F_i}(x) \right]^2 \right\} dx$$

donde  $f_{F_i}(x)$  es la función de densidad de la distribución  $F_i$ ,  
 $F_i = 1, \dots, 5$   
 $j$  representa al núcleo  $j$   
 $n_i$  es el número de muestras generadas de la distribución  $F_i$ ,  
 $k$  representa a las distintas realizaciones muestrales.

En las figuras 6.a y 6.b se muestran los resultados obtenidos para la distribución uniforme y los ocho núcleos estudiados. En el eje de abscisas se representan también los intervalos de confianza, al 95%, de los anchos de banda óptimos obtenidos por los dos procedimientos de optimización. La tabla 1 muestra los valores del error  $U(h_n)$  obtenidos para un ancho de banda correspondiente a la media de los óptimos en muestras procedentes de la misma distribución de partida.

OPTIMO 1  
 Línea superior SES60, inferior VARIANZA

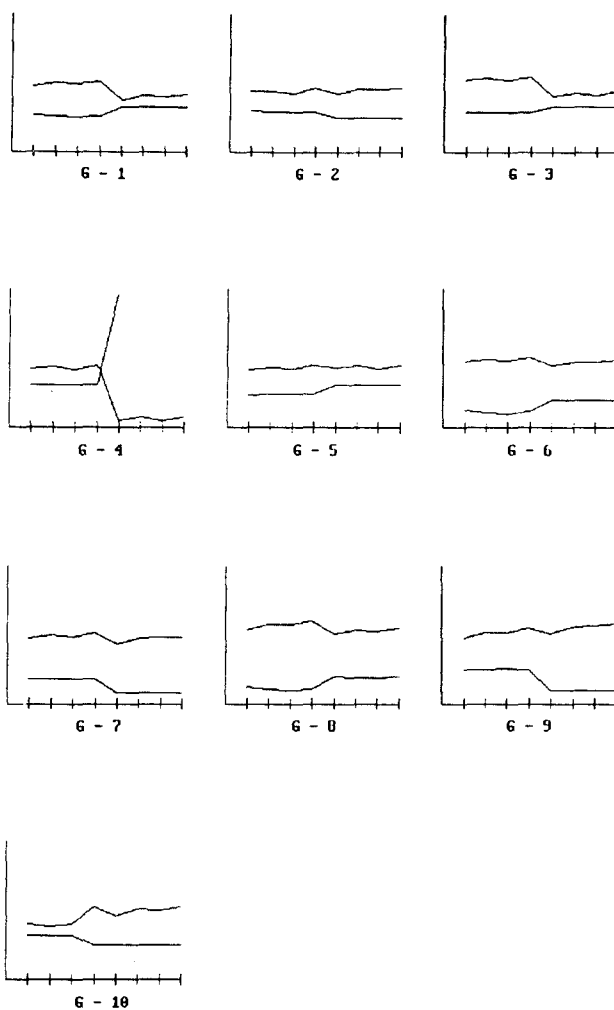


Figura 4.

OPTIMO 2  
 Línea superior SESGO, inferior VARIANZA

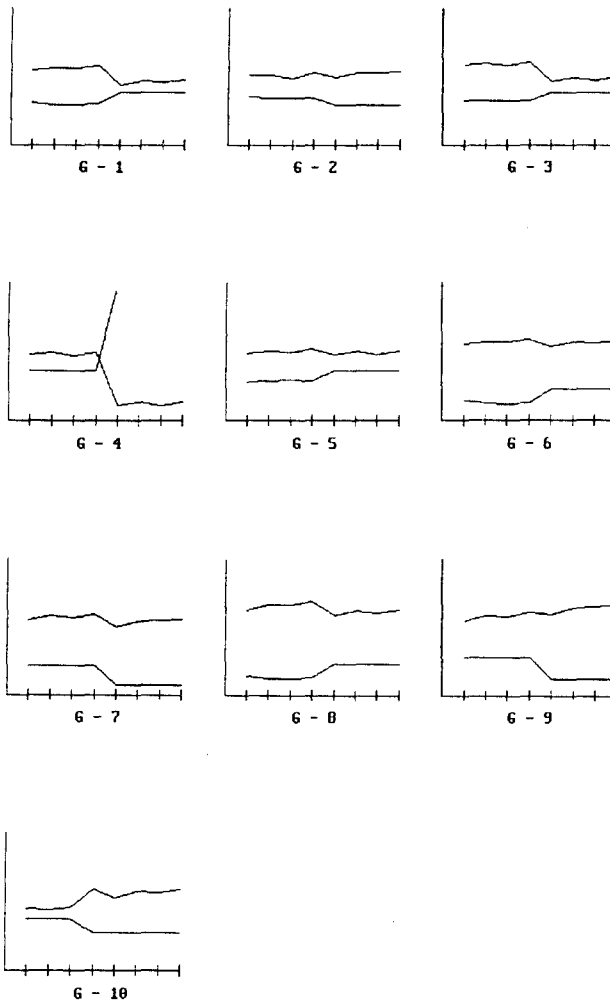


Figura 5.

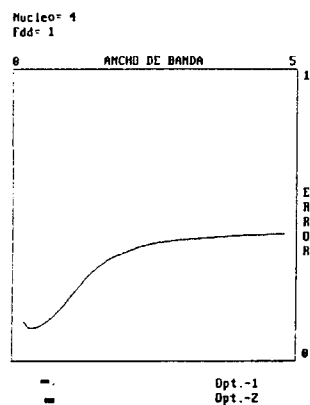
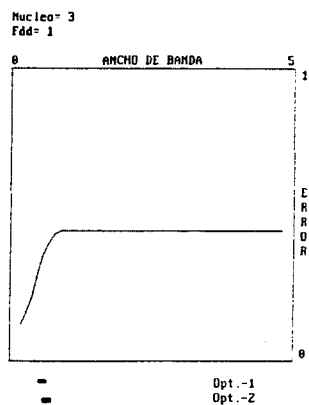
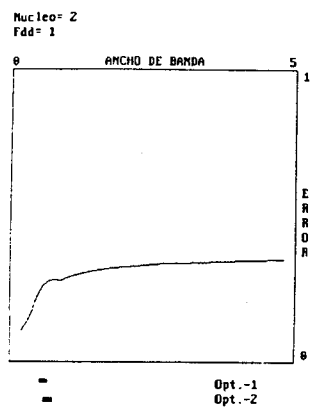
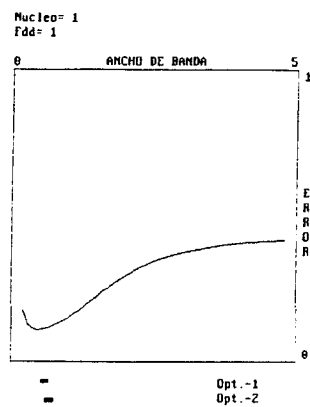


Figura 6.a



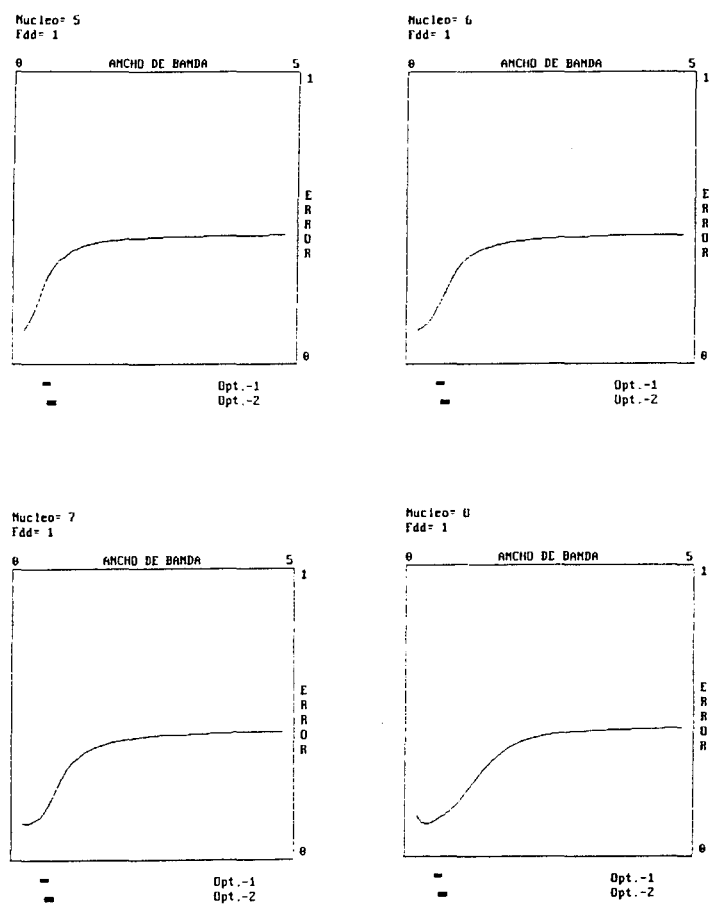


Figura 6.b

Tabla 1

Núcleo	Distribc.	$U$ (Ópt.-1)	$U$ (Ópt.-2)
$K_1$	1	0,1125	0,1875
	2	0,1250	0,1500
	3	0,1250	0,1250
	4	0,3750	0,4875
	5	0,1875	0,2000
$K_2$	1	0,2625	0,2750
	2	0,5500	0,5438
	3	0,0500	0,0563
	4	0,8250	0,8563
	5	0,3875	0,4130
$K_3$	1	0,3750	0,4125
	2	0,8125	0,8375
	3	0,0375	0,0375
	4	>1	>1
	5	0,5000	0,5375
$K_4$	1	0,1375	0,1500
	2	0,2500	0,3125
	3	0,1375	0,1375
	4	0,6250	0,7500
	5	0,2500	0,2625
$K_5$	1	0,3125	0,3313
	2	0,6875	0,7125
	3	0,0500	0,0500
	4	>1	>1
	5	0,4250	0,4500
$K_6$	1	0,2250	0,2500
	2	0,5625	0,6500
	3	0,0875	0,0875
	4	>1	>1
	5	0,3250	0,3625
$K_7$	1	0,1750	0,2000
	2	0,5000	0,5625
	3	0,1250	0,1250
	4	0,8875	>1
	5	0,3000	0,3250
$K_8$	1	0,1500	0,1375
	2	0,2375	0,3000
	3	0,3250	0,3250
	4	0,6125	0,6875
	5	0,2500	0,2625

Estos valores se han empleado para seleccionar entre las ocho funciones núcleo las que, independientemente de la función de partida, originen estimaciones con menos error. Esta selección no debe depender de las distribuciones originarias ya que, en la realidad son desconocidas, disponiendo sólo de los valores muestrales para tomar decisiones respecto a los algoritmos investigados.

## 5. RESULTADOS

El estudio de los errores MECIGN frente a distintos anchos de ventana permite la selección de tres de los núcleos investigados:  $K_1$ ,  $K_4$  y  $K_8$ , en los cuales se obtienen menores errores que con los restantes para todos los grupos de muestras. Ninguno de ellos, sin embargo, proporciona mejores estimas, respecto al MECIGN, que los otros para todos los posibles valores del parámetro de alisado. Los errores MECIGN correspondientes a los núcleos  $K_4$  y  $K_8$  son prácticamente iguales, pero difieren del núcleo  $K_1$ .

Es necesario, por tanto, utilizar la información que proporcionan los gráficos 4 y 5, respecto al sesgo y la varianza de los estimadores del parámetro de alisado óptimo. Entre los tres núcleos, se seleccionará aquel que posea una varianza y sesgo mínimos para el grupo. Con este criterio se elige el núcleo  $K_1$ , para los grupos 1, 5, 6, 8 y 9 y el  $K_8$  para los grupos 7 y 10. En los grupos restantes tampoco se puede determinar el mejor núcleo con este criterio.

En estos casos, para elegir la mejor función núcleo se recurre a las medidas del error medio cuadrático integrado, según las cuales, en cualquier caso, la elección de  $K_1$  supone un mínimo error (tabla 1).

Como conclusión, la decisión más adecuada, sería elegir:

Para el grupo 1, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 2, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 3, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 4, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 5, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 6, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 7, el núcleo  $K_8$ .  
 Para el grupo 8, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 9, el núcleo  $K_1$ .  
 Para el grupo 10, el núcleo  $K_8$ .

Los dos estimadores del ancho de banda óptimo son estimadores sesgados para un tamaño de muestra pequeño, obteniéndose valores superiores al ancho óptimo, lo que origina estimas sobrealizadas de la densidad; en general el ancho de banda obtenido por el procedimiento 1 presenta mejores aproximaciones que el obtenido por el procedimiento 2. Sin embargo, las diferencias entre los anchos de banda obtenidos por ambos procedimientos no son significativas. Los intervalos de confianza al 99% para la razón de varianzas y para la diferencia de medias entre los dos estimadores, son (para las 200 realizaciones muestrales y los 8 anchos de banda):

Para la razón de varianzas, (0.51797, 1.07847).

Para la diferencia de medias con varianzas iguales, (-0.139309, 0.006769).

Puede aceptarse, por tanto, la igualdad en ambos casos. En cambio no puede decirse lo mismo del tiempo de CPU requerido para su cálculo.

La obtención de un ancho de ventana minimizando el riesgo de las pérdidas cuadráticas (Óptimo.-1) supone un procedimiento iterativo, cuya convergencia, en los problemas analizados conlleva un promedio de 14 iteraciones. En cada una de estas iteraciones se consume  $n(n - 1)$  veces más tiempo ( $n$  es el tamaño muestral), que en la obtención de la función de densidad estimada. La determinación del parámetro de alisado que maximiza la función de pseudoverosimilitud (Óptimo.-2) representa un consumo de CPU mucho menor (un promedio de 7 iteraciones con un tiempo por iteración del orden de  $n$ ). Por todo esto, creemos recomendable el empleo del estimador por validación cruzada máximo verosímil y corregirlo, si fuera necesario, a la vista de la función de densidad estimada, al menos para tamaños muestrales pequeños.

## APÉNDICE

### Determinación del ancho de banda por aplicación del modelo adaptativo.

Los procedimientos bayesianos para optimizar una función  $f(x, w)$ , continua en  $x$  y medible en  $w$ , donde:

$$\begin{aligned} x &\in A \subset \mathbb{R}^m \text{ (}\mathbb{R} \text{ conjunto de números reales), y} \\ w &\in \Omega \text{ (espacio muestral).} \end{aligned}$$

a partir de una serie de muestras  $(x_i, y_i)$ ,  $y_i = f(x_i)$ , suponen definir una regla de decisión ( $d$ ) que, a partir de un vector de observaciones  $z_n = (x_i, y_i \ i = 1, \dots, n)$ ,

permita determinar un  $x_{n+1}$  más próximo al óptimo. Esta regla de decisión se calcula para minimizar el riesgo de la decisión  $R_0(d)$ :

$$R_0(d) = \int_{\Omega} f(x_{n+1}(d), w)P(dw) - \int_{\Omega} \underset{x \in A}{\text{opt}} f(x, w)P(dw)$$

El segundo término de la expresión anterior es constante, por tanto la minimización del riesgo supone minimizar el primer término, que llamaremos  $k(x)$ ; con lo cual:

$$x_{n+1} \in \underset{x \in A}{\text{arg opt}} k(x)$$

La aplicación del modelo adaptativo es posible al sustituir la condición de consistencia de Kolmogorov por las de continuidad de las funciones muestrales, homogeneidad de  $P$  e independencia en las diferencias parciales (ver Mockus, 1988 o Benveniste *et al.*, 1990). Bajo estas hipótesis se induce una distribución  $P$  gaussiana con media  $\mu$  constante y matriz de covarianzas dependiente sólo de la distancia entre valores muestrales; en estas condiciones:

$$k(x) = \sigma^2/(\mu - c)$$

La definición de un modelo adaptativo supone referir la función a optimizar a funciones con soporte en intervalos convexos de los valores muestrales:

$$f(x) = f_i(x); x \in A_i; \bigcup_{i=1}^n A_i = A; A_i \cap A_j = \emptyset; i \neq j; i = 1, \dots, n$$

si  $f_i(x)$  es una función estocástica gaussiana,  $\mu_x^i$  será el valor observado  $y_i$  en  $A_i$ , y la varianza una función de la distancia entre cualquier  $x$  y la realización muestral  $x_i$ ; por tanto:

$$k_i(x) = \sigma_x^i/(\mu_x^i - c)$$

donde  $\sigma_x^i = \sigma_0^2 g(\|x - x_i\|)$  y

$$\mu_x^i = y_i$$

De los resultados anteriores se puede deducir:

$$x_{n+1} \in \underset{x \in A}{\text{arg opt}} \sigma_x^i/(\mu_x^i - c)$$

con la única restricción de continuidad de las funciones  $k_i(x)$ :

$$A_i = \{x : k_i(x) \leq k_j(x), j = 1, \dots, n\}$$

Desde un punto de vista operativo, dado un conjunto de  $n$  realizaciones muestrales  $(x_i, y_i)$ , y en el caso de que  $x$  pertenezca a  $R^1$ , para el cálculo de  $x_{n+1}$  basta determinar los  $x_k$  tales que:

$$(1) \quad \frac{g(\|x_k - x_i\|)}{y_i - c} = \frac{g(\|x_j - x_k\|)}{y_j - c}, \quad (x_i \geq x_j)$$

El valor  $x_k$  con menor  $y_k$ , determinará el siguiente punto de muestreo  $x_{n+1}$ . La convergencia de este algoritmo está asegurada (Ljung, 1978).

La determinación del ancho de banda por maximización de la función de pseudo-verosimilitud es inmediata aplicando este algoritmo. Es suficiente determinar dos realizaciones muestrales de partida  $h_1$  y  $h_2$ , que correspondan a los valores mínimo y máximo posibles del ancho de banda (0'2 y 4'8, para nuestras muestras). Estos valores se corresponden con  $x_1$  y  $x_2$ , de forma que  $y_1 = L(h_1)$  e  $y_2 = L(h_2)$ . A continuación, se puede calcular  $h_3$  mediante la aplicación de la expresión (1) y continuar hasta que el algoritmo converja. El número medio de iteraciones requeridas para la determinación del ancho de banda fue de 7.

## APÉNDICE

**Pertenencia de las muestras analizadas a cada uno de los grupos obtenidos en la clasificación.**

**MUESTRAS DEL GRUPO 1:**

12, 15, 38, 39, 48, 49, 61, 63, 65, 72, 85, 89, 125, 129, 140, 144, 146, 163, 166, 173, 187, 188, 191.

**MUESTRAS DEL GRUPO 2:**

14, 16, 17, 25, 44, 47, 54, 57, 75, 78, 90, 97, 107, 110, 111, 117, 118, 126, 133, 156, 200.

**MUESTRAS DEL GRUPO 3:**

3, 41, 50, 53, 71, 88, 102, 112, 121, 138, 151, 194.

**MUESTRAS DEL GRUPO 4:**

1, 4, 13, 22, 28, 52, 55, 59, 62, 68, 74, 82, 92, 98, 103, 108, 130, 137, 150, 152, 165, 167, 172, 179, 180, 181, 183, 185, 186, 198.

**MUESTRAS DEL GRUPO 5:**

9, 11, 20, 21, 24, 26, 31, 35, 42, 45, 60, 80, 81, 84, 91, 104, 114, 123, 132, 143, 149, 162, 171, 175, 177, 182, 195.

**MUESTRAS DEL GRUPO 6:**

8, 10, 27, 56, 58, 83, 86, 93, 100, 105, 131, 135, 145, 161, 170, 176, 184, 193, 199.

MUESTRAS DEL GRUPO 7:

19, 34, 66, 76, 77, 96, 99, 124, 134, 141, 142, 155, 158, 174.

MUESTRAS DEL GRUPO 8:

2, 6, 7, 33, 37, 43, 46, 69, 106, 109, 120, 127, 128, 136, 164, 169.

MUESTRAS DEL GRUPO 9:

5, 32, 70, 95, 101, 115, 122, 147, 153, 154, 157, 160, 196, 197.

MUESTRAS DEL GRUPO 10:

18, 23, 29, 30, 36, 40, 51, 64, 67, 73, 79, 87, 94, 113, 116, 119, 139, 148, 159, 168, 178, 189, 190, 192.

## 6. REFERENCIAS

- [1] Benveniste, A; Metivier, M y Priouret, P. (1990). *"Adaptive Algorithms and Stochastics Approximations"*. Springer-Verlag. Berlín.
- [2] Cencov, N.N. (1962). "Evaluation of an unknown distribution density from observations". *Soviet Math.*, **3**, 1559–1562.
- [3] Chisman, J.A. (1992). *"Introduction to Simulation Modeling Using GPSS"*. Prentice Hall. Nueva Jersey. Englewood Cliffs.
- [4] Deheuvels, P. (1977). "Estimation nonparamétrique de la densité par histogrammes généralisés". *Revue de Statistique Appliquée*, **25/3**, 5–42.
- [5] Devroye, L. (1983). "The equivalence of weak, strong, and complete convergence in  $L_1$  kernel density estimates". *Ann. Stat.*, **11**, 896–904.
- [6] Devroye, L. y Györfi, L. (1985). *"Nonparametric Density Estimation: the  $L_1$  view"*. John Wiley. Nueva York.
- [7] Devroye, L. y Penrod, C.S. (1984). "The consistency of automatic kernel density estimates". *Ann. Stat.*, **12**, 1231–1249.
- [8] Duin, R.P.W. (1976). "On the choice of smoothing parameters for Parzen estimators of probability density functions". *IEEE Transactions on Computers*, **C-25**, 1175–1179.
- [9] Epanechnikov, V.A. (1969). "Nonparametric estimates of a multivariate probability density". *Th. Prob. Applic.*, **14**, 153–158.
- [10] Friedman, J.H., Stuetzle, W. y Schroeder, A. (1984). "Projection pursuit density estimation (PPDE)". *J.A.S.A.*, **79**, 599–608.
- [11] Glivenko, V.I. (1934). *"Course in Probability Theory"*. Moscú.
- [12] Hall, P. y Marron, J.S. (1988). "Choice of kernel order in density estimation". *Th. Ann. of Stats.*, **16**, 161–173.

- [13] Hermans, J. y Habbema, J.D.F. (1976). "*Manual for the ALLOC discriminant analysis programs*". Universidad de Leiden, Dept. de Estadística Médica.
- [14] HÄRDLE, W: (1991). "*Snoothing Techniques with Implementation in S*". Springer-Verlag, Nueva York.
- [15] Hill, M. O. *et al.* (1975). "Indicator species analysis, a divisive polythetic method of classification, and its application to a survey of native pinewoods in Sctoland". *Journal Ecology*, **63**, 597–613.
- [16] Izeman, A.J. (1991). "Recent developments in nonparametric density estimation". *JASA*. Vol. 86, N<sup>o</sup> 413, 205–224.
- [17] Ljung, L. (1978). "Convergence of an adaptive filter algorithms". *Int. J. Control*, **27**, 673–693.
- [18] Loftsgaarden, D.O. y Quesenberry, C.P. (1965). "A nonparametric estimate of a multivariate density function". *Ann. Math. Statist.*, **36**, 1049–1051.
- [19] Marron, J.S. (1987). "Automatic smoothing parameter selection: a survey". *Empirical Economics*, **13**, 187–208.
- [20] Mockus, J. (1988). "*Bayesian Approach to Global Optimization*". Kluwer. Dordrecht.
- [21] Nadaraya, E.A. (1989). "*Nonparametric Estimation of Probability Densities and Regression Curves*". Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- [22] Parzen, E. (1962). "On a estimation of a probability density function and mode". *Annals Math. Statist.*, **33**, 1065–1076.
- [23] Rosenblatt, M. (1956). "Remarks on some non-parametrics estimates of a density function". *Annals Math. Statist.*, **27**, 832–837.
- [24] Scott, D.W.; Tapia, R.A. y Thompson, J.R. (1977). "Kernel density estimation revisited". *Nonlinear Analysis, Th., Met. Appl.*, **1**, 339–372.
- [25] Scott, D.W.; Tapia, R.A. y Thompson, J.R. (1980). "Nonparametric probability density estimation by discrete maximum penalized—likelihood criteria". *The Annals of Statistics*, **8**, 820–832.
- [26] Scott, D.W. y Factor, L.E. (1981). "Monte Carlo study of three data-based nonparametric probability density estimators". *JASA*, **76**, 9–15.
- [27] Silverman, B.W. (1982). "Kernel density estimation using the fast fourier transformation". *Appl. Stat.*, **31**, 93–97.
- [28] Silverman, B.W. (1986). "*Density Estimation for Statistics and Data Analysis*". Chapman and Hall, London.



## GEOMETRÍA ESTADÍSTICA EN LOS ESPACIOS DE DISTANCIA Y SECUENCIA: DOS APLICACIONES

ELADIO BARRIO, CELIA BUADES y ANDRÉS MOYA

*La Geometría estadística es un método complementario a los desarrollados hasta el momento para la inferencia y evaluación de relaciones filogenéticas entre entidades emparentadas, y que permite decidir si la estructura filogenética obtenida tiene una configuración de árbol, de estrella o de red.*

*El objetivo de este trabajo consiste en poner de manifiesto que, si bien la geometría estadística puede ayudar a decidir entre grandes topologías, no puede decidir entre tipos específicos de topologías. Para ello utilizamos dos ejemplos: el estudio por análisis de restricción del DNA mitocondrial del grupo oscura de Drosophila como ejemplo de topología en forma de árbol y la evidencia de un fenómeno de transferencia genética horizontal de la IPNS (Isopenicilina-N sintetasa) de bacterias del género Streptomyces a determinados hongos filamentosos como ejemplo de topología en forma de red.*

**Statistical geometry in distance and sequence spaces: two applications.**

**Keywords:** Statistical Geometry, phylogeny, molecular evolution, mitochondrial DNA restriction analysis, horizontal gene transfer.

---

—Departament de Genètica, Facultat de Biologia. Universitat de València. C/Dr. Moliner, 50. 46100 Burjassot, València.

—Article rebut el desembre de 1991.

—Acceptat el juny de 1992.

## 1. INTRODUCCIÓN

Hay una gran cantidad de métodos para la reconstrucción de la filogenia de un conjunto de organismos, genes o cualquier tipo de entidades relacionadas por ancestralidad, que dependen de un conjunto particular de asunciones evolutivas y/o matemáticas (hay una revisión reciente en Felsenstein, 1988). También es muy amplia la literatura estadística para la comparación de filogenias alternativas así como para la determinación de la significación de los puntos de ramificación o nodos en una filogenia (véase también Felsenstein, 1988). Un método reciente es el de la geometría estadística en los espacios de distancia y secuencia (Winkler-Oswatitsch *et al.*, 1986; Eigen *et al.*, 1988, 1989; véase también Maynard-Smith, 1989). El método suministra reglas sencillas para seleccionar la topología apropiada y para decidir si una topología filogenética, es decir una sucesión de puntos de ramificación, es propiamente una filogenia en forma de árbol, donde la ramificación es binaria, en forma de estrella, donde la ramificación es de orden superior a dos, o una filogenia en forma de red, donde pueden reunirse ramas que proceden de nodos ancestrales distintos. El método ha sido aplicado con cierto éxito a la evolución de los RNA de transferencia, a las moléculas de RNA ribosomal (Winkler-Oswatitsch *et al.*, 1986; Eigen *et al.*, 1989) y más recientemente a la evolución de viroides y virusoides (Elena *et al.*, 1991). No obstante, no conocemos hasta el momento otros ejemplos de aplicación, y específicamente de validación que no sean los basados en ejemplos estrictamente teóricos, y que estén orientados a la evaluación del método. En el presente trabajo pretendemos su aplicación a dos casos bien distintos. El método de espacio de distancia será aplicado a los resultados del análisis de restricción del DNA mitocondrial (mtDNA) de diversas especies de *Drosophila* del grupo *obscura* (Barrio *et al.*, 1992), en donde disponemos de una matriz de presencia/ausencia de sitios que caracterizan cada una de ellas. Para la aplicación del método de espacio de secuencias, disponemos de la secuencia del gen de la IPNS (también llamada ciclasa) y del RNA ribosómico 5S (5SrRNA) de bacterias del género *Streptomyces* y tres hongos filamentosos (Peñalva *et al.*, 1990). Con el primer ejemplo evaluamos la eficiencia del método de distancias para discriminar entre posibles topologías en forma de árbol. Con el segundo ejemplo, tratamos de poner de manifiesto cómo la existencia de un fenómeno de transferencia genética horizontal debe implicar una topología en forma de red.

## 2. GEOMETRÍA ESTADÍSTICA EN EL ESPACIO DE LAS DISTANCIAS

La base de datos de la que se parte es una matriz de caracteres discretos. A partir de dicha matriz se calcula la distancia genética entre pares de taxones. Posteriormente se efectúan todas las comparaciones posibles entre conjuntos de cuatro taxones (cuartetos), descomponiendo las seis distancias genéticas entre cada par de taxones que componen el cuarteto en cuatro ramas interiores, que conectan los cuatro nodos internos, y las cuatro ramas terminales (Figura 1). Dado que las ramas internas son iguales en longitud dos a dos, sólo hablamos de las distancias o longitudes internas de las ramas  $x$  e  $y$  (véase Winkler-Oswatitsch *et al.*, 1986, Figura 7 y págs. 62-63). Las seis distancias genéticas estimadas nos llevan a la resolución para cada cuarteto de las longitudes de las ramas que lo componen ( $x, y$ ) y las cuatro ramas terminales (Figura 1). Para una topología dada,  $x$  es una medida de la desviación respecto de un verdadero árbol filogenético, e  $y$  corresponde a la auténtica longitud de la rama interior de cada cuarteto. Si  $x$  e  $y$  son cero, la topología es una estrella. Si  $x$  e  $y$  son del mismo orden, la topología tiene la forma de red. Y si  $x$  es mucho menor que  $y$  la topología es la del árbol. Valores positivos de  $x$  aparecen por intercambio genético o por mutaciones paralelas reversas. Según Eigen *et al.* (1988) razones  $x/y = 0.5$  o mayores nos pueden hacer sospechar de que la auténtica topología sea de tipo árbol.

Nosotros hemos aplicado la geometría estadística en el espacio de distancias a un conjunto de 16 haplotipos de mtDNA, según los mapas de restricción correspondientes a 14 taxones del grupo *obscura* de *Drosophila*. A partir de la matriz de presencia/ausencia de sitios de restricción de los citados 16 haplotipos se estiman las distancias genéticas (Tabla 1) entre pares de taxones, siguiendo para ello el procedimiento de estima por máxima verosimilitud para sitios de restricción desarrollado por Nei (1987, pág. 104). La Figura 2 muestra un agrupamiento UPGMA de los 16 haplotipos derivados de la hemimatriz de distancias genéticas. Los recuadros sombreados que se sitúan sobre los nodos hacen referencia a los errores estándar de los mismos (Nei *et al.*, 1985). La correlación cofenética entre las matrices de distancias genéticas utilizadas para la construcción del agrupamiento por el método UPGMA (Tabla 1) y la de las distancias estimadas que se derivan como consecuencia de su utilización fue de 0.9, una bondad de ajuste muy buena. Como puede observarse hay dos agrupamientos monofiléticos de especies estrechamente emparentadas (el subgrupo Neártico de las *affinis*, haplotipos I-VI, y el subgrupo *pseudoobscura*, también neárticas, haplotipos XII-XVI), más un conjunto heterogéneo de especies más alejadas entre sí que corresponden a las especies paleárticas del grupo (subgrupo *obscura*, haplotipos VII-XI). La matriz de sitios de restricción fue también utilizada para

la construcción de un árbol, siguiendo el criterio de Wagner, que minimizase el número de mutaciones requeridas para conectar todos los haplotipos. Para ello utilizamos el programa MIX (paquete PHYLIP de inferencia filogenética, versión 3.4). El árbol más parsimónico encontrado, también mostró un agrupamiento entre los subgrupos *affinis* y *pseudoobscura*, así como la heterogeneidad del subgrupo *obscura*. Un remuestreo de 100 repeticiones por el método “bootstrap” (programa BOOT, paquete PHYLIP, versión 3.4) mostró que en el 100% de ellas, las especies del subgrupo *pseudoobscura* siempre aparecían juntas. No hay duda del carácter monofilético (es decir, origen único) de este subgrupo. En un 81% de las repeticiones, las especies del grupo *affinis* aparecían relacionadas. Sin embargo, el resto de nodos, que conectan las especies del subgrupo *obscura* entre si y con los dos subgrupos señalados, no alcanzaba el valor necesario (95% o mayor) para admitir que se trata de grupos monofiléticos.

La Tabla 2 muestra los resultados obtenidos con el método de la geometría estadística en el espacio de distancias. La media  $x/y$  ha sido calculada para subconjuntos de haplotipos, y los resultados aparecen en las diez primeras filas de la Tabla 2, ordenados de menor a mayor valor. Como puede observarse la razón  $x/y$  es inferior a 0.5 en 9 de los 10 subconjuntos de haplotipos. También se puede observar que la cuarta fila corresponde al promedio de razones  $x/y$  de todos los posibles cuartetos de haplotipos. El método de geometría estadística en el espacio de distancias se ha probado aleatorizando la matriz de presencia/ausencia de sitios de restricción 100 veces, repitiendo otras tantas veces el proceso de cálculo de distancias genéticas y parámetros de geometría estadística, obteniendo con ello los valores medios para  $x$ ,  $y$  y la razón  $x/y$ . Estos resultados aparecen reflejados en la fila 11 de la Tabla 2. Se observará que la razón obtenida es la predicha por Eigen *et al.* (1988). Los resultados obtenidos los interpretamos de la siguiente manera

- (1) El valor límite de 0.5 es apropiado para suponer que una determinada topología es de tipo árbol.
- (2) Valores inferiores a 0.5 no pueden ser tomados, no obstante, como confirmación estadística de una configuración topológica de auténtica filogenia. De hecho se han obtenido razones  $x/y$  menores de 0.5 para agrupamientos filogenéticos incompatibles. Así, de acuerdo con el resultado del remuestreo “bootstrap”, en ninguno de los nodos, excepto el que corresponde al subgrupo *pseudoobscura* (Figura 2), se garantiza que las agrupaciones que surgen de ellos sean monofiléticas. Cualquier reordenamiento de los nodos localizados en la Figura 2 con valores de distancia superior a la que corresponde al nodo del subgrupo *affinis* (incluyendo la coalescencia de todos ellos en una estrella) es compatible con los datos. Pero la geometría estadística en el espacio de distancias nos lleva a valores inferiores a 0.5

para todos los nodos mostrados en la Figura 2, así como para el caso de cualquier topología alternativa.

### 3. GEOMETRÍA ESTADÍSTICA EN EL ESPACIO DE SECUENCIAS

Los datos de partida en este caso son una matriz de secuencias de caracteres discretos, previamente alineadas. Como para el caso de las secuencias de ácidos nucleicos los estados posibles de cada carácter son cuatro, correspondientes a cada uno de los cuatro nucleótidos presentes en los mismos. Eigen y colaboradores transforman la matriz de datos cuaternarios en una de datos binarios (agrupando las bases según sean purinas o pirimidinas). Por lo tanto, en esencia, la matriz de partida es una matriz de datos binarios y, en consecuencia, los datos analizados en el apartado anterior son susceptibles de ser analizados mediante este método, y viceversa. Al igual que en el método anterior, éste se basa en el cálculo de parámetros de todos los cuartetos posibles para los taxones o entidades estudiadas. La diferencia está en que el número de parámetros no es 6, sino 8 (Figura 3). Se trata de las longitudes de las ramas que conectan los nodos internos con los taxones, más tres parámetros de longitudes internas. De hecho, los primeros son el número de caracteres que identifican a cada uno de los taxones (el carácter está presente o ausente en solo uno de los cuatro taxones). Los otros tres parámetros corresponden al número de caracteres con dos secuencias en un estado y dos en otro. Al ser tres las posibilidades de combinación, son tres los parámetros, y se definen como  $l$ ,  $m$  y  $s$ , por asignación al conjunto con mayor, medio y menor número de caracteres compartidos, respectivamente. Los caracteres presentes o ausentes en los cuatro taxones a la vez son considerados como no informativos y se excluyen, por tanto, del análisis. La Tabla 3 muestra las relaciones esperadas entre parámetros en el espacio de secuencias bajo tres situaciones: ideal, aleatoria y real; y definiendo las tres configuraciones topológicas de las que venimos hablando: árbol, estrella y red. Los resultados de secuencias reales se comparan con los de las mismas secuencias aleatorizadas. Para ello, y como ocurría en el caso de la geometría en el espacio de distancias, se procede a una aleatorización, en este caso horizontal, y al recálculo de los parámetros de geometría en el espacio de secuencias.

Para ejemplificar y criticar el método en cuestión, vamos a aplicarlo al caso relativamente bien documentado de transferencia génica horizontal de un gen, el gen de la IPNS, implicado en la síntesis de antibióticos betalactámicos, presente tanto en bacterias del género *Streptomyces*, como en antecesores de determi-

nado grupo de hongos filamentosos. Hemos utilizado las secuencias del gen de la IPNS de 7 organismos (tres hongos filamentosos: *Acremonium chrysogenum*, *Penicillium chrysogenum*, y *Aspergillus nidulans*, tres bacterias del género *Streptomyces*: *S. clavuligerus*, *S. lipmanii* y *S. jumonjinensis*, así como una bacteria gram negativa del género *Flavobacterium*) y la secuencia del RNA ribosómico 5S de cinco organismos (los tres hongos filamentosos, un *Streptomyces* y una bacteria gram negativa). Para adquirir una mayor información sobre el tema, el lector puede acudir al artículo de Peñalva y col. (1990) y las referencias allí citadas. Hay que señalar que todas las secuencias analizadas fueron obtenidas de la base de datos del EMBL en Heidelberg, Alemania. La Tabla 4 muestra los resultados obtenidos tanto de los genes de la IPNS en un conjunto de especies, así como los relativos a los genes 5SrRNA, muy utilizados en la literatura como reloj molecular y de los que, por supuesto, se sabe que no han sufrido transferencia horizontal alguna. Es evidente que las relaciones entre los parámetros definen más nítidamente una topología en forma de árbol para el caso de los genes 5SrRNA que para el de los de la IPNS (véase relaciones esperadas en la Tabla 3). Pero, al igual que ocurría con la geometría estadística en el espacio de las distancias, la geometría estadística en el espacio de secuencias solo sugiere la posibilidad, pero no discrimina nítidamente. En otras palabras, la forma de árbol del 5SrRNA está más cerca de las relaciones ideales para dicha topología que el caso de la topología obtenida con los genes de la IPNS. Sin embargo, ello no nos permite concluir que el segundo caso no corresponda a una topología de árbol como lo es el primero. Está claro que cuando se produjo el suceso de transferencia, la topología correspondiente a la evolución del gen de la IPNS era en forma de red, y en forma de árbol para la de los genes 5SrRNA. Pero desde entonces se ha dado un proceso de evolución gradual y acumulación de mutaciones que nos ha puesto frente a una nueva topología que no es exactamente una red, pero tampoco exactamente un árbol. Tal incertidumbre no la puede resolver la geometría estadística en el espacio de las secuencias, y por ende, hemos de recurrir a otros procedimientos.

## Agradecimientos

Agradecemos al SERBIO (Servicio de Bioinformática de la Universitat de Valencia) los servicios de computación. El trabajo ha sido financiado por los proyectos BIO89-0668-C03-03 y PB90-0491 de la CICYT y DGICYT, respectivamente, así como por una beca de la Conselleria de Cultura, Educació i Ciència de la Generalitat valenciana otorgada a E. B.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Barrio, E.; Latorre, A.; Moya, A. and Ayala, F.J. (1992). "Phylogenetic reconstruction of the *Drosophyla obscura* group on the basis of mitochondrial DNA." *Mol. Biol. Evol.*, **9**, 621-635.
- [2] Eigen, M.; Lindemann, B.F.; Tietze, M.; Winkler-Oswatitsch, R.; Dress, A. and von Haeseler, A. (1989). "How old is the genetic code? Statistical geometry of tRNA provides an answer". *Science*, **244**, 673-679.
- [3] Eigen, M.; Winkler-Oswatitsch, R. and Dress, A. (1988). "Statistical geometry in sequence space: a method of quantitative sequence analysis". *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **85**, 5913-5917.
- [4] Elena, S.F.; Dopazo, J.; Flores, R.; Diener, T.O. and Moya, A. (1991). "Phylogeny of viroids, viroidlike satellite RNAs, and the viroidlike domain of hepatitis delta virus". *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **88**, 5631-5634.
- [5] Felsenstein, J. (1988). "Phylogenies from molecular sequences: inferences and reliability". *Annual Review of Genetics*, **22**, 521-565.
- [6] López-Bueno, J.A. and Moya, A. (1992). "GEOSEQ: A Pascal program to calculate statistical geometry parameters of aligned nucleic acid sequences". *Computer Applications in the Biosciences*, en prensa.
- [7] Maynard-Smith, J. (1989). "Trees, bundles or nets?". *Trends in Ecology and Evolution*, **4**, 302-304.
- [8] Nei, M. (1987). *Molecular Evolutionary Genetics*. Columbia University Press, New York.
- [9] Nei, M.; Stephens, J.C. and Saitou, N. (1985). "Methods for computing the standar errors of branching points in a evolutionary tree and their application to molecular data from human and apes". *Molecular Biology and Evolution*, **2**, 66-85.
- [10] Peñalva, M.A.; Moya, A.; Dopazo, J. and Ramón, D. (1990). "Sequences of isopenicillin N synthetase genes suggest horizontal gene transfer from prokaryotes to eukaryotes". *Proc. Roy. Soc. Lond. B* **241**, 164-169.
- [11] Winkler-Oswatitsch, R.; Dress, A. and Eigen, M. (1986). "Comparative sequence analysis". *Chemica Scripta*, **26B**, 59-66.

**Tabla 1**

Hemimatriz de divergencia nucleotídica entre los haplotipos mitocondriales determinados en las especies de *Drosophila* del grupo *obscura* (para más información sobre la correspondencia entre haplotipo y especie, véase Figura 2). Las estimas de distancia genética se calculan a partir de los datos de presencia/ausencia de los sitios de restricción de trece endonucleasas en el DNA mitocondrial de estas especies (Barrio *et al.*, 1992), y utilizando el procedimiento de máxima verosimilitud desarrollado por Nei (1987, pág. 104).

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI
I	-															
II	0.013	-														
III	0.010	0.003	-													
IV	0.023	0.021	0.018	-												
V	0.027	0.024	0.021	0.036	-											
VI	0.051	0.041	0.038	0.047	0.039	-										
VII	0.106	0.103	0.100	0.080	0.107	0.097	-									
VIII	0.109	0.095	0.092	0.092	0.110	0.090	0.086	-								
IX	0.085	0.082	0.080	0.088	0.084	0.077	0.093	0.096	-							
X	0.114	0.111	0.108	0.107	0.115	0.106	0.114	0.107	0.077	-						
XI	0.094	0.100	0.097	0.097	0.093	0.095	0.124	0.095	0.100	0.119	-					
XII	0.104	0.100	0.098	0.097	0.115	0.126	0.126	0.106	0.111	0.141	0.091	-				
XIII	0.108	0.105	0.102	0.101	0.121	0.133	0.132	0.111	0.117	0.148	0.104	0.012	-			
XIV	0.107	0.104	0.101	0.100	0.118	0.130	0.129	0.109	0.115	0.144	0.094	0.008	0.015	-		
XV	0.097	0.094	0.091	0.091	0.108	0.120	0.118	0.099	0.104	0.135	0.085	0.006	0.012	0.009	-	
XVI	0.098	0.094	0.091	0.082	0.097	0.110	0.108	0.099	0.094	0.116	0.094	0.028	0.037	0.032	0.022	-



Tabla 2

Parámetros obtenidos mediante el método de la geometría estadística en el espacio de las distancias para diferentes agrupamientos de especies. El cociente  $x/y$  determina la desviación de la topología de árbol (para más detalles ver el texto). Abreviaturas:  
 aff = *affinis*, amb = *ambigua*, bif = *bifasciata*, gua = *guanche*, obs = *obscura*,  
 pse = *pseudoobscura* y sub = *subobscura*.

Agrupamientos		$x$	$y$	$x/y$
1.	Subgrupo <i>pseudoobscura</i> frente al resto	0.0023	0.0612	0.0377
2.	Par <i>ambigua-obscura</i> frente al resto	0.0033	0.0302	0.1103
3.	Subgrupo <i>affinis</i> frente al resto	0.0052	0.0450	0.1163
4.	Todas las especies estudiadas	0.0042	0.0336	0.1237
5.	Cuarteto sub-gua-amb-obs frente al resto	0.0052	0.0278	0.1877
6.	Subgrupo <i>obscura</i> frente al resto	0.0061	0.0274	0.2226
7.	Par <i>subobscura-guanche</i> frente al resto	0.0069	0.0243	0.2842
8.	Trío bif-obs-amb frente al resto	0.0078	0.0231	0.3379
9.	Cuarteto amb-obs-gua-sub frente a bif frente subgrupo pse frente subgrupo bif	0.0073	0.0171	0.4282
10.	Par amb-obs frente par sub-gua frente subgrupo aff frente subgrupo pse con bif	0.0097	0.0041	2.3742
11.	Agrupamientos al azar desde	0.0144	0.0079	0.5541
	a	0.0406	0.0261	6.7626

Tabla 3

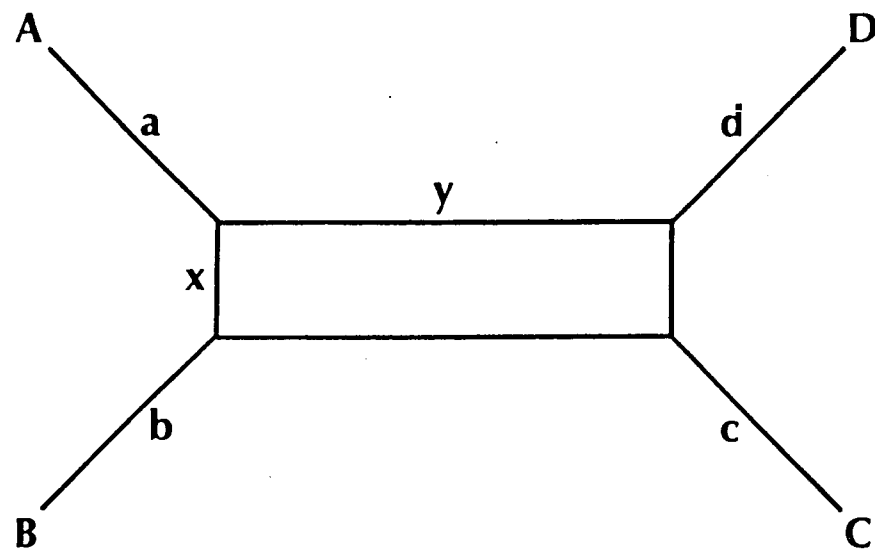
Valores de referencia esperados para los tres grandes tipos de topologías según los parámetros medios de geometría estadística en el espacio de secuencias.

Situación	Estrella	Árbol	Red
Ideal	$l = m = s = 0$	$m = s = 0, l > 0$	$m = (a + b + c + d)/4$
Aleatorio	$l = m = s$	$m, s \geq (a + b + c + d)/4$	
Real	$l \approx m \approx s$	$l \gg m, s$	$m \approx (a + b + c + d)/4$

Tabla 4

Valores medios de geometría estadística en el espacio de secuencias obtenidos en el estudio de dos genes: el de la IPNS (7 secuencias alineadas de 1024 nucleótidos, 35 cuartetos posibles) y el del RNA ribosómico 5S (5 secuencias alineadas de 123 nucleótidos, 5 cuartetos posibles). El procedimiento de aleatorización de las secuencias se siguió utilizando el algoritmo descrito por López-Bueno y Moya (1992). Para más información sobre las especies de procedencia de las secuencias consúltase Peñalva *et al.* (1990).

Parámetros	Secuencias			
	IPNS		5SRNA	
	Reales	Aleatorizadas	Reales	Aleatorizadas
$a$	82.54	131.45	16.20	16.04
$b$	54.23	129.44	8.20	15.80
$c$	42.83	126.26	4.00	15.36
$d$	70.23	127.06	4.40	16.48
$l$	76.14	139.35	17.20	18.24
$m$	23.71	128.62	2.60	14.52
$s$	17.63	118.45	0.60	11.64
$2l - (m + s)$	110.94	31.62	31.20	10.32



**Figura 1.**  
Parámetros medios de geometría estadística en el espacio de las distancias. Véase texto para más información.

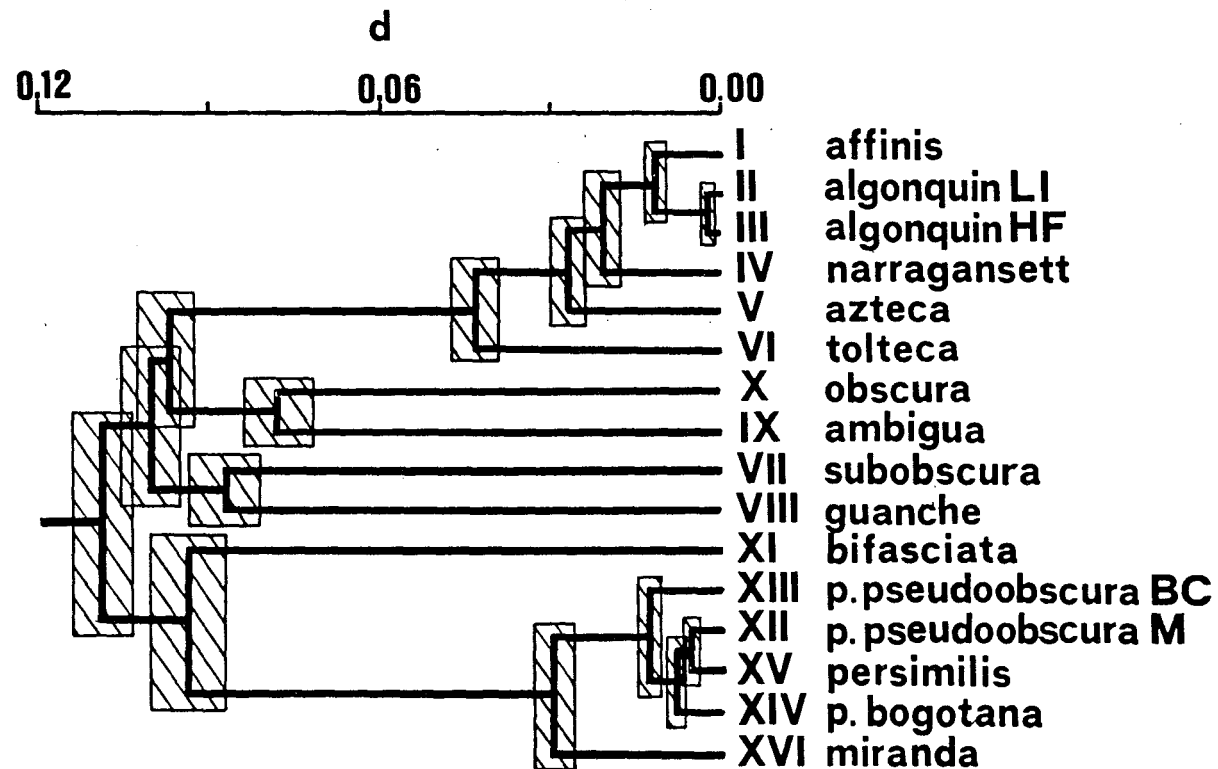


Figura 2.  
Agrupamiento siguiendo el procedimiento UPGMA de las distancias entre haplotipos mitocondriales de las especies del grupo *obscura* de *Drosophila*.

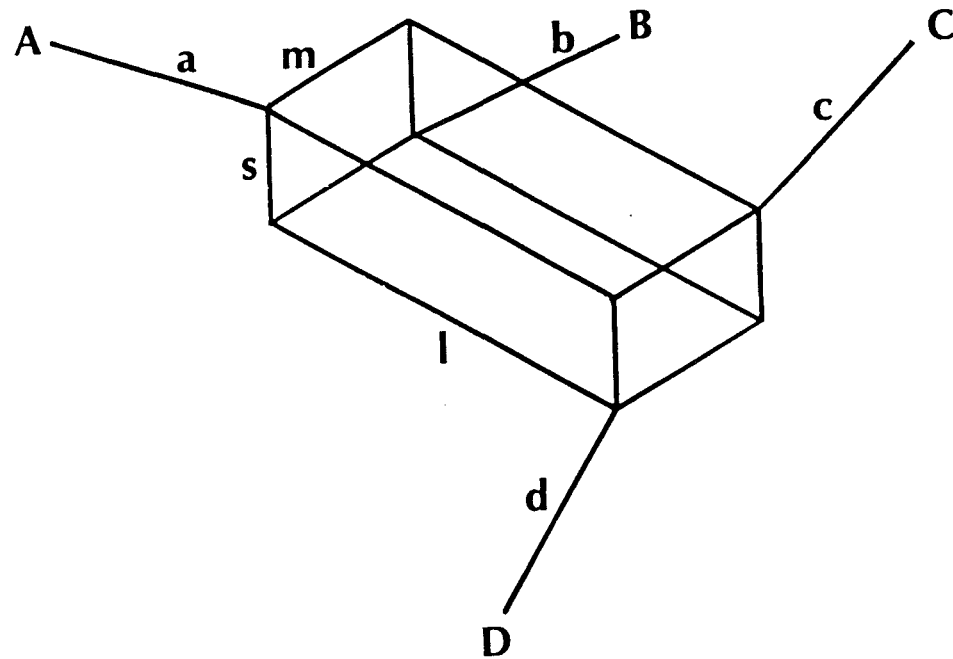


Figura 3.  
Parámetros medios de geometría estadística en el espacio de las secuencias. Véase texto para más información.

## ENGLISH SUMMARY:

### STATISTICAL GEOMETRY IN DISTANCE AND SEQUENCE SPACES: TWO APPLICATIONS

Eladio Barrio, Celia Buades y Andrés Moya

#### 1. INTRODUCTION

Statistical geometry is a new approach that complements existing methods for comparing alternative phylogenies and for assessing the significance of the topological location of the branching points in a phylogeny, allowing to select the appropriate topology; that is to say, a tree-like tipology, a ‘bundle’ (i.e., an effectively simultaneous split of all branches) or a ‘net’ (i.e., such as might arise by hybridization or lateral genetic transfer).

In the present paper we show that, although statistical geometry helps to choose between phylogenetic topologies, it cannot decide between specific topological types.

#### 2. STATISTICAL GEOMETRY IN DISTANCE SPACE

Two methods are presented. The first one is the statistical geometry in distance space. This method calculates two internal parameters of distance,  $x$  and  $y$ , that are mean values obtained from all possible quartets of species (i.e., Operative taxonomical units, OTUs). The data available are genetic distances between species, and for each quartet there are six distances that can be partitioned in six unknown partial distances:  $x, y$  as internal distances, and four more corresponding to the external branches. The  $x/y$  ratio can be used to decide between the different topological types mentioned above. Data of genetic distances obtained from restriction site analysis of the mitochondrial DNA of the *Obscura* group of *Drosophila* are used to verify the efficiency of the statistical method in distance space. In fact  $x/y$  ratios less than 0.5 indicate tree-like topologies. The method tell us that the phylogeny for the total set of species is a tree-like topology, but when try to decide between specific sets, the ratios are mostly less

than 0.5 and some of such sets are clearly improbable from a phylogenetic point of view.

### 3. STATISTICAL GEOMETRY IN SEQUENCE SPACE

In this case the data set is a matrix of aligned nucleic acid sequences. The matrix is directly used for the method of statistical geometry in sequence space, but only two states are allowed for each character. If more than two states occur, they should be reduced to only two. A network connecting each possible quartet of binary sequences is generated and each position in a given quartet is assigned to one of the following eight parameters:  $a, b, c, d, l, m, s$  and  $x$ .  $a, b, c$ , and  $d$  are the number of character for which the four species are odd man out, while  $l, m$  and  $s$  (for large, medium and small) are the numbers of characters with two sequences in one state and two in the other.  $x$  is the number of uninformative characters. As the previous one, we have used the method in order to choose between a tree, a bundle or a net.

To verify the efficiency of the method, data sequence of two different genes have been used: the 5SrRNA gene, a typical molecular clock used in molecular evolutionary studies to construct phylogenetic trees, and the IPNS gene (i.e., isopenicillin N synthetase), that has probably been horizontally transferred from *Streptomyces* to an ancient fungi. The relationship between internal mean values corresponding to quartets of 5SrRNA genes are closer than the IPNS genes to a tree topology. Horizontal gene transfer has previously been put into evidence in the case of IPNS, but the statistical geometry in sequence space is not able to say why the 5SrRNA is a tree topology and IPNS a net topology. In other words, there is no statistical procedure to decide between both topological types.





## SOME REMARKS ON THE INDIVIDUALS-SCORE DISTANCE AND ITS APPLICATIONS TO STATISTICAL INFERENCE

ANTONIO MIÑARRO and JOSEP M. OLLER

*This paper is concerned with the study of some properties of the distance between statistical individuals based on representations on the dual tangent space of a parametric manifold representation of a statistical model. Explicit expressions for distances are obtained for well-known families of distributions. We have also considered applications of the distance to parameter estimation, testing statistical hypotheses and discriminant analysis.*

AMS 1980 subjects classifications: 62A99, 62F03, 62F10.

**Keywords:** informative geometry, statistical individuals, distances between individuals, statistical inference.

---

—Dept. of Statistics. University of Barcelona. SPAIN.

—Article rebut el desembre de 1991.

—Acceptat el març de 1992.

## 1. INTRODUCTION

Given a measurable space  $(\chi, \mathcal{A})$  let  $\Pi$  be the set of all probability measures on  $(\chi, \mathcal{A})$ . Let  $P_M$  be a subset of  $\Pi$ ,  $P_M \subset \Pi$ . We may define a statistical model as a family of probability spaces

$$M = \{(\chi, \mathcal{A}, P) : P \in P_M\}$$

The statistical model is often defined through an  $n$ -dimensional  $C^\infty$  real and connected manifold  $(P_M, \phi_{P_M})$ , where  $P_M \subset \Pi$  and  $\phi_{P_M}$  is a maximal  $C^\infty$  atlas on  $P_M$ . If the probability measures of  $P_M$  are dominated by a common reference measure  $\mu$ , taking into account the Radon-Nikodym theorem we are able to represent  $(P_M, \phi_{P_M})$  by a manifold of measurable functions, or, more precisely, equivalent classes of measurable functions  $(D^\lambda, \phi_{D^\lambda})$ , where  $D^\lambda \subset \mathcal{F}$ , through the map

$$\begin{array}{ccc} \Phi_\lambda : & P_M & \longrightarrow & D^\lambda \\ & P & \longrightarrow & \lambda \left( \frac{dP}{d\mu} \right) \end{array}$$

where  $\lambda$  is a strictly monotonous real function,  $\mathcal{F}$  stands for the set of all measurable functions on  $(\chi, \mathcal{A})$  and the  $\phi_{D^\lambda}$  is obtained by considering all the local charts of the form

$$(\Phi_\lambda(U), \xi \circ \Phi_\lambda^{-1}) \quad \forall (U, \xi) \in \phi_{P_M}$$

We may call  $(D^\lambda, \phi_{D^\lambda})$  the  $\lambda$ -representation of our statistical model. We shall restrict our study to function manifolds which satisfy some adequate regularity conditions such as for every local chart  $(U, \xi)$  and given any point  $q \in U \subset D^\lambda$  of coordinates  $\theta = \xi(q)$  the functions in  $x$ ,  $\frac{\partial \lambda(p(x; \theta))}{\partial \theta_i}$   $i = 1, \dots, n$  are linearly independent, and belong to a convenient  $\mathcal{L}^\alpha(p(\cdot; \theta)d\mu)$ . Also, the partial derivatives  $\partial/\partial \theta_i$  and the integration with respect to the measure  $p(\cdot; \theta)d\mu$  can always be interchanged.

Let  $\lambda(p(\cdot; \theta))$  be a point  $q \in U \subset D^\lambda$  with coordinates  $\theta = \xi(q)$ , we denote by  $D_q^\lambda$  the tangent space to  $D^\lambda$  at the point  $q$ .  $D^\lambda$  may be represented by the vectorial space  $E_\theta^\lambda \in \mathcal{L}^2(p(\cdot; \theta)d\mu)$  defined by

$$E_\theta^\lambda = \left\langle \frac{\partial \lambda(p(\cdot; \theta))}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial \lambda(p(\cdot; \theta))}{\partial \theta_n} \right\rangle$$

through the map

$$\begin{aligned} \Xi : D_{\theta}^{\lambda} &\longrightarrow E_{\theta}^{\lambda} \\ X_q &\longrightarrow \Xi(X_q) = \sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial \lambda(p(\cdot; \theta))}{\partial \theta_i} \end{aligned}$$

where  $x_1, \dots, x_n$  are the coordinates of  $X_q$  relative to the usual basis of the tangent space  $D_q^{\lambda}$  corresponding to the local chart  $(U, \xi)$ , and defined by  $(\frac{\partial}{\partial \theta_i})_q f = D_i(f \circ \xi^{-1})(\xi(q))$   $i = 1, \dots, n$ , where the differentiation on the right is the usual in  $\mathbb{R}^n$ .

We may now define an inner product on  $D_q^{\lambda}$  by

$$\begin{aligned} \langle X_q, Y_q \rangle &\equiv \langle \Xi(X_q), \Xi(Y_q) \rangle = \\ &\sum_{i,j=1}^n x_i y_j \int_{\chi} \frac{\partial \lambda(p(\cdot; \theta))}{\partial \theta_i} \frac{\partial \lambda(p(\cdot; \theta))}{\partial \theta_j} \phi(p(x; \theta)) d\mu(x) \end{aligned}$$

where if we require that this inner product has to be invariant under reference measure changes, we obtain the inner product matrix

$$g_{ij}(\theta) = k E \left( \frac{\partial \ln p(x; \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial \ln p(x; \theta)}{\partial \theta_j} \right) \quad i, j = 1, \dots, n$$

which is, up to a proportionality constant, the Fisher information matrix, Rao (1945), see Oller(1989) for more details.

From now on we shall consider  $\lambda(x) = \ln(x)$  and we shall denote by  $E_{\theta}^l$  the representation of the tangent space  $D_{\theta}^l$ .

Let us consider the manifold  $(D^l, \phi_{D^l})$  representation of a statistical model. Given a point coordinated by  $\theta$  there is a natural way to represent statistical individuals as linear forms on  $E_{\theta}^l$ , through the map:

$$(1.1) \quad \begin{aligned} \delta : \chi &\longrightarrow E_{\theta}^{l*} \\ x &\longrightarrow \delta(x) = Y^* \end{aligned}$$

in such a way that  $Y^*(Y) = Y(x) \quad \forall Y \in E_{\theta}^l$ . Every statistical individual can be represented as an element of  $E_{\theta}^{l*}$  of coordinates

$$x \rightarrow (\partial_1 \ln p(x; \theta), \dots, \partial_n \ln p(x; \theta))$$

where  $\partial_i \ln p(x; \theta) \equiv \frac{\partial \ln p(x; \theta)}{\partial \theta_i}$ .

Notice that on the whole manifold, without considering a given point  $\theta$ , every statistical individual can be identified with a first order covariant tensor field.

Through representation (1.1), we may define a pseudodistance on  $\chi$  by

$$(1.2) \quad d_{\chi}^2(\tilde{x}, x) = d_{E_{\theta}^*}^2(Y^*, Y^*) = \langle \tilde{Y}^* - Y^*, \tilde{Y}^* - Y^* \rangle_{E_{\theta}^*} =$$

$$= (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{x}; \theta) - \partial_{\theta} \ln p(x; \theta))' G^{-1}(\theta) (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{x}; \theta) - \partial_{\theta} \ln p(x; \theta))$$

where

$$\partial_{\theta} \ln p(\tilde{x}; \theta) \equiv \left( \frac{\partial \ln p(\tilde{x}; \theta)}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial \ln p(\tilde{x}; \theta)}{\partial \theta_n} \right)'$$

For this pseudodistance to be a proper distance we may define an equivalence relation on  $\chi$  as  $x \sim \tilde{x} \iff d_{\chi}^2(x, \tilde{x}) = 0$ , and extending the pseudodistance  $d_{\chi}$  to the equivalence classes of the quotient set  $\chi / \sim$ .

Notice that the defined distance is not an intrinsic distance between individuals in the sense of Rao(1982), since it depends on the statistical model and on the population to which individuals belong, characterized by the coordinates  $\theta$ . Additional details may be found in Cuadras (1989a,b), Oller (1989) and Miñarro (1991).

## 2. SOME PROPERTIES OF THE SCORE DISTANCE BETWEEN STATISTICAL INDIVIDUALS

### Proposition 2.1

The distance (1.2) is invariant under reference measure changes  $\mu \rightarrow \nu$  such that  $\mu \ll \nu$ .

**Proof:**

It follows from the invariance of Fisher information matrix and of the coordinates  $(\partial_1 \ln p(x/\theta), \dots, \partial_n \ln p(x/\theta))$  ■

**Proposition 2.2**

Let  $T$  be a measurable map from  $(\chi, a)$  into  $(\chi', a')$ , with  $P'(B) = \int_B g(\mathbf{t}; \theta) d\nu(\mathbf{t}) \quad \forall B \in a'$ . Where  $P' = PT^{-1}$  and  $\nu$  is a  $\sigma$ -finite reference measure on  $a'$ . If  $T$  is a sufficient statistic then:

$$(2.1) \quad d_{\chi}^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x}) = d_{\chi'}^2(\tilde{\mathbf{t}}, \mathbf{t})$$

where  $\mathbf{t} = T(\mathbf{x})$  and  $\tilde{\mathbf{t}} = T(\tilde{\mathbf{x}})$ .

**Proof:**

It follows from the invariance of Fisher information matrix and from the Neyman-Fisher factorization criterion, since then:

$$(2.2) \quad p(\mathbf{x}; \theta) = g(\mathbf{t}; \theta) h(\mathbf{x})$$

and from (1.2) it follows immediately (2.1) ■

**Proposition 2.3**

The distance (1.2) is not decreasing if the number of parameters increases.

**Proof:**

(1.2) may be represented by the quadratic form  $u'G^{-1}u$  where  $u = (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta) - \partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta))$ . Let us remember that  $G$  is a symmetric and positive definite matrix. Let us consider now  $u = (u_1, u_2)$  and

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

The proposition will be proved if we show that  $u'G^{-1}u - u'_1G_{11}^{-1}u_1 \geq 0$ , where

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} G^{11} & G^{12} \\ G^{21} & G^{22} \end{pmatrix}$$

Let us break down  $u = v + w$  where  $v = (G_{11}G_{11}^{-1}u_1, G_{21}G_{11}^{-1}u_1)'$  and  $w = (0, u_2 - G_{21}G_{11}^{-1}u_1)'$ , then  $u'G^{-1}u = w'G^{-1}w + v'G^{-1}v + 2v'G^{-1}w$ . Immediately  $w'G^{-1}w \geq 0$ , since  $G^{-1}$  is also positive definite, and we can easily see

that  $v'G^{-1}v = u_1'G_{11}^{-1}u_1$  and also that  $v'G^{-1}w = 0$ . So  $u'G^{-1}u - u_1'G_{11}^{-1}u_1 = w'G^{-1}w \geq 0$  ■

#### Proposition 2.4

Let  $\theta_1^1, \dots, \theta_{n_1}^1, \theta_1^2, \dots, \theta_{n_2}^2, \dots, \theta_1^k, \dots, \theta_{n_k}^k$  be the parameters of the density corresponding to a statistical model, where  $n_1 + \dots + n_k = n$ . If the Fisher information matrix is of the form

$$G(\theta) = \begin{pmatrix} A_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_k \end{pmatrix}$$

where  $A_i$  are  $n_i \times n_i$  matrices. The squared distance between two statistical individuals in the dual tangent space to the manifold coordinated by  $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n)$  is equal to the sum of the  $k$  squared distances between the individuals in the  $k$  dual tangent spaces of the  $k$   $n_i$ -dimensional manifolds coordinated by  $\theta_i = (\theta_1^i, \dots, \theta_{n_i}^i)$   $i = 1, \dots, k$ . As a particular case if  $p_1(\mathbf{x}_1; \theta_1), \dots, p_k(\mathbf{x}_k; \theta_k)$  are representations of  $k$  independent statistical models, then the distance between two individuals on the model  $p_{1\dots k}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k; \theta_1, \dots, \theta_k)$  is obtained from

$$(2.3) \quad d_{1\dots k}^2((\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k), (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k)) = d_1^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) + \dots + d_k^2(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k)$$

where  $d_i^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$  is the distance on the model  $p_i(\mathbf{x}_i; \theta_i)$ .

#### Proof:

It follows from definition (1.2) and from the fact that the inverse Fisher information matrix is of the form

$$G^{-1}(\theta) = \begin{pmatrix} A_1^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_2^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_k^{-1} \end{pmatrix}$$

■

### 3. DISTANCES FOR SOME WELL-KNOWN DISTRIBUTIONS

In this section we show the resulting expressions of (1.2) for some well-known families of distributions. The two individuals are considered to be samples of size  $m$ ,  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)$  and  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$ .

#### 3.1 One-parameter distributions

<i>Distribution</i>	$d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$
Poisson ( Mean $\lambda$ )	$\frac{m}{\lambda}(\bar{x} - \bar{y})^2$
Weibull ( Mean $\frac{\Gamma(1+\frac{1}{r})}{\lambda}$ ( $r$ known ) )	$\frac{\lambda^2}{m} (\sum_{i=1}^m (x_i^r - y_i^r))^2$
Gamma ( Mean $\frac{p}{\alpha}$ ( $p$ known ) )	$\frac{m}{p} \alpha^2 (\bar{x} - \bar{y})^2$
Exponential ( Mean $\frac{1}{\alpha}$ )	$m \alpha^2 (\bar{x} - \bar{y})^2$
Binomial ( Mean $mp$ )	$\frac{(x-y)^2}{mp(1-p)}$
Negative Binomial ( Mean $\frac{k(1-p)}{p}$ ( $k$ known ) )	$\frac{(x-y)^2 p^2}{k(1-p)}$
N ( $\mu, \sigma_0$ ) ( $\sigma_0$ known )	$\frac{m}{\sigma_0^2} (\bar{x} - \bar{y})^2$
N ( $\mu_0, \sigma$ ) ( $\mu_0$ known )	$\frac{m}{2\sigma^4} (S^2(\mathbf{x}) - S^2(\mathbf{y}))^2$

where  $\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$  and  $S^2(\mathbf{x}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_0)^2$ .

Note that most of the cases above are particular cases of the exponential family  $p(\mathbf{x}; \theta) = \exp\{Q(\theta)T(\mathbf{x}) + D(\theta) + S(\mathbf{x})\}$  where the distance takes the form

$$d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \{Q''(\theta)E[T(\mathbf{x})] - D''(\theta)\}^{-1} \{Q'(\theta)\}^2 \{T(\mathbf{x}) - T(\mathbf{y})\}^2.$$

### 3.2 Multiparameter distributions

We now consider some multiparameter examples.

- **Multinomial distribution**

$$p(x_1, \dots, x_{n+1}; p_1, \dots, p_n) = \frac{m!}{x_1! \dots x_{n+1}!} (p_1)^{x_1} \dots (p_{n+1})^{x_{n+1}}$$

The squared distance is:

$$(3.1) \quad d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{n+1} \frac{(x_i - y_i)^2}{p_i}$$

- **Negative Multinomial distribution**

$$p(x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n) = \frac{(x_1 + \dots + x_n + r - 1)!}{x_1! \dots x_n! (r - 1)!} (p_1)^{x_1} \dots$$

$$\dots (p_n)^{x_n} (1 - p_1 - \dots - p_n)^r$$

The squared distance is:

$$(3.2) \quad d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1 - p_1 - \dots - p_n}{r} \left( \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - y_i)^2}{p_i} - \left( \sum_{i=1}^n (x_i - y_i) \right)^2 \right)$$

- **Distributions of the form**  $p(x_1, \dots, x_m; \mu, \beta) = \prod_{i=1}^m \frac{1}{\beta} F \left[ \left( \frac{x_i - \mu}{\beta} \right)^2 \right]$ .

Where  $\mu \in \mathbb{R}$ ,  $\beta > 0$  and  $F : \mathbb{R}^+ \cup \{0\} \longrightarrow \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$  with

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(u^2) du = 1$$

Assuming that

$$a = 4 \int_0^{\infty} t^{1/2} (\mathcal{L}F)^2(t) F(t) dt < \infty$$

and

$$b = \int_{-\infty}^{\infty} (1 + 2(\mathcal{L}F)(u^2)) u^2 f(u^2) du < \infty$$



where  $\mathcal{L}F \equiv \frac{F'}{F}$ . The squared distance is:

$$\begin{aligned}
 d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = & \frac{4}{mb} \left[ \sum_{i=1}^m (\mathcal{L}F) \left( \left( \frac{x_i - \mu}{\beta} \right)^2 \right) \left( \frac{x_i - \mu}{\beta} \right) - \sum_{i=1}^m (\mathcal{L}F) \left( \left( \frac{y_i - \mu}{\beta} \right)^2 \right) \left( \frac{y_i - \mu}{\beta} \right) \right]^2 + \\
 & + \frac{4}{ma} \left[ \sum_{i=1}^m (\mathcal{L}F) \left( \left( \frac{x_i - \mu}{\beta} \right)^2 \right) \left( \frac{x_i - \mu}{\beta} \right)^2 - \sum_{i=1}^m (\mathcal{L}F) \left( \left( \frac{y_i - \mu}{\beta} \right)^2 \right) \left( \frac{y_i - \mu}{\beta} \right)^2 \right]^2
 \end{aligned}
 \tag{3.3}$$

Some results on this family may be found in Mitchell (1988). Some of the following are particular cases of the mentioned above.

- **Normal distribution**  $N(\mu, \sigma)$ .

The squared distance is:

$$(3.4) \quad d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{m}{2\sigma^4} (2\sigma^2(\bar{x} - \bar{y})^2 + (S^2(\mathbf{x}) - S^2(\mathbf{y}))^2)$$

where  $\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$   $\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i$   $S^2(\mathbf{x}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_0)^2$ .

- **Logistic distribution**

$$p(x_1, \dots, x_m; \alpha, \beta) = \prod_{i=1}^m \frac{1}{4\beta} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{x_i - \alpha}{2\beta} \right)$$

The squared distance is:

$$\begin{aligned}
 d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = & 3 \left( \sum_{i=1}^m (T(x_i) - T(y_i)) \right)^2 + \\
 (3.5) \quad & \frac{9}{\beta^2(\pi^2 + 3)} \left( \sum_{i=1}^m (x_i T(x_i) - y_i T(y_i) + \alpha(T(x_i) - T(y_i))) \right)^2
 \end{aligned}$$

where  $T(x_i) = \tanh \left( \frac{x_i - \alpha}{2\beta} \right)$ .

- **Wald distribution**

$$p(x_1, \dots, x_m; \lambda, \mu) = \prod_{i=1}^m \left( \frac{\lambda}{2\pi x_i^3} \right)^{1/2} \exp \left( - \left( \frac{\lambda(x_i - \mu)^2}{2\mu^2 x_i} \right) \right)$$

The squared distance is:

$$(3.6) \quad d^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\lambda^2}{2m\mu^4} \left( m(\bar{x} - \bar{y}) + \mu^2 \sum_{i=1}^m \frac{x_i - y_i}{x_i y_i} \right)^2 + \frac{\lambda m}{\mu^3} (\bar{x} - \bar{y})^2$$

where  $\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$ .

- **Multivariate normal distribution  $N(M, \Sigma_0)$  ( $\Sigma_0$  known).**

The squared distance between two individuals  $X$  and  $Y$  is:

$$(3.7) \quad d^2(X, Y) = (X - Y)' \Sigma_0^{-1} (X - Y)$$

Notice that (3.7) is identical to Mahalanobis distance, although the latter between populations, Mahalanobis (1936).

- **Multivariate normal distribution  $N(M_0, \Sigma)$  ( $M_0$  known).**

The squared distance between  $X$  and  $Y$  is now:

$$(3.8) \quad d^2(X, Y) = \frac{1}{2} ((\Delta Y' \Sigma^{-1} \Delta Y)^2 + (\Delta X' \Sigma^{-1} \Delta X)^2 - 2(\Delta X' \Sigma^{-1} \Delta Y)^2)$$

where  $\Delta X = X - M_0$ .

- **Multivariate normal distribution  $N(M, \Sigma)$ .**

The squared distance between  $X$  and  $Y$  is:

$$(3.9) \quad d^2(X, Y) = (X - Y)' \Sigma_0^{-1} (X - Y) + \frac{1}{2} ((\Delta Y' \Sigma^{-1} \Delta Y)^2 + (\Delta X' \Sigma^{-1} \Delta X)^2 - 2(\Delta X' \Sigma^{-1} \Delta Y)^2)$$

that can also be written in the alternative form:

$$(3.10) \quad d^2(X, Y) = (X - Y)' \Sigma_0^{-1} (X - Y) + \frac{1}{2} ((\Delta X' + \Delta Y') W (\Delta X - \Delta Y))$$

where  $\Delta X = X - M_0$  and  $W = \Sigma^{-1} (\Delta X \Delta X' - \Delta Y \Delta Y') \Sigma^{-1}$ .

## 4. SOME APPLICATIONS TO STATISTICAL INFERENCE

### 4.1 Parameter estimation

We may define an estimation procedure based on geometric considerations by using the distance between statistical individuals. Given a sample, from which we wish to estimate the coordinates of the density, we require that the expected distance between our actual sample and any other possible sample from the population be minimal. That is, we wish determine the value  $\hat{\theta}$  of  $\theta$ , provided that exists, which minimizes the function:

$$(1.1) \quad E_{\theta}(d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x})) = \int_{\mathcal{X}} d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x}) p(\mathbf{x}; \theta) d\mu(\mathbf{x})$$

If this value exists, it is the *minimum expected squared distance estimator* (MESD) of  $\theta$ . Taking into account definition (1.2) and that  $E_{\theta}(\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta)) = 0$  and

$$E_{\theta}((\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta)) (\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta))') = G(\theta)$$

we obtain the following:

$$(1.2) \quad \begin{aligned} E_{\theta}(d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x})) &= (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta))' G^{-1}(\theta) (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta)) - \\ &\quad 2(\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta))' G^{-1}(\theta) E_{\theta}(\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta)) + \\ &\quad E_{\theta}((\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta))' G^{-1}(\theta) (\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta))) = \\ &\quad (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta))' G^{-1}(\theta) (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta)) + \\ &\quad \text{tr}(G^{-1}(\theta) E_{\theta}((\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta)) (\partial_{\theta} \ln p(\mathbf{x}; \theta))')) = \\ &\quad (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta))' G^{-1}(\theta) (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta)) + n \end{aligned}$$

which is the sum of the number of parameters and the squared norm of the vector of coordinates of the sample  $\tilde{\mathbf{x}}$  in the dual tangent space.

As we can see any consistent root of the likelihood equations defines the MESD estimator, since then

$$(1.3) \quad \|\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta)\| = 0$$

However, note that the MESD does not coincide necessarily with the maximum likelihood estimator (MLE) since we do not require the solution to be a maximum for the likelihood. If we consider, for example, the estimation of the parameters of a normal distribution from a sample of size one, the MLE leads to  $\hat{\mu} = \tilde{x}$  and  $\hat{\sigma} = 0$ . If, on the other hand, we develop the expected squared distance we obtain:

$$(1.4) \quad E(d^2(\tilde{x}, x)) = \left(\frac{\tilde{x} - \mu}{\sigma}\right)^2 + \frac{1}{8} \left( \left(\frac{\tilde{x} - \mu}{\sigma}\right)^2 - 1 \right)^2 + 2$$

which reaches the minimum at  $\hat{\mu} = \tilde{x}$  being  $\sigma^2$  arbitrary. We consider more reasonable the result provided by MESD.

This is not the first time that solutions of likelihood equations not necessarily an absolute maximum are used to obtain estimates. Duda and Hart (1973) consider a mixture of normal distributions with unknown parameters, the maximum likelihood solution is singular, but they obtain reasonable estimates using the greatest relative maximum of the likelihood function.

#### 4.2 Testing Statistical Hypotheses

Another possible application of distance between statistical individuals is concerned with testing parametric statistical hypotheses. Let us consider a hypothesis testing defined by

$$\begin{aligned} H_0 : & \theta \in \Theta_H \\ H_1 : & \theta \in \Theta \end{aligned}$$

where  $\Theta_H$  is a restriction of the original parameter space defined by the null hypothesis.

Given a sample  $\tilde{\mathbf{x}} \in \chi$ , let us consider the following statistics:

$$(1.5) \quad \inf_{\theta \in \Theta_H} E_{\theta}(d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x})) = E_{\hat{\theta}_1}(d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x})) = E_1(\tilde{\mathbf{x}})$$

$$(1.6) \quad \inf_{\theta \in \Theta} E_{\theta}(d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x})) = E_{\hat{\theta}_2}(d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x})) = E_2(\tilde{\mathbf{x}})$$

Provided that (4.5) and (4.6) exist, we may define a statistical test for solving the previous hypothesis testing by considering a critical region of the form

$$(1.7) \quad W = \{(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_m) : \frac{E_1(\tilde{\mathbf{x}})}{E_2(\tilde{\mathbf{x}})} \geq \lambda_{\epsilon}\}$$

where  $\epsilon$  is the significance level of the test and the constant  $\lambda_{\epsilon}$  is chosen in such a way that  $P(\lambda \geq \lambda_{\epsilon}/H_0) \leq \epsilon$ .

For a simple hypothesis  $H_0 : \theta = \theta_0$  and taking into account that under the null hypothesis

$$(1.8) \quad X^2 = (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta_0))' G^{-1}(\theta_0) (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta_0)) \xrightarrow{\mathcal{L}} Y \sim \chi_n^2$$

that is,  $X^2$  will be asymptotically distributed as a chi-squared random variable with  $n$  degrees of freedom.

From (4.2), the critical region (4.7) may now be expressed as

$$(1.9) \quad W = \{\tilde{\mathbf{x}} : (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta_0))' G^{-1}(\theta_0) (\partial_{\theta} \ln p(\tilde{\mathbf{x}}; \theta_0)) \geq c_{\epsilon}\}$$

and now,  $c_{\epsilon}$  can be easily determined.

The test obtained in (4.9) coincides with Lagrange multiplier test, Aitchison and Silvey (1958), or score tests, Tarone (1988), first considered by Fisher (1935). In general, score tests are asymptotically equivalent to Wald tests based on maximum likelihood estimators and to likelihood ratio tests.

As an example let us consider the multinomial distribution, as defined in section 3, with the hypothesis test

$$\begin{aligned} H_0 : \mathbf{p} &= \mathbf{p}_0 \\ H_1 : \mathbf{p} &\neq \mathbf{p}_0 \end{aligned}$$

It is not difficult to see that the test defined in (4.9) takes the form

$$(1.10) \quad W = \{\tilde{\mathbf{x}} : \sum_{i=1}^{n+1} \frac{x_i^2}{m p_i} - m \geq c_{\epsilon}\}$$

and under the null hypothesis, the statistic  $\sum_{i=1}^{n+1} \frac{x_i^2}{m p_i} - m$  is asymptotically distributed as a chi-squared distribution with  $n$  degrees of freedom.

Note that the statistic obtained is the well known Pearson's chi-squared.

### 4.3 Discriminant Analysis

Let  $\tilde{\mathbf{x}}$  be an observation to classify between a set of populations  $\Pi_1, \dots, \Pi_k$ . We may define the following discriminant function

$$(1.11) \quad f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = E_{\Pi_i} (d^2(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x}))$$

where  $\mathbf{x}$  is any possible sample from the population  $\Pi_i$ . The decision rule is to assign  $\tilde{\mathbf{x}}$  to  $\Pi_i$  if

$$(1.12) \quad f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = \min (f_1(\tilde{\mathbf{x}}), \dots, f_k(\tilde{\mathbf{x}}))$$

Another possible discriminant function proposed by Cuadras (1989a) is

$$f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = d_{\Pi_i}^2(\tilde{\mathbf{x}}, 0)$$

which may be considered as the squared distance between  $\mathbf{x}$  and the mean individual of the population, since  $E(\partial_i \ln p(\mathbf{x}; \theta)) = 0$ . Some other comments can be found in Cuadras (1989a) and Sanchez (1989).

## BIBLIOGRAPHY

- [1] **Aitchison, J. and Silvey, S.D.** (1958). "Maximum likelihood estimation of parameters subject to restraints." *Ann. Math. Statist.*, vol. **29**, pp. 813–828.
- [2] **Cuadras, C.M.** (1989a). "Distance analysis in discrimination and classification using both continuous and categorical variables." *Statistical Data Analysis and Inference*, (Y. Dodge, Ed.) North-Holland Pu. Co., Amsterdam.
- [3] **Cuadras, C.M.** (1989b). "Distancias estadísticas entre individuos y poblaciones con variables mixtas." *Actas XVIII Reunión Nac. Estad. e I. Oper.*, Univ. Santiago de Compostela, 143–148.
- [4] **Duda, R.O. and Hart, P.E.** (1973). "Pattern Classification and Scene Analysis." *John Wiley and sons*, New York.
- [5] **Fisher, R.A.** (1935). "The Fiducial Argument in Statistical Inference." *Annals of Eugenics*, vol. **6**.
- [6] **Mahalanobis, P.C.** (1936). "On the Generalized Distance in Statistics." *Proc. Natl. Inst. Sci. India.*, vol **2**, pp. 49–55.
- [7] **Miñarro, A.** (1991). *Aspectos Geométricos de las Poblaciones y los Individuos Estadísticos*. Tesis Doctoral. Universitat de Barcelona.
- [8] **Mitchell, A.F.S.** (1988). "Statistical Manifolds of Univariate Elliptic Distributions." *International Statistical Review*, **56**, 1, 1–16.
- [9] **Oller, J.M.** (1989). "Some geometrical aspects of data analysis and statistics." in *Statistical Data Analysis and Inference*, (Y. Dodge, Ed.) North-Holland Pu. Co., Amsterdam.
- [10] **Rao, C.R.** (1945). "Information and accuracy attainable in the estimation of parameters." *Bull. Calcutta Math. Soc.*, vol. **37**, pp. 81–97.
- [11] **Rao, C.R.** (1982). "Diversity and Dissimilarity Coefficients: A Unified Approach." *J. Theoretical Population Biology*, vol. **21**, pp. 24–43.

- [12] Sanchez, P. (1989). "Funciones discriminantes basadas en distancias estadísticas." *Actas XVIII Reunión Nacional de Estadística e Investigación Operativa*, Univ. Santiago de Compostela, pp. 468–472.
- [13] Tarone, R.E. (1988). "Score Statistics." en *Encyclopedia of Statistical Sciences*, vol 8. (S. Kotz and N.L. Eds.), John Wiley, New York.





## AMPLIACIÓN AL ESPACIO DE UNA APLICACIÓN DE LA INTEGRACIÓN EN EL CAMPO COMPLEJO PARA LA SOLUCIÓN DE UNA CUESTIÓN DE INFORMÁTICA GRÁFICA

MIGUEL ÁNGEL LERMA USERO\*

*El teorema de los residuos de Cauchy sirve como base para un algoritmo que permite determinar la posición relativa de un punto respecto a una curva cerrada simple. La ampliación de este método al espacio tropieza con la dificultad derivada de la inexistencia de campos complejos  $n$ -dimensionales para  $n > 2$ . En el presente artículo se supera dicha dificultad reformulando el procedimiento en términos de geometría diferencial.*

**Extension to the space of an application of complex integration for solving a topic on graphic computation.**

**Keywords:** Computational geometry, Differential geometry, Computer aided design, Searching geometry.

---

\*Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid.

—Article rebut el març de 1992.

—Acceptat el juny de 1992.

## 1. INTRODUCCIÓN

En [4] se describe un método analítico destinado a decidir la posición relativa de un punto del plano respecto a un polígono cerrado. Varias son las posibles situaciones prácticas que motivan la necesidad de dicha determinación. En [4] se menciona un problema relacionado con el suministro de energía en una red eléctrica. Otro ejemplo son los operadores “infill”, “instroke” e “ineofill” usados en PostScript ([2]).

El método expuesto en [4] descansa en la aplicación del teorema de los residuos de Cauchy, como se detalla a continuación.

Dada una curva cerrada simple  $\Gamma$  en el plano, el teorema de Jordan asegura que  $\mathbb{R}^2 - \Gamma$  consta exactamente de dos componentes conexas: una acotada  $\Gamma_{\text{int}}$  (la “región interior” a  $\Gamma$ ) y otra no acotada  $\Gamma_{\text{ext}}$  (la “región exterior” a  $\Gamma$ ). Dado  $z_0 \in \mathbb{R}^2 - \Gamma$  se puede determinar a cuál de las dos regiones pertenece aplicando el teorema de los residuos a la integral:

$$(1) \quad I = \oint_{\Gamma} \frac{dz}{z - z_0}$$

El resultado es el siguiente ([3]):

$$(2) \quad \begin{cases} z_0 \in \Gamma_{\text{int}} & \Leftrightarrow I = \pm 2\pi i \\ z_0 \in \Gamma_{\text{ext}} & \Leftrightarrow I = 0 \end{cases}$$

En el caso de que  $\Gamma$  sea una poligonal, la integral se puede expresar como una suma de integrales extendidas a cada uno de los lados  $\gamma_j$  de  $\Gamma$ :

$$(3) \quad \oint_{\Gamma} \frac{dz}{z - z_0} = \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\gamma_j} \frac{dz}{z - z_0}$$

Todo se reduce ahora a dar expresiones analíticas para las integrales:

$$(4) \quad I_j = \int_{\gamma_j} \frac{dz}{z - z_0}$$

Puesto que  $I$  será un número imaginario puro, las partes reales de las integrales  $I_j$  se cancelarán, y sólo es necesario acumular sus partes imaginarias. Llamando  $(x_0, y_0)$  a las coordenadas de  $z_0$ ,  $(x_j, y_j)$  a las coordenadas del vértice

$P_j$  del polígono, y suponiendo que  $\gamma_j$  es el segmento  $P_j P_{j+1}$  ( $P_1 \equiv P_n$ ), se tiene ([4]):

$$(5) \quad \operatorname{Im} \oint_{\gamma_j} \frac{dz}{z - z_0} = \begin{cases} 0 & \text{si } A_j k_j = B_j h_j \\ \arctan \frac{1 - a_j}{b_j} - \arctan \frac{-a_j}{b_j} & \text{si } A_j k_j \neq B_j h_j \end{cases}$$

donde  $A_j = x_j - x_0$ ,  $B_j = y_j - y_0$ ,  $h_j = x_{j+1} - x_j$ ,  $k_j = y_{j+1} - y_j$ ,  $a_j = -(A_j h_j + B_j k_j)/(h_j^2 + k_j^2)$ ,  $b_j = (A_j k_j - B_j h_j)/(h_j^2 + k_j^2)$ .

La principal dificultad para la ampliación de este procedimiento al espacio es la inexistencia de campos de números complejos  $n$ -dimensionales para  $n > 2$ . De hecho para  $n = 4$  existe el cuerpo de cuaterniones de Hamilton, pero se trata de un cuerpo no conmutativo. Sin embargo, la formulación del problema en el campo complejo, aunque útil, es innecesaria para  $n = 2$ , como veremos.

Otra dificultad para la citada extensión es la representación de la frontera  $\partial M$  de una región  $M$  de  $\mathbb{R}^n$ , de modo que la misma pueda expresarse como una colección de datos numéricos análogos a la sucesión de coordenadas de los vértices de una poligonal en  $\mathbb{R}^2$ . También daremos una solución a este problema.

## 2. ANÁLISIS GEOMÉTRICO DEL PROBLEMA

Veremos ahora un enfoque puramente geométrico, todavía en el plano, que conduce a un resultado equivalente al obtenido mediante integración compleja.

Se denomina argumento de un complejo  $z \neq 0$  de afijo  $P(x, y)$ , y se denota  $\arg(z)$ , al ángulo que forma el vector  $\overrightarrow{OP}$  con el semieje real positivo (0 es el origen de coordenadas). Este ángulo está indeterminado por un sumando  $2\pi k$  ( $k$  entero), y por tanto  $\arg(z)$  es una función multiforme. Es elemental comprobar que la parte imaginaria del integrando de (1) es precisamente la diferencial de  $\arg(z - z_0)$ , y por tanto la integral mide la variación total del argumento de  $z - z_0$  al recorrer  $\Gamma$ .

Tomando ahora un valor inicial de  $\arg(z - z_0)$  para un punto de la curva  $\Gamma$ , y recorriendo ésta en un sentido, con la condición de que  $\arg(z)$  vaya cambiando de valor con continuidad, al regresar al punto inicial el valor de  $\arg(z)$  habrá variado en  $\pm 2\pi$  radianes si  $z_0 \in \Gamma_{\text{int}}$ , y 0 radianes si  $z_0 \in \Gamma_{\text{ext}}$ .

En el caso particular de que  $\Gamma$  sea un poligonal, para cada lado  $\gamma_j$  de vértices  $P_j P_{j+1}$  (recorrido de  $P_j$  hacia  $P_{j+1}$ ) la función  $\arg(z)$  cambia en una cantidad

igual al ángulo orientado entre el vector  $\overrightarrow{P_0 P_j}$  y el  $\overrightarrow{P_0 P_{j+1}}$ , donde  $P_0$  es el afijo de  $z_0$ . Si llamamos  $\alpha_j$  a dicho ángulo, el cambio total en  $\arg(z)$  será:

$$(6) \quad \alpha = \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j$$

El valor de  $\alpha_j$  puede hallarse por procedimientos trigonométricos, y de hecho se puede comprobar con facilidad que su valor coincide con el dado por la expresión (5).

### 3. EXTENSIÓN AL ESPACIO

Los objetivos a cubrir son:

1. Hallar una extensión de la integral (1) al espacio.
2. Hallar una representación del borde de una región poliédrica del espacio, adecuada para el cálculo automático del valor de la integral sobre dicho borde.

Interesa además que la extensión sea válida no sólo para  $\mathbb{R}^3$ , sino en general para  $\mathbb{R}^n$ .

#### Extensión de la integral al espacio $\mathbb{R}^n$

Para simplificar supondremos que  $z_0 = 0$ , y  $z - z_0 = z$ .

Observemos que la parte imaginaria del integrando de (1) se puede escribir así:

$$(7) \quad \operatorname{Im} \frac{dz}{z} = \frac{x dy - y dx}{x^2 + y^2} = \frac{r dr}{|r|^2}$$

donde  $r = (x, y) \in \mathbb{R}^2$  es el vector asociado al complejo  $z = x + yi$ , y  $r dr = x dy - y dx$ .

Por lo tanto se tendrá

$$(8) \quad \oint_{\Gamma} \frac{r dr}{|r|^2} = \begin{cases} \pm 2\pi & \text{si } 0 \in \Gamma_{\text{int}} \\ 0 & \text{si } 0 \in \Gamma_{\text{ext}} \end{cases}$$

Veremos que esta expresión se generaliza a  $\mathbb{R}^n$  de la siguiente forma:

$$(9) \quad \oint_{\partial M} \frac{x dS}{|x|^n} = \begin{cases} \pm S_{n-1}(1) & \text{si } 0 \in M - \partial M \\ 0 & \text{si } 0 \in \mathbb{R}^n - M \end{cases}$$

Ahora  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $|x| = \left( \sum_{j=1}^n x_j^2 \right)^{1/2}$  es el módulo de  $x$ ,  $M$

es una subvariedad  $n$ -dimensional cerrada de  $\mathbb{R}^n$ ,  $\partial M$  es su borde, y  $S_{n-1}(r)$  es el volumen  $(n-1)$ -dimensional de la hiper-superficie esférica de radio  $r$  en  $\mathbb{R}^n$ :

$$(10) \quad S_{n-1}(r) = 2\pi^{n/2} r^{n-1} / \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)$$

donde  $\Gamma(x)$  es la función gamma de Euler ([1]). Para  $r = 1$  se tiene:

$$(11) \quad S_{n-1}(r) = 2\pi^{n/2} / \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)$$

Además la definición de  $x dS$  es la siguiente:

$$(12) \quad x dS = \sum_{i=1}^n x_i dS_i$$

donde  $dS_i = (-1)^{i-1} dx_1 \wedge dx_2 \wedge \dots \wedge \widehat{dx_i} \wedge \dots \wedge dx_n$ ;  $\widehat{dx_i}$  significa que  $dx_i$  está ausente en la expresión, y  $\wedge$  representa el producto exterior (estos conceptos pueden hallarse en tratados de geometría diferencial, como los mencionados en la bibliografía, [6], [7], [8]).

El signo de  $S_{n-1}(1)$  en (9) depende de la orientación de  $M$ : si ésta es positiva, el signo es  $+$ , y si es negativa el signo es  $-$ .

### Prueba de (9):

Consta de cuatro etapas:

1) Prueba de que  $d(x dS/|x|^n) = 0$  para todo  $x \neq 0$ :

Sea  $\omega = x dS/|x|^n$ . Entonces, teniendo en cuenta que  $dx_i \wedge dS_j = 0$  si  $i \neq j$ , tenemos:

$$d\omega = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{x_i}{|x|^n} \right) dx_i \wedge dS_i$$

Tenemos que  $dx_i \wedge dS_i = dx_1 \wedge dx_2 \wedge \cdots \wedge dx_n = dV$  (elemento de volumen en  $\mathbb{R}^n$ ), y además:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{x_i}{|x|^n} \right) = \sum_{i=1}^n \frac{|x|^n - nx_i^2 |x|^{n-2}}{|x|^{2n}} = 0$$

Luego  $d\omega = 0$ , c.q.d.

- 2) Dada la bola abierta  $B(0, r) = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < r\}$  de centro 0 y radio  $r$ , se considera la subvariedad  $M' = M - B(0, r)$  de  $M$ , con la orientación inducida por  $M$ . Puesto que  $0 \notin M'$ , se tiene  $d(x dS/|x|^n) = 0$ , y por el teorema de Stokes:

$$\oint_{\partial M'} x dS/|x|^n = \int_{M'} d(x dS/|x|^n) = 0$$

- 3) Si  $0 \in \mathbb{R}^n - M$ , basta tomar  $r$  lo bastante pequeño para que  $M' \cap B(0, r) = \emptyset$ , luego  $M' = M$ , y se obtiene el resultado apetecido.
- 4) Si  $0 \in M - \partial M$ , tomando  $r$  lo bastante pequeño resultará que la bola cerrada  $B^c(0, r) = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| \leq r\}$  estará completamente contenida en  $M$ , y entonces  $\partial M'$  será la unión de  $\partial M$  y  $\partial B^c(0, r)$  con la orientación inducida por  $M'$ , que es la opuesta a la que induce  $B^c(0, r)$ . Supondremos, sin pérdida de generalidad, que  $M$  posee orientación positiva, entendiéndose que cuando ésta sea negativa el resultado final tendrá el signo opuesto al que se muestra. De aquí se deduce:

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_{\partial M'} x dS/|x|^n = \\ &= \oint_{\partial M} x dS/|x|^n - \oint_{\partial B^c(0, r)} x dS/|x|^n \end{aligned}$$

luego

$$\begin{aligned} \oint_{\partial M} x dS/|x|^n &= \oint_{\partial B^c(0, r)} x dS/|x|^n = \\ &= r^{1-n} \oint_{\partial B^c(0, r)} u dS = r^{1-n} S_{n-1}(r) = S_{n-1}(1) \end{aligned}$$

donde  $u = x/|x|$ , y la última igualdad expresa el volumen  $(n-1)$ -dimensional de una hiper-superficie esférica de radio 1. ■

## Representación del borde de la variedad

Sea  $M$  una variedad politópica, es decir, limitada por caras planas. Supondremos sin pérdida de generalidad que dichas caras son símlices. En  $\mathbb{R}^3$ , por ejemplo, se tendría una variedad poliédrica limitada por caras triangulares. Entonces cada cara queda unívocamente determinada por la sucesión de sus vértices  $\langle v_1, v_2, \dots, v_n \rangle$ , y el orden de éstos determina su orientación. Consideraremos que el conjunto de caras orientadas así representadas constituyen datos del problema, y no entraremos en la forma de obtener dichos datos en problemas concretos, dado que ello depende de la forma en que la propia variedad  $M$  sea representada en cada caso. Mostraremos, no obstante, un ejemplo.

### Ejemplo:

Sea en  $\mathbb{R}^3$  un cubo de vértices  $v_0 = (0, 0, 0)$ ,  $v_1 = (1, 0, 0)$ ,  $v_2 = (0, 1, 0)$ ,  $v_3 = (1, 1, 0)$ ,  $v_4 = (0, 0, 1)$ ,  $v_5 = (1, 0, 1)$ ,  $v_6 = (0, 1, 1)$ ,  $v_7 = (1, 1, 1)$ . Puesto que las caras del cubo son cuadrados, debemos dividir cada una de ellas en dos triángulos mediante una diagonal, con lo que el borde del cubo quedará representado por 12 caras triangulares (se representa cada vértice por su subíndice):  $\partial M = \{\langle 0, 2, 1 \rangle, \langle 1, 2, 3 \rangle, \langle 0, 1, 4 \rangle, \langle 1, 5, 4 \rangle, \langle 0, 4, 2 \rangle, \langle 2, 4, 6 \rangle, \langle 5, 7, 6 \rangle, \langle 4, 5, 6 \rangle, \langle 3, 6, 7 \rangle, \langle 2, 6, 3 \rangle, \langle 3, 7, 5 \rangle, \langle 1, 3, 5 \rangle\}$ .

Una condición necesaria para que las orientaciones de las caras sean compatibles con una orientación de  $M$  se deriva de la relación  $\partial\partial M = \emptyset$ . Para aplicarla, se hallan los bordes de las caras de  $M$ , los cuales estarán compuestos por símlices  $(n-2)$ -dimensionales, y se comprueba que cada uno de estos símlices aparece dos veces con orientaciones opuestas. En el ejemplo del cubo tendríamos:  $\partial\partial M = \{\langle 0, 2 \rangle, \langle 2, 1 \rangle, \langle 1, 0 \rangle, \langle 1, 2 \rangle, \langle 2, 3 \rangle, \langle 3, 1 \rangle, \langle 0, 1 \rangle, \dots, \langle 5, 1 \rangle\}$ , comprobándose cómo efectivamente cada arista aparece dos veces, una vez con cada orientación.

## 4. APLICACIÓN DEL MÉTODO A VARIEDADES POLITÓPICAS

Para una variedad politópica en  $\mathbb{R}^n$ , la integral (9) se puede descomponer en suma de integrales sobre sus caras  $C_j$ :

$$(13) \quad \oint_{\partial M} \frac{x \, dS}{|x|^n} = \sum_j \oint_{C_j} \frac{x \, dS}{|x|^n}$$

Todo se reduce, pues, a calcular las integrales:

$$(14) \quad \oint_{C_j} \frac{x \, dS}{|x|^n}$$

sobre caras simpliciales. Veremos un modo de simplificar dicho cálculo.

**Lema:**

Si  $C'_j$  es la proyección de  $C_j$  sobre la hiper-superficie esférica de centro 0 y radio 1 a lo largo de semirrectas que parten del origen, entonces:

$$(15) \quad \oint_{C_j} \frac{x \, dS}{|x|^n} = \oint_{C'_j} u \, dS$$

es decir, la integral (14) es igual al volumen  $(n-1)$ -dimensional de  $C'_j$ .

**Prueba:**

Basta hacer el cambio de variable  $\xi = x/|x|$  y usar la relación (12).

■

### Aplicación a $\mathbb{R}^3$

En  $\mathbb{R}^3$  las caras de una variedad poliédrica serán triángulos, y la proyección de éstos sobre la superficie esférica de centro 0 y radio 1 serán triángulos esféricos. El área de cada uno de dichos triángulos esféricos no es otra cosa que el ángulo sólido bajo el que se ve la cara correspondiente desde el origen (es decir, desde el punto cuya posición relativa tratamos de determinar). Por otro lado se sabe que el área de un triángulo esférico es el producto del cuadrado del radio por su exceso esférico en radianes, es decir, la suma de los ángulos de sus vértices menos  $\pi$ .

Sean  $A, B$  y  $C$  los vértices de una cara triangular, y  $A', B', C'$  los vértices del triángulo esférico que resulta como proyección de  $ABC$  sobre la superficie esférica de centro 0 y radio 1. El problema ahora es hallar el exceso esférico de  $A'B'C'$  en función de las coordenadas de  $A, B$  y  $C$ .



El ángulo  $A'$  del triángulo esférico  $A'B'C'$  es igual al que forman los planos  $0AB$  y  $0AC$ , e igual al de los vectores normales  $m = 0A \times 0B$  y  $n = 0A \times 0C$  ( $u \times v$  representa el producto vectorial de los vectores  $u$  y  $v$ ). El coseno de dicho ángulo es igual a  $m \cdot n / (|m||n|)$ , y esto es suficiente para calcularlo.

Si las coordenadas de  $A, B$  y  $C$  son respectivamente  $(x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_2), (x_3, y_3, z_3)$ , el cálculo se haría así:

– Vectores normales:

$$\begin{aligned} n_1 &= \left( \begin{vmatrix} y_2 & z_2 \\ y_3 & z_3 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} z_2 & x_2 \\ z_3 & x_3 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} x_2 & y_2 \\ x_3 & y_3 \end{vmatrix} \right) \\ n_2 &= \left( \begin{vmatrix} y_3 & z_3 \\ y_1 & z_1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} z_3 & x_3 \\ z_1 & x_1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} x_3 & y_3 \\ x_1 & y_1 \end{vmatrix} \right) \\ n_3 &= \left( \begin{vmatrix} y_1 & z_1 \\ y_2 & z_2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} z_1 & x_1 \\ z_2 & x_2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix} \right) \end{aligned}$$

Estos resultados se almacenarán en una tabla para evitar tener que rehacerlos al operar con las caras contiguas a  $ABC$ . Por ejemplo, el vector  $n_1$  es el vector normal al plano  $0BC$ , pero este plano tendrá que ser reconsiderado al operar sobre la cara  $DCB$ , que comparte con  $ABC$  la arista  $BC$ . La única diferencia a tener en cuenta es que al operar sobre  $DCB$  se obtiene como vector normal a  $0CB$  el  $-n_1$ .

– Ángulos del triángulo esférico  $A'B'C'$ :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \arccos \frac{-n_2 \cdot n_3}{|n_2||n_3|} \\ \alpha_2 &= \arccos \frac{-n_3 \cdot n_1}{|n_3||n_1|} \\ \alpha_3 &= \arccos \frac{-n_1 \cdot n_2}{|n_1||n_2|} \end{aligned}$$

El signo negativo de los numeradores se justifica fácilmente. Por ejemplo, en el cálculo de  $\alpha_1$  (ángulo en  $A'$ ) se tiene en el numerador:  $(0A \times 0B) \cdot (0A \times 0C) = (0A \times 0B) \cdot (-0C \times 0A) = n_3 \cdot (-n_2)$ .

– Exceso esférico de  $A'B'C'$ :

$$e = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 - \pi$$

– Área orientada de  $A'B'C'$ :

El exceso esférico recién calculado representa el área de  $A'B'C'$  en valor absoluto. Su signo depende de la orientación de la cara, y resulta ser igual al del siguiente determinante:

$$\begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix}$$

Este determinante será nulo cuando el origen esté en el plano de  $ABC$ , y entonces el área del triángulo esférico  $A'B'C'$  será nula. En cualquier otro caso, multiplicando el exceso esférico por el signo de este determinante, se obtiene el área orientada del triángulo esférico  $A'B'C'$ .

Reiterando estos cálculos sobre cada una de las caras del poliedro y sumando respecto a todas ellas se obtendrá el valor de la integral (9).

## 5. COMPARACIÓN CON EL MÉTODO DE LA SEMIRRECTA

En [5] se expone un método clásico, que llamaremos “de la semirrecta”, para resolver el problema de inclusión de un punto  $P$  en un polígono de  $N$  lados. Consiste en tomar una semirrecta que parte del punto  $P$  y contar el número de cortes de ésta con el borde  $\Gamma$  del polígono. Si el número de cortes es par, el punto es exterior, y si es impar entonces es interior. Como es necesario recorrer los  $N$  lados uno a uno para comprobar si existe intersección con la semirrecta, el tiempo de ejecución es proporcional a  $N$ .

Por otro lado, el procedimiento aquí expuesto, que denominaremos “analítico”, aplicado al plano se reduce al de [4], y exige recorrer también los  $N$  lados del polígono uno a uno para calcular la diferencia de arcotangentes de la fórmula (5). El tiempo de cómputo, por lo tanto, es también proporcional a  $N$ , aunque es de esperar que la constante de proporcionalidad sea mayor a causa del tiempo que ha de consumir el ordenador en calcular las arcotangentes, en contraste con el método de la semirrecta, que sólo exige emplear operaciones aritméticas. Para comprobarlo se han realizado simulaciones numéricas de ambos métodos, mediante programas escritos en C y ejecutados en un ordenador IBM PS/2 50-Z sin coprocesador. Para polígonos de 100 lados, el método de la semirrecta decide la posición relativa de un punto en 0,3 seg.; mientras que el método analítico tarda 0,8 seg. Esto confirma que el método analítico es algo más lento.

La generalización al espacio del método de la semirrecta es obvia. En vez de contar las intersecciones de una semirrecta con los lados de un polígono, se contarían las intersecciones de dicha semirrecta con las caras del borde  $\partial M$  de la variedad. En consecuencia, para un valor fijo de la dimensión  $n$ , el tiempo de ejecución sería proporcional al número  $N$  de caras de la variedad, y lo mismo sucedería con el método que se propone en el presente trabajo. La complejidad relativa de los algoritmos, por tanto, sólo dependerá del tiempo necesario para decidir si una semirrecta interseca a un símplex  $n$ -dimensional, y el tiempo de cálculo del volumen de un símplex esférico  $n$ -dimensional.

Para finalizar la comparación de los dos métodos, señalaremos una ventaja obvia del aquí propuesto: al depender del valor de una integral, el resultado obtenido es independiente de conjuntos de medida cero (de volumen  $(n-1)$ -dimensional nulo). En particular, no importa que las integrales de la fórmula (15) se extiendan a conjuntos (las caras de un politopo) que se solapan ligeramente (en los bordes de las caras), ya que dicho solape es un conjunto de medida cero. Sin embargo, el método de la semirrecta (en el plano) necesita contemplar la posibilidad de que el punto de corte coincida con un vértice, a fin de evitar que la intersección sea contada dos veces (una por cada uno de los lados a que pertenece dicho vértice). En [5] se resuelve correctamente esta dificultad, pero será necesario tenerla en cuenta si se desea aplicar una versión generalizada al espacio.

## 6. CONCLUSIONES

Se conoce un procedimiento que aplica el teorema de los residuos para determinar la posición relativa de un punto respecto a una curva cerrada simple en el plano. Dicho procedimiento se expresa mediante la siguiente fórmula:

$$(16) \quad \oint_{\Gamma} \frac{dz}{z - z_0} = \begin{cases} \pm 2\pi i & \Leftrightarrow z_0 \in \Gamma_{\text{int}} \\ 0 & \Leftrightarrow z_0 \in \Gamma_{\text{ext}} \end{cases}$$

Cambiando el enfoque, basado en la teoría de funciones de variable compleja, por consideraciones tomadas de la geometría diferencial, se ha conseguido ampliar el resultado al espacio  $\mathbb{R}^n$ , donde la fórmula (16) queda sustituida por la siguiente:

$$(17) \quad \oint_{\partial M} \frac{(x-p) dS}{|x-p|^n} = \begin{cases} \pm S_{n-1}(1) & \text{si } p \in M - \partial M \\ 0 & \text{si } p \in \mathbb{R}^n - M \end{cases}$$

Se ha particularizado el método a variedades politópicas, donde el problema se reduce a la evaluación de volúmenes de símlices  $(n - 1)$ -dimensionales esféricos, y se ha indicado el modo de disponer los cálculos, usando trigonometría esférica, en el caso de variedades poliédricas en  $\mathbb{R}^3$ .

Al comparar el método aquí propuesto con el de [5] y con la generalización de éste al espacio, se obtiene que el tiempo de cómputo es en todos los casos proporcional al número de caras del polígono o politopo al que se aplica, aunque la constante de proporcionalidad dependerá, como es obvio, del tiempo consumido para cada cara. Por otro lado, el método de [4] y el aquí propuesto presentan la ventaja de ser independientes de subconjuntos del borde de la variedad que tengan medida cero.

## 7. FUTURA INVESTIGACIÓN

La investigación futura puede encaminarse en las siguientes direcciones:

1. Hallar fórmulas exactas o aproximadas para los volúmenes de símlices esféricos  $(n - 1)$ -dimensionales, de modo que el método teórico expuesto sea susceptible de ser aplicado en la práctica.
2. Comparación de los métodos analíticos desarrollados en [4] y en el presente artículo con algoritmos previamente conocidos, como el de [5], tanto desde un punto de vista teórico como práctico.

En el parágrafo 5 se muestran algunos resultados de dicha comparación, aunque el estudio podría prolongarse, por ejemplo para conocer la dependencia de la dimensión  $n$ .

3. Generalizar los dos métodos, el analítico y el de la semirrecta.

No es sorprendente que los dos métodos conduzcan a los mismos resultados. En un planteamiento poco riguroso, ambos pueden considerarse particularizaciones de un enfoque más general. La relación resulta más evidente en coordenadas polares  $(r, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1})$ .

Una generalización inmediata de la expresión (9) consiste en usar una forma diferencial  $\omega$  cerrada ( $d\omega = 0$ ), que verificará:

$$(18) \quad \oint_{\partial M} \omega = \begin{cases} \pm K & \text{si } 0 \in M - \partial M \\ 0 & \text{si } 0 \in \mathbb{R}^n - M \end{cases}$$

donde:

$$K = \oint_{\partial B^c(0,1)} \omega$$

De hecho la prueba de (9) se apoya sobre la propiedad de que la forma  $dA = x dS/|x|^n$  es cerrada. Esta forma  $dA$  no es otra cosa que la diferencial de ángulo sólido (en  $n$  dimensiones); en otras palabras, es independiente de la coordenada radial, y su integral extendida a una región de  $\partial B^c(0,1)$  es igual al volumen  $(n-1)$ -dimensional de dicha región. En coordenadas esféricas se puede expresar:

$$dA = J(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}) d\alpha_1 \wedge d\alpha_2 \wedge \dots \wedge d\alpha_{n-1}$$

donde  $J$  es una función sólo de las coordenadas angulares.

Si se toma  $\omega = f(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}) dA$ , donde  $f$  es una función de las coordenadas angulares, entonces  $\omega$  es cerrada, y se puede usar en la expresión (18). Entonces, el método expuesto en el presente artículo equivaldrá a usar en la definición de  $\omega$  la función  $f(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}) = 1$ , mientras que el método de la semirrecta equivaldría a tomar  $f(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1})$  igual a una delta de Dirac.

Este planteamiento carece realmente de rigor, entre otras razones porque la delta de Dirac no es propiamente una función, sino una distribución. Un desarrollo teórico que combine adecuadamente la teoría de distribuciones con la geometría diferencial sería útil para el establecimiento de la generalización deseada.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Abramowitz, M & Stegun, I.A. (1970). *Handbook of Mathematical Functions*. New York: Dover Publications, Inc.
- [2] Adobe System Incorporated (1990). *PostScript Language Reference Manual*. New York: Addison-Wesley Publishing, Inc.
- [3] Cartan, H. (1968). *Teoría elemental de las funciones analíticas de una y varias variables complejas*. Madrid: Selecciones Científicas.
- [4] López López, A. & Sainz-Ezquerro Domínguez, F. (1990). "Una aplicación de la integración en el campo complejo para la solución de una cuestión de informática gráfica". *Qüestió*, Vol. 14, nº 1,2,3 pp. 97-105.
- [5] Preparata, F.P. & Shamos, M.I. (1985). *Computational Geometry - An Introduction*. New York: Springer-Verlag.

- [6] Spivak, M. (1965). *Calculus on Manifolds*. New York: W.A. Benjamin, Inc.
- [7] Spivak, M. (1979). *Comprehensive Introduction to Differential Geometry*. (5 vol.). Berkeley, CA: Publish or Perish.
- [8] Struik, D. (1961). *Lectures on Classical Differential Geometry*. Reading, Mass.: Addison-Wesley.

## ENGLISH SUMMARY:

### EXTENSION TO THE SPACE OF AN APPLICATION OF COMPLEX INTEGRATION FOR SOLVING A TOPIC ON GRAPHIC COMPUTATION

Miguel Ángel Lerma Usero

#### 1. INTRODUCTION

In [4] a method is described for determining if a given point is internal to a polygon. Putting the problem in the complex plane and using Cauchy's residue theorem, if  $z_0$  is the point and  $\Gamma$  is the polygon, the integral of  $dz/(z - z_0)$  over  $\Gamma$  is equal to  $\pm 2\pi i$  if  $z_0$  is internal to  $\Gamma$ , and equal to zero if  $z_0$  is external. If  $z_0 = (x_0, y_0)$ , and the vertices of the polygon are  $P_j = (x_j, y_j)$ ,  $j = 1, \dots, n$ , formula (5) can be used in practical computations.

The main obstacle in extending this method to the space is that there is no  $n$ -dimensional complex field for  $n > 2$ . Another difficulty is representing the boundary  $\partial M$  of a region  $M$  in  $\mathbb{R}^n$ .

#### 2. GEOMETRICAL ANALYSIS OF THE PROBLEM

The method used in [4] can be interpreted from a geometrical point of view. Expression (5) gives the angle  $\alpha_j = \angle P_j P_0 P_{j+1}$ , where  $P_0$  is the affix of  $z_0$ .

Expression (3) is equivalent to the sum of the angles  $\alpha_j$  for  $j = 1, \dots, n-1$ . This sum will be equal to  $\pm 2\pi i$  if  $P_0$  is internal to  $\Gamma$ , and equal to zero if  $P_0$  is external.

### 3. EXTENSION TO THE SPACE

To extend the above results to the space it is enough to use the Stokes theorem instead of Cauchy's residue theorem. The differential form  $dz/z$  (we put  $z_0 = 0$  for simplicity's sake) is generalized as  $xdS/|x|^n$ , where  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $|x| = \left( \sum_{j=1}^n x_j^2 \right)^{1/2}$ , and  $dS$  is the differential of hypersurface. Then, expres-

sion (1) is generalized as (9), where  $M$  is a closed  $n$ -dimensional submanifold of  $\mathbb{R}^n$ ,  $\partial M$  is its boundary, and  $S_{n-1}(r)$  is the  $(n-1)$ -dimensional volume of a spherical hypersurface of radius  $r$ .

To represent the oriented boundary  $\partial M$  of a polytope  $M$  it is enough to represent its faces, which we will assume without loss of generality are  $n$ -dimensional simplex. Each one of them can be represented by the sequence of its vertex  $\langle v_1, v_2, \dots, v_n \rangle$ , and its orientation is determined by the order of the vertex.

### 4. APPLICATION TO POLYTOPIC MANIFOLDS

For a polytope, integral (9) can be decomposed as a sum of integrals over its faces  $C_j$  (13). Each of them can be shown to be equal to the  $(n-1)$ -dimensional volume of  $C'_j$ , projection of  $C_j$  over a spherical hypersurface of center 0 and radius 1 along lines passing through the origin. Then the problem is reduced to computing  $(n-1)$ -dimensional volumes of spherical simplex. In  $\mathbb{R}^3$  this means computing volumes of spherical triangles, and exact formulas are known to do it.

## 5. COMPARISON WITH THE SEMILINE METHOD

In [5] a classical method is exposed to solve the polygon inclusion problem. It consists of taking a semiline starting at point  $P$  and counting how many intersections it has with polygon  $\Gamma$ . If the number is even, the point is external, and if it is odd, the point is internal. The algorithm can be performed in  $O(N)$  time for a  $N$ -side polygon.

The method from [4] can be performed in  $O(N)$  time too, but in practice it is slower than that from [5] one. The complexity of their extension to space is the same  $O(N)$ , in respect to the number  $N$  of the faces of the polytope. Its dependence in respect to the dimension  $n$  is related to the time needed to decide if a semiline intersects an  $(n - 1)$ -dimensional simplex, and to compute the volume of an  $(n - 1)$ -dimensional spherical simplex.

Finally, we can see that the method presented here has the advantage of being independent in respect to zero measure sets, because it depends on the value of an integral. On the other hand, the method from [5] and its generalization to the space could be sensible to point-wise features of the boundary of the manifold.

## 6. CONCLUSIONS

Changing the approach of [4], based on the use of Cauchy's residue theorem, by differential geometry considerations, we have extended to the space a method for determining if a given point is internal to a simple closed curve. This method has been applied to polytopes, and, by using spherical trigonometry, to polyhedral manifolds. The computing time is  $O(N)$  in respect to the number  $N$  of the faces of the polytope.

## 7. FUTURE RESEARCH

Future research can be done in the following directions:

1. Find exact or approximate formulae to compute the volume of  $(n - 1)$ -dimensional spherical simplex involved in the method.



2. Compare the present method with other point inclusion algorithms, and find its complexity in respect to the dimension  $n$ .
3. Generalize this method and other point inclusion algorithms.

The generalization could consist of computing the integral of a closed differential form over the boundary of the manifold. That form is the differential of the  $n$ -dimensional solid angle for the method presented here, and its product with a Dirac delta of the angular coordinates for the generalization to the space of the semiline method.



## HEURÍSTICA COMPLEMENTARIA A ENFOQUES DUALES PARA LA PLANIFICACIÓN DE LA PRODUCCIÓN

S. LOZANO, J. LARRAÑETA y L. ONIEVA

*Este trabajo presenta una heurística de varios pasos para la obtención de soluciones admisibles al problema de planificación de la producción con limitaciones de capacidad, a partir de las soluciones aproximadas que proporcionan los métodos duales basados en la relajación del problema. La heurística es complementaria a la aplicación de dichos métodos, buscando soluciones admisibles derivadas de las proporcionadas por la solución a la relajación.*

**Complementary heuristic to dual approaches to the capacitated lot-sizing problem.**

**Keywords:** Planificación de la producción, limitaciones de capacidad, relajación Lagrangiana, precio de los recursos, tiempos de puesta a punto, soluciones heurísticas.

---

—Escuela Superior de Ingenieros Industriales de Sevilla.

Avda. Reina Mercedes s/n. 41012 Sevilla.

—Article rebut el novembre de 1991.

—Acceptat el juny de 1992.

## 1. INTRODUCCIÓN

La determinación del plan detallado de producción supone la fijación de las cantidades que se han de fabricar de cada uno de los tipos de productos en los periodos considerados de forma que los costes de operación que dependen de esta decisión sean mínimos. La literatura sobre producción ofrece soluciones operativas razonables al problema cuando la representación de los costes y del consumo de la capacidad disponible da lugar a modelos lineales (Larrañeta *et al.* [9]). Si las limitaciones de capacidad no actúan es posible realizar la planificación individual de cada uno de los productos, por lo que la consideración de los costes fijos no supone un incremento apreciable de complejidad, resolviéndose el problema mediante programación dinámica (Wagner y Whitin [22]). Pero si es necesario incluir costes fijos y limitaciones de capacidad, el modelo resultante es *NP*-completo (Florian *et al.* [7]), por lo que la optimización es sólo aplicable a situaciones en las que intervienen muy pocos productos. El enfoque que aparece como más fructífero en el caso general es la relajación del modelo a un problema lineal, que se aborda mediante procedimientos duales, aproximando sucesivamente los precios internos de los recursos. (Onieva *et al.* [19], Lozano *et al.* [11]).

En el apartado 2 se recoge explícitamente el modelo analizado, describiendo las características de las soluciones a los enfoques duales en el apartado 3. La heurística se presenta en el apartado 4 y su integración con los enfoques duales en el 5. El apartado 6 incluye las experiencias computacionales realizadas aplicando la heurística a un conjunto de problemas.

## 2. TERMINOLOGÍA, NOTACIÓN Y MODELO

La notación es la siguiente:

$N$  – número de artículos

$i$  – índice correspondiente a cada artículo ( $i = 1, 2, \dots, N$ )

$L$  – número de periodos en el horizonte de planificación

$t$  – índice correspondiente a cada periodo ( $t = 1, 2, \dots, L$ )

$x_{it}$  – unidades producidas del artículo  $i$  en el periodo  $t$

$I_{it}$  – unidades de inventario del producto  $i$  al final del periodo  $t$

$D_{it}$  – unidades de demanda del producto  $i$  en el periodo  $t$

$s_i$  – coste fijo en el que se incurre por iniciar un lote de fabricación de  $i$

$p_i$  – coste variable de fabricación del producto  $i$

$h_i$  – coste variable de mantenimiento del stock del producto  $i$

$K_t$  – capacidad disponible en el periodo  $t$

$a_i$  – capacidad consumida por iniciar la fabricación de  $i$

$b_i$  – consumo marginal de capacidad por unidad fabricada de  $i$

Con estos elementos, un modelo que recoge el problema de encontrar un plan óptimo de producción que minimice los costes totales de fabricación e inventario es,

$$\begin{aligned} & \text{Min} \sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^L (s_i \delta(x_{it}) + p_i x_{it} + h_i I_{it}) \\ & \text{sujeto a } I_{i,t-1} + x_{it} - I_{it} = D_{it} \quad i = 1, \dots, N; t = 1, \dots, L \\ & \sum_{i=1}^N (a_i \delta(x_{it}) + b_i x_{it}) \leq K_t \quad t = 1, \dots, L \\ & x_{it} \geq 0, I_{it} \geq 0, I_{i0} = 0 \end{aligned}$$

representando

$$\delta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x = 0 \end{cases}$$

La producción global en el horizonte de tiempo considerado es, para cada producto  $i$ , la demanda total en el mismo. Debido a ello, el coste variable total es constante, independientemente de las decisiones que se tomen, por lo que puede suprimirse del modelo.

En el análisis del modelo se considera el subconjunto de las formas de producción compuestas por secuencias dominantes. Se definen éstas como las que satisfacen la propiedad  $x_{it} \cdot I_{i,t-1} = 0$  para cada  $t$ . Corresponden a planes de producción en los que,

$$x_{it} = \sum_{k=t}^{t+s} D_{ik} \quad s = 0, 1, 2, \dots$$

cubriendo cada lote la demanda de un número completo de periodos. Además, los lotes se fabrican en periodos que se inician sin inventario. Las secuencias dominantes tienen la propiedad de ser óptimas cuando las limitaciones de capacidad no actúan. En el caso de que lo hagan, una propiedad de las soluciones óptimas es (Zangwill [23])  $(\sum x_{it}) \cdot (\sum I_{i,t-1}) \cdot H_t = 0$ , siendo  $H_t$  la holgura de capacidad del periodo  $t$ . Las secuencias dominantes son un subconjunto de las formas de producir que satisfacen esta propiedad. Además, la resolución aproximada del problema que nos ocupa mediante los métodos duales desconsidera las limitaciones de capacidad como restricción explícita, permitiendo su transgresión. La solución óptima del modelo aproximado satisface las limitaciones de capacidad, pero con una consideración aproximada de los consumos de capacidad asociados a las puestas a punto de las series de producción. Dado que existen  $L$  periodos, el número máximo de secuencias dominantes para cada artículo es de  $F = 2^{L-1}$ . Cada secuencia define una forma de producción y un inventario resultante en todo el horizonte:

$$\begin{aligned} x_{ij} &= (x_{ij1}, x_{ij2}, \dots, x_{ijL}) = (x_{ijt}) \\ &\text{indica la secuencia dominante de producción } j \\ & (= 1, 2, \dots, 2^{L-1}) \text{ aplicada al artículo } i \\ I_{ij} &= (I_{ij1}, I_{ij2}, \dots, I_{ijL}) = (I_{ijt}) \\ &\text{indica el inventario en cada uno de los periodos,} \\ &\text{que resulta de emplear la secuencia de producción } x_{ij}. \end{aligned}$$

Escribiendo el modelo con estos elementos resulta,

$$\begin{aligned} &\text{Min } \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^F c_{ij} \theta_{ij} \\ &\text{sujeto a } \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^F m_{ijt} \theta_{ij} \leq K_t \quad t = 1, 2, \dots, L. \\ &\sum_{j=1}^F \theta_{ij} = 1 \quad i = 1, 2, \dots, N. \\ &\theta_{ij} = 0, 1 \quad \text{para cada } i, j. \end{aligned}$$

donde

$$c_{ij} = \sum_{t=1}^L (s_i \delta(x_{ijt}) + p_i x_{ijt} + h_i I_{ijt})$$

es el coste de producción e inventario de la secuencia  $x_{ij}$  en todo el horizonte;

$$m_{ijt} = a_i \delta(x_{ijt}) + b_i x_{ijt}$$

el consumo de capacidad de la secuencia  $x_{ij}$  en el periodo  $t$ ;  $\theta_{ij}$  son variables de decisión binarias indicando el empleo, ó no, de la secuencia  $x_{ij}$ .

Este modelo de variables enteras resulta de grandes dimensiones, constando de  $N + L$  restricciones y  $N \cdot 2^{L-1}$  variables binarias.

La relajación continua del modelo con  $\theta_{ij} \geq 0$  se analiza como la aproximación a la solución del problema de planificación con costes fijos y limitaciones de capacidad. Este planteamiento del problema fue introducido por Manne [16] y ha servido como modelo base para los estudios posteriores. La extensión del problema a la consideración explícita de estructuras de fabricación multinivel con un “cuello de botella” en forma de limitaciones de capacidad fue modelada por Billington *et al.* [1], y representa una extensión del modelo aquí considerado, si bien la heurística que se describe en este trabajo es aplicable también a la obtención del plan de producción de dicho cuello de botella.

### 3. SOLUCIONES APROXIMADAS

Han sido numerosos los enfoques empleados para abordar la resolución del modelo descrito. El primero de ellos corresponde a intentar desde el inicio soluciones heurísticas simples que den lugar a planes admisibles. Las limitaciones de capacidad desaconsejan la posibilidad de aplicar métodos tales como el “Part Period Balancing” (Eisenhut [5]) o el de “Mínimos Costes Medios” (Silver y Meal [20]) al problema. Los propuestos por Lambrecht y Vanderveken [8] y Dixon y Silver [2] consideran explícitamente las limitaciones de capacidad. Posteriormente Maes y Van Wassenhove [13, 14] refundieron las propuestas contenidas en estas heurísticas formulándolas de forma simplificada con lo que las necesidades computacionales disminuyen. Su procedimiento es someter el problema a una batería de este tipo de heurísticas simples y seleccionar la mejor de las soluciones obtenidas con ellas. Para situaciones en las que las limitaciones de capacidad son poco estrictas (esto es, las componentes fijas de los costes y de los consumos de capacidad de recursos son reducidas) se obtienen soluciones aceptables.

Otro enfoque ha sido abordar el modelo de programación lineal continua de Manne mediante procedimientos primales. Históricamente fue el primer enfoque, y en él se incluyen las propuestas de Dzielinski *et al.* [3], Dzielinski y Gomory [4], Lasdon y Terjung [10], pudiendo considerarse también entre ellas la de Newson [18].

Más recientemente se han aplicado procedimientos duales que analizan la relajación Lagrangiana del problema. Las restricciones relajadas son las de capacidad, que se incorporan a la función objetivo mediante la imputación de precios a los recursos empleados. Thizy y Van Wassenhove [21] aplican el método del subgradiente a la resolución del Lagrangiano. Onieva *et al.* [19] y Lozano *et al.* [11] aplican el método primal dual, extendiendo dicho procedimiento a situaciones multinivel con un “cuello de botella” en Lozano *et al.* [12].

El análisis dual tiene varias ventajas sobre los otros procedimientos (Fisher [6]) pero, y en este aspecto es igual a los métodos primales, la solución final obtenida no da lugar, necesariamente, a una solución admisible. Con el método primal dual se resuelve en cada iteración un subproblema primal reducido en el que se identifican las cantidades producidas en cada periodo. Y lo que es más significativo, el grado de inadmisibilidad de dicho plan. En particular, indica cual es el exceso u holgura de capacidad en cada periodo, actualizando en consonancia la imputación de precios a los recursos. La solución óptima del dual contiene un plan de producción admisible desde el punto de vista de la relajación continua del problema. Pero la estimación de los tiempos de puesta a punto se lleva a cabo mediante la linealización de los mismos. En la implementación práctica dicha linealización no se corresponde con la realidad, por lo que la solución óptima del modelo puede ser inadmisibile para el problema original, al incluir éste las puestas a punto completas. Por ello, todos los métodos, ya sean primales o duales, que abordan el problema de la planificación de la producción con costes fijos y tiempos de puesta a punto mediante el modelo aproximado de Manne [16] requieren de la incorporación de algún procedimiento que modifique la solución aproximada disponible. Esta regla heurística ha de tener en cuenta explícitamente el consumo discreto de la capacidad al iniciar las series de producción para la obtención de soluciones admisibles. Asimismo, ha de valorar explícitamente los costes a partir de la consideración explícita de la componente fija de los mismos.

Thizy y Van Wassenhove [21] propusieron como regla heurística resolver, en cada iteración de su método dual, un modelo de transporte. La solución disponible del problema dual proporciona en cada iteración los periodos en que se inician series de producción para cada uno de los productos. Fijados los componentes fijos de los costes  $s_i$  y de los consumos de recursos  $a_i$  asociados a los lanzamientos de la producción, y evaluada la capacidad disponible restante, resulta un problema continuo en las cantidades a producir en dichos periodos para satisfacer la demanda. Pero fijar a priori los periodos en los que se va a producir conduce en muchos casos a la inadmisibilidad del plan de producción, pues el modelo de transporte resultante es frecuentemente inadmisibile. Además, el número de variables que intervienen en el modelo de transporte es  $O(NL^2)$ ,



con lo que su tamaño y tiempo de resolución aumentan significativamente con el número de periodos.

La heurística propuesta en la siguiente sección aborda estos aspectos.

#### 4. HEURÍSTICA

Como hemos señalado, el problema de planificación de la producción con costes fijos y limitaciones de capacidad es  $NP$ -completo. Los métodos de resolución, salvo para problemas de muy reducidas dimensiones, son de tipo aproximado. En particular, todos los basados en la formulación de Manne [16]. Cuando existen tiempos de puesta a punto, la búsqueda de una solución admisible —aún cuando no sea un plan de producción eficiente— ya es de por sí  $NP$ -completo (Maes *et al.* [15]). Es por ello imprescindible disponer de una regla heurística.

En los métodos duales se parte de los precios internos  $\lambda$  asociados al consumo de los recursos, si bien es posible fijar dichos valores arbitrariamente “a priori”. Aplicando el algoritmo de Wagner-Whitin [22] empleando como costes

$$c_{ij} + \sum_{t=1}^L m_{ijt} \lambda_t$$

que tienen en cuenta los costes propios de producción  $c_{ij}$  más un término asociado a la valoración del consumo de los recursos, se resuelve el problema de planificación desconsiderando las limitaciones de capacidad. Las secuencias de producción obtenidas y los inventarios resultantes satisfacen  $x_{ij(i)t} \cdot I_{ij(i),t-1} = 0$ . Con ellas se forman las tablas de producción  $x_{it}$  y de inventarios  $I_{it}$ , que indican para las secuencias de producción identificadas la cantidad producida de cada artículo en cada uno de los periodos del horizonte y sus inventarios resultantes, evaluándose el vector de capacidades disponibles

$$Z_t = K_t - \left( \sum_{j=1}^N a_j \delta(x_{jt}) + b_j x_{jt} \right)$$

Si  $Z_t > 0$  para todo  $t$ , la solución obtenida es admisible. En caso contrario ha de modificarse el plan de producción mediante la heurística.

La heurística que se propone puede aplicarse por sí misma, fijando los precios internos de los recursos  $\lambda$  arbitrariamente, o mejor en conjunción con un método

de selección de los mismos. En los métodos duales, tal como en el método primal-dual (Onieva *et al.* [19], Lozano *et al.* [11], [12]) se pueden emplear los precios internos  $\lambda$  procedentes de las soluciones admisibles del problema dual que se obtienen en cada iteración. Así, cada iteración del método primal-dual supone una aplicación de la regla heurística.

La regla heurística consta de tres bloques:

### Bloque I.

Las reglas del primer bloque particionan los lotes fabricados en el último periodo en el que existe inadmisibilidad, retrasándola en la medida de lo posible hacia el periodo posterior en el que la holgura sea máxima, con el fin de que la situación resultante no sea desfavorable. El retraso se lleva a cabo incrementando los costes lo menos posible.

- 1º Sea  $t = \max\{t' : Z_{t'} < 0\}$ . Se identifica con  $t$  el periodo más tardío en el que se presenta inadmisibilidad. Obviamente, si  $Z_{t'} > 0$  para todos los periodos, la solución obtenida es admisible. FIN.
- 2º Sea  $\Omega = \{i : x_{it} \cdot I_{it} > 0\}$ . Es el conjunto de artículos que producen en exceso de la demanda del periodo considerado  $t$ . Son artículos para los que se puede contemplar el retraso de su producción, manteniendo la admisibilidad.
- 3º 3.1 Si  $\Omega = \emptyset$ , no se puede retrasar la producción. Ir a 8 (segundo bloque).  
 3.2 Se ordenan los artículos en orden creciente (no decrecientes si hay empates) del indicador de incremento de costes

$$\frac{s_i(a_i + 1)}{b_i h_i}$$

La racionalidad de este criterio proviene del hecho de que al romper un lote se incurre en un coste de lanzamiento adicional y se ahorra el coste de mantenimiento debido al retraso de la producción. Se incluyen también los consumos de recurso  $a_i$  y  $b_i$  con la finalidad de liberar la máxima cantidad del mismo en el periodo  $t$ , comprometiendo la menor cantidad posible del periodo al que se retrasa (véase el punto 5º de este bloque). La inclusión de la unidad elimina la degeneración cuando  $a_i = 0$ . Obsérvese que al no depender el criterio de ordenación de la solución concreta de partida, dicha ordenación puede hacerse a priori una sola vez. Obsérvese también que el criterio favorece el doble objetivo de la heurística: minimizar el consumo de recursos y el incremento de los costes.

- 4° 4.1 Si  $I_{it} = 0$ , eliminar  $i$  de  $\Omega$  y volver a 3°. Probar con el siguiente artículo.  
 4.2 Sea  $T = \min\{t': t' > t, I_{it'} = 0\}$ , el periodo hasta el que se abastece la demanda del artículo  $i$  con el lote producido en el periodo  $t$ .  
 5° Sea  $\tau(t, T)$  el periodo para el que se obtiene la máxima holgura de capacidad; i.e.,  $\max\{Z_{it'}: t < t' < T\}$ . Es el periodo candidato al que retrasar el exceso de producción del artículo  $i$  en  $t$ . Si  $Z_\tau \leq a_i$ , el retraso produciría inadmisibilidad en  $\tau$ , en cuyo caso, eliminar  $i$  de  $\Omega$  e ir a 3°.   
 6° Retrasar al periodo  $\tau$  la producción de la cantidad

$$\Delta = \min \left\{ \left\lceil \frac{Z_t - a_i(1 - \delta(x_{i\tau}))}{b_i} \right\rceil, \min_{t \leq t' < \tau} I_{it'} \right\}$$

Actualizar las variables del plan de producción y los indicadores de consumo de recursos:

$$\begin{aligned} Z_t &\Leftarrow Z_t + b_i \Delta \\ Z_\tau &\Leftarrow Z_\tau - b_i \Delta - a_i(1 - \delta(x_{i\tau})) \\ x_{it} &\Leftarrow x_{it} - \Delta \\ x_{i\tau} &\Leftarrow x_{i\tau} + \Delta \\ I_{it'} &\Leftarrow I_{it'} - \Delta \quad \text{para } t' = t, t+1, \dots, \tau-1. \end{aligned}$$

La cantidad  $\Delta$  a traspasar está limitada por la holgura del periodo  $\tau$  y los inventarios retrasados hasta dicho periodo. El corchete significa “parte entera”, garantizando mediante el redondeo hacia abajo la admisibilidad en el periodo  $\tau$ .

- 7° Si  $Z_t \geq 0$ , se ha eliminado la inadmisibilidad en  $t$ . Ir a 1°.  
 Si  $Z_t < 0$ , se ha de continuar rompiendo lotes en  $t$ . Ir a 4°.

Obsérvese que el conjunto de reglas del bloque I finalizan:

- Al alcanzar la admisibilidad (punto 7°).
- Al agotarse el conjunto de artículos cuya producción pueda atrasarse (punto 3.1). En este caso se aplican las reglas del bloque II.

## Bloque II.

Las reglas del segundo bloque adelantan la producción a periodos anteriores en los que haya holgura de capacidad sin crear nuevas puestas a punto (por ya existir en ellos fabricación de lotes).

- 8° Sea  $\Lambda = \{i: x_{it} > 0\}$ , el conjunto de artículos de los que se produce en el periodo  $t$ .
- 9° Sea  $Q = \max\{t': t' < t, Z_{t'} > 0\}$ , el periodo anterior más próximo a  $t$  en el que hay holgura de capacidad. Si  $Q = 0$ , i.e.,  $Z_{t'} < 0$  para todo  $t' < t$ , FIN sin solución admisible.
- 10° 10.1 Si  $\Lambda = \emptyset$ , no se puede adelantar producción sin crear lanzamientos. Ir a 14° (bloque III).
- 10.2 Se ordenan los artículos de  $\Lambda$  de forma creciente (no decreciente si hubiera empates) del indicador de incremento de coste de mantenimiento de inventarios por unidad de recurso  $h_i/b_i$ . Dicho indicador describe el incremento de los costes de mantenimiento debido al adelantamiento de la producción por cada unidad de recurso liberado.
- 11° Sea  $\tau' = \max\{t': t' < t, x_{it'} > 0\}$ , el periodo anterior más próximo a  $t$  en el que se incurre en tiempo de puesta a punto para el artículo  $i$ . Si  $\tau' \neq Q$ , eliminar dicho artículo de  $\Omega$  pues en el periodo  $Q$  con capacidad disponible no se inicia una serie de producción del artículo  $i$ . Ir a 10°.
- 12° Adelantar la producción de la cantidad

$$\Delta' = \min \left\{ \left\lceil \frac{-Z_t}{b_i} + 1 \right\rceil, \left\lfloor \frac{Z_Q}{b_i} \right\rfloor, x_{it} \right\}$$

del periodo  $t$  al  $Q$ . Actualizar según las relaciones:

$$\begin{aligned} Z_t &\Leftarrow Z_t + b_i \Delta' + a_i (1 - \delta(x_{it})) \\ Z_Q &\Leftarrow Z_Q - b_i \Delta' \\ x_{it} &\Leftarrow x_{it} - \Delta' \\ x_{iQ} &\Leftarrow x_{iQ} + \Delta' \\ I_{it'} &\Leftarrow I_{it'} + \Delta' \quad \text{para } t' = Q, Q+1, \dots, t-1. \end{aligned}$$

La cantidad adelantada está limitada por el exceso de capacidad consumida en el periodo  $t$ , la holgura en el periodo  $Q$  y la cantidad producida en  $t$ .

- 13° 13.1 Si  $Z_t \geq 0$ , se ha eliminado la inadmisibilidad en el periodo  $t$ . Ir a 1° (se reinicia el bloque I).
- 13.2 Si  $Z_Q = 0$ , se ha saturado el periodo  $Q$ . Ir a 8°.
- 13.3 Si  $Z_Q > 0$ , eliminar  $i$  de  $\Lambda$  e ir a 10°.

Este bloque de la heurística se abandona de tres formas posibles:

- Se obtiene admisibilidad en el periodo  $t$  considerado. Es en el paso 13.1.

- No se puede adelantar la producción salvo incurriendo en nuevos lanzamientos. Es el paso 10.1.
- Todos los periodos anteriores están saturados. Es el paso 9°.

### Bloque III.

Las reglas de este último bloque tienen la finalidad de adelantar la producción en el caso de que sea necesario recurrir a nuevas puestas a punto para llevarla a cabo.

14° Sea  $\Psi = \{i: x_{it} > 0, x_{iQ} = 0\}$ , donde  $Q$  se definió en 9°.

15° 15.1 Si  $\Psi = \emptyset$ , FIN sin soluciones admisibles.

15.2 Se ordenan los artículos de  $\Psi$  de forma creciente según el indicador

$$\frac{s_i h_i (a_i + 1)}{b_i}$$

que penaliza los incrementos en los costes de mantenimiento así como el tiempo de puesta a punto incurrido por un nuevo lanzamiento. El indicador favorece la disminución en el consumo del recurso sobresaturado en el periodo  $t$ .

16° Si  $Z_Q \leq a_i$ , eliminar  $i$  de  $\Psi$ , pues no existe capacidad suficiente en el periodo  $Q$ . Ir a 15°.

17° Crear en  $Q$  un nuevo lanzamiento, adelantando la producción de la cantidad

$$\Delta'' = \min \left\{ \left\lceil \frac{Z_Q - a_i}{b_i} \right\rceil, \left\lceil -\frac{Z_t}{b_i} + 1 \right\rceil, x_{it} \right\}$$

Actualizar

$$Z_t \Leftarrow Z_t + b_i \Delta'' + a_i (1 - \delta(x_{it}))$$

$$Z_Q \Leftarrow Z_Q - \Delta'' - a_i$$

$$x_{it} \Leftarrow x_{it} - \Delta''$$

$$x_{iQ} \Leftarrow \Delta''$$

$$I_{it'} \Leftarrow I_{it'} + \Delta'' \quad \text{para } t' = Q, Q+1, \dots, t-1.$$

18° Si  $Z_t < 0$ , hay que seguir adelantando la producción en el periodo  $t$ , ya que todavía no hay admisibilidad.

18.1 Si  $Z_Q = 0$ , se ha agotado la holgura existente en el periodo  $Q$ . Ir a 8°.

18.2 Si  $Z_Q > 0$ , todavía se puede adelantar producción al periodo  $Q$ . Se elimina  $i$  del conjunto  $\Psi$ . Ir a 15°.

Los pasos que siguen únicamente pretenden economizar en los costes de mantenimiento aprovechando la nueva puesta a punto introducida en el periodo  $Q$ .

19° Se intenta retrasar la producción de periodos anteriores a  $Q$ .

19.1 Si  $I_{i,Q-1} = 0$ , no se pueden reducir los costes de mantenimiento. Ir a 1°.

19.2 Si  $I_{i,Q-1} > 0$ , o sea  $Q' = \max\{t': t < Q, x_{it} > 0\}$  el primer periodo anterior a  $Q$  en el que se produce el artículo  $i$ .

20° Retrasar del periodo  $Q'$  al  $Q$  la producción de la cantidad

$$\Delta''' = \min \left\{ I_{i,Q-1}, \left\lfloor \frac{Z_Q}{b_i} \right\rfloor \right\}$$

actualizando las variables

$$Z_{Q'} \Leftarrow Z_{Q'} + b_i \Delta''' + a_i (1 + \delta(x_{iQ'}))$$

$$Z_Q \Leftarrow Z_Q - b_i \Delta'''$$

$$x_{iQ'} \Leftarrow x_{iQ'} - \Delta'''$$

$$x_{iQ} \Leftarrow x_{iQ} + \Delta'''$$

$$I_{it'} \Leftarrow I_{it'} - \Delta''' \quad \text{para } t' = Q', Q' + 1, \dots, Q - 1.$$

Los pasos 19° y 20° se realizan cuando  $Z_t > 0$ , con lo que la inadmisibilidad en el periodo  $t$  se ha eliminado y tienen por objeto disminuir costes. Tras su realización hay que volver a 1° para continuar si aún hay periodos con inadmisibilidad.

La jerarquía de la heurística corresponde a la búsqueda prioritaria de la admisibilidad de la solución. En primer lugar se atrasa la producción (bloque I), incurriéndose en nuevos costes de lanzamiento y disminuyendo los de mantenimiento del inventario.

Esta forma de actuar permite aprovechar las holguras de capacidad de periodos posteriores y, en especial, de los últimos periodos. En efecto, en los últimos periodos suele haber bastante capacidad disponible debido a un efecto de fin de horizonte finito que hace que sea frecuentemente económico hacer lanzamientos en dichos periodos. En caso necesario se continua la búsqueda de la admisibilidad adelantando producción (bloque II), pero sin nuevos costes de lanzamiento.

Como consecuencia del adelanto aumentan los costes de mantenimiento del stock. Finalmente, si es imprescindible, se adelanta producción aún a costa de introducir nuevos lanzamientos (bloque III). A pesar de todos los intentos, la heurística no garantiza que se alcance la admisibilidad.

## 5. INTEGRACIÓN CON ENFOQUES DUALES

La heurística anteriormente descrita ha sido diseñada para conseguir admisibilidad a partir de los planes de producción que en cada iteración generan los enfoques duales. Dichos planes de producción son obtenidos, tras la relajación de las restricciones de capacidad y la asignación de precios a los recursos escasos, mediante el algoritmo de Wagner-Whitin [22] y, por ello, están formados por secuencias dominantes.

Entre los enfoques duales, a los que se ha añadido la heurística, destacan el método primal-dual (Lozano *et al.* [11]) y el método del subgradiente de Thizy y Van Wassenhove [21]. En este último caso, la heurística sustituye con éxito al problema de transporte propuesto en dicho trabajo. Asimismo, la heurística puede incorporarse al método BOXSTEP utilizado en Marsten [17].

La bondad de las soluciones proporcionadas por la heurística depende del plan de producción generado por el enfoque dual correspondiente. Así, se observa que a medida que avanza el número de iteraciones, los precios de los recursos que asignan los enfoques duales son más adecuados y ello da lugar a mejores soluciones. Al aplicar la heurística a estas soluciones se obtienen a su vez planes de producción admisibles, cada vez más próximos al óptimo.

Aunque el plan de producción óptimo es en general desconocido, ya que el tamaño del problema hace prohibitiva su resolución exacta, sí es posible estimar la proximidad a dicho óptimo de las soluciones proporcionadas por la heurística. Ello puede hacerse utilizando el máximo valor del Lagrangiano obtenido por el enfoque dual, ya que para cualquier conjunto de valores no negativos de los recursos el Lagrangiano es una cota inferior del coste del plan de producción óptimo. En particular, el óptimo Lagrangiano al que converge el método primal dual permite la mejor estimación del error cometido por la heurística. Como se informa en Lozano *et al.* [11] dicho error es del orden del 5%. Sin embargo, teniendo en cuenta que dicha estimación incluye la diferencia entre el óptimo del dual y el del primal (“duality gap”), que no es nula debido a la estructura no convexa del problema original, el error real cometido por la heurística es aún menor.

Así pues, la heurística propuesta es capaz de proporcionar, con un esfuerzo computacional reducido, planes de producción admisibles y que además, a medida que se itera con un enfoque dual, tienen un coste bastante próximo al mínimo.

## 6. EXPERIENCIAS COMPUTACIONALES

Para evaluar la bondad de la heurística propuesta se han escogido ocho problemas de la literatura. Dichos problemas son de tamaño reducido, con el fin de poder conocer la solución óptima. Además, todos ellos salvo el último tienen tiempos de puesta a punto nulos. De esta forma es posible la comparación con otras heurísticas que sólo son capaces de abordar estas situaciones.

En la tabla adjunta se presentan los resultados que para dichos problemas proporcionan:

- PDH La heurística propuesta complementando al método primal-dual ([11], [12] y [19]).
- SGH La heurística propuesta complementando al método del subgradiente ([21]).
- LAM La heurística de Lambrecht y Vanderveken ([8]).
- ABC La heurística múltiple de Maes y Van Wassenhove ([13]).

A todas ellas se les ha aplicado la misma rutina de eliminación de lotes, mediante la que se suprime el lanzamiento de las series de los artículos que se fabrican en el periodo inmediatamente anterior, siempre que las limitaciones de capacidad lo permitan. Dicha rutina de mejora es aconsejable siempre y no supone esfuerzo computacional apreciable (Dixon y Silver [2], Maes y Van Wassenhove [13]).

En la tabla se recogen también el coste de la solución óptima y el óptimo Langrangiano, que es la máxima cota inferior que puede alcanzarse mediante procedimientos duales. Esta cota se emplea para acotar el máximo error cometido por la heurística en aquellos problemas cuyo óptimo es desconocido.

Los resultados muestran que la heurística aquí propuesta proporciona normalmente mejores soluciones que las otras con las que se compara, pudiéndose aplicar a problemas con tiempos de puesta a punto.



**Tabla 1**  
Experiencias computacionales

Problema	Ref.	Ítems	Periodos	Setup	Óptimo	Lagrangiano	PDH	SGH	LAM	ABC
Thizy	21	3	4	No	1336	1233.3	1340	1340	1340	1340
Lambrecht	8	3	4	No	1412.6	1309.5	1412.6	1413.9	1413.6	1415
CAP 1	21	8	8	No	8430	7996.6	8690	8690	9680	8900
CAP 2	21	8	8	No	7910	7722.2	8100	8100	8080	8270
CAP 3	21	8	8	No	7610	7534.1	7620	7620	7870	7860
CAP 4	21	8	8	No	7520	7464.1	7520	7660	7850	7730
Dixon	2	20	13	No	5807	5673.3	5891.9	5848	6144.4	6112.2
Marsten1	17	25	6	Sí	?	48208.8	48481	48646	48800	——

Para mejor mostrar el carácter complementario de la heurística propuesta y los métodos duales, en la figura 1 se recoge la evolución del Lagrangiano junto con la de la mejor solución proporcionada por la heurística, a medida que itera el método primal-dual aplicado al problema que se ha denominado MARS-TEN1. Se observa que la cota inferior proporcionada por el Lagrangiano converge monótonamente a su óptimo (el de la relajación continua). Simétricamente, las soluciones de la heurística van mejorando progresivamente a medida que se apoya en las secuencias de producción más apropiadas, las cuales surgen al asignar mejor los precios internos de los recursos escasos.

### Evolución de la heurística

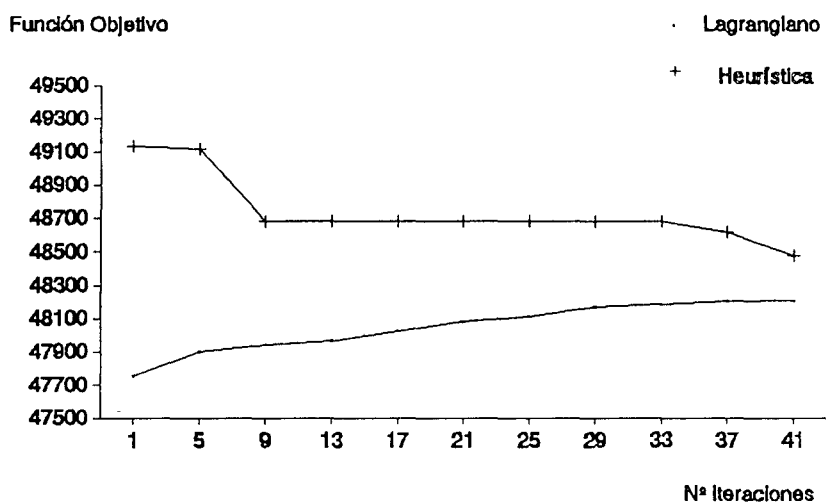


Figura 1.

## 7. REFERENCIAS

- [1] Billington, P.; McClain, J. y Thomas, L. (1983). "Mathematical Programming Approaches to Capacity-Constrained MRP Systems: Review, Formulation and Problem Reduction". *Management Science*, Vol. 29, 1126-1141.
- [2] Dixon, P.S. y Silver, E.A. (1981). "A Heuristic Solution Procedure for the Multi-item Single-Level Limited Capacity Lot-Sizing Problem". *J. of Operations Management*, Vol. 2, 23-29.
- [3] Dzielinski, B.P.; Baker, C.T. y Manne, A.S. (1963). "Simulation Tests of Lot Size Programming". *Management Science*, Vol. 9, 229-258.
- [4] Dzielinski, B.P. y Gomory, R.E. (1965). "Optimal Programming of Lot Sizes, Inventory and Labor Allocations". *Management Science*, Vol. 11, 874-890.
- [5] Eisenhut, P.S. (1975). "A Dynamic Lot Sizing Algorithm with Capacity Constraints". *AIIE Transactions*, Vol. 7, 170-176.
- [6] Fisher, M.L. (1981). "The Lagrangean Relaxation Method for Solving Integer Programming Problems". *Management Science*, Vol. 27, 1-18.
- [7] Florian, M.; Lenstra, J.K. y Rinooy Kan, A.H.G. (1980). "Deterministic Production Planning: Algorithms and Complexity". *Management Science*, Vol. 26, 669-679.
- [8] Lambrecht, M.R. y Vanderveken, H. (1979). "Heuristic Procedure for the Single-Operation Multi-item Loading Problem". *AIIE Transactions*, Vol. 11, 319-326.
- [9] Larrañeta, J.; Onieva, L. y Lozano, S. (1988) *Métodos Modernos de Gestión de Producción*. Alianza Editorial.
- [10] Lasdon, L.S. y Terjung, R.C. (1971). "An Efficient Algorithm for Multi-item Scheduling". *Operations Research*, Vol. 19, 946-969.
- [11] Lozano, S.; Larrañeta, J. y Onieva, L. (1991). "Primal-Dual Approach to the Single Level Capacitated Lot-Sizing Problem". *European J. of Operational Research*, Vol. 51, 354-366.
- [12] Lozano, S.; Larrañeta, J. y Onieva, L. (1991). "Planificación Multinivel con Limitaciones de Capacidad". *Qüestió*, Vol. 15.
- [13] Maes, J. y Van Wassenhove, L. (1986). "A simple Heuristic for the Multi-item Single-Level Capacitated Lot-Sizing Problem". *Operations Research Letters*, Vol. 4, 265-273.
- [14] Maes, J. y Van Wassenhove, L. (1986). "Multi-item Single-Level Capacitated Dynamic Lot-Sizing Heuristics: A Computational Comparison (Part I: Static Case)". *IEE Transactions*, Vol. 18, 114-123.

- [15] Maes, J.; McClain, J.O. y Van Wassenhove, L. (1991). "Multilevel Capacitated Lot-sizing Complexity and  $LP$ -based Heuristics". *European J. of Operational Research*, Vol. 53, 131-148.
- [16] Manne, A.S. (1958). "Programming of Economic Lot Sizes". *Management Science*, Vol. 4, 115-135.
- [17] Marsten, R.E. (1975). "The Use of the BOXSTEP Method in Discrete Optimization". *Mathematical Programming Study*, Vol. 3, 127-144.
- [18] Newson, E.F. (1975). "Multi-item Lot Size Scheduling by Heuristic. Part I: With Fixed Resources". *Management Science*, Vol. 21, 1186-1193.
- [19] Onieva, L.; Lozano, S.; Larrañeta, J. y Ruiz, R. (1987). "Método Primal Dual para Modelos de Planificación con Costes Cóncavos y Limitaciones de Capacidad". *Qüestió*, Vol. 11, 117-133.
- [20] Silver, E.A. y Meal, H. (1973). "A Heuristic for Selecting Lot-Size Quantities for the Case of a Deterministic Time-Varying Demand Rate and Discrete Opportunities for Replenishment". *Production and Inventory Management*, Vol. 12, 64-74.
- [21] Thizy, J.M. y Van Wassenhove, L. (1985). "Lagrangean Relaxation for the Multi-item Capacitated Lot-Sizing Problem: A Heuristic Implementation". *IIE Transactions*, Vol. 17, 308-313.
- [22] Wagner, H.M. y Whitin, T.M. (1958). "A Dynamic Version of the Economic Lot Size Model". *Management Science*, Vol. 5, 89-96.
- [23] Zangwill, W.I. (1968). "Minimum Convex Cost Flows in Certain Networks". *Management Science*, Vol. 14, 429-450.

## ENGLISH SUMMARY:

### COMPLEMENTARY HEURISTIC TO DUAL APPROACHES TO THE CAPACITATED LOT-SIZING PROBLEM

S. Lozano, J. Larrañeta y L. Onieva

## 1. INTRODUCTION

The single level capacitated lot-sizing problem (SLCLSP) consists in determining the quantities and timing of production batches in order to satisfy known

or expected external requirements while incurring in minimum costs. No backlogging is allowed. There are limits on the amount of resource available in each period. This problem is known to be *NP*–Complete [7].

## 2. MODEL FORMULATION

Let:

$N$  – Number of items

$L$  – Number of periods

$x_{it}$  – Production of item  $i$  in period  $t$

$I_{it}$  – Inventory of item  $i$  in period  $t$

$D_{it}$  – Demand of item  $i$  in period  $t$

$s_i$  – Setup cost for item  $i$

$p_i$  – Marginal production cost for item  $i$

$h_i$  – Unit holding cost for item  $i$

$K_t$  – Available capacity in period  $t$

$a_i$  – Setup time for item  $i$

$b_i$  – Capacity absorption coefficient for item  $i$

The mathematical model is:

$$\begin{aligned} & \text{Min } \sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^L (s_i \delta(x_{it}) + p_i x_{it} + h_i I_{it}) \\ & \text{subject to } I_{i,t-1} + x_{it} - I_{it} = D_{it} \quad i = 1, \dots, N; t = 1, \dots, L \\ & \sum_{i=1}^N (a_i \delta(x_{it}) + b_i x_{it}) \leq K_t \quad t = 1, \dots, L \\ & x_{it} \geq 0, I_{it} \geq 0, I_{i0} = 0 \end{aligned}$$

where

$$\delta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x = 0 \end{cases}$$

This problem can be reformulated in terms of dominant schedules. Such schedules are the ones for which the following holds:

$$x_{it} = \sum_{k=t}^{t+s} D_{ik} \quad s = 0, 1, 2, \dots$$

This is known as Manne's [16] formulation:

$$\begin{aligned} & \text{Min } \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^F c_{ij} \theta_{ij} \\ & \text{subject to } \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^F m_{ijt} \theta_{ij} \leq K_t \quad t = 1, 2, \dots, L. \\ & \sum_{j=1}^F \theta_{ij} = 1 \quad i = 1, 2, \dots, N. \\ & \theta_{ij} = 0, 1 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} c_{ij} &= \sum_{t=1}^L (s_i \delta(x_{ijt}) + p_i x_{ijt} + h_i I_{ijt}) \\ m_{ijt} &= a_i \delta(x_{ijt}) + b_i x_{ijt} \end{aligned}$$

### 3. APPROXIMATE SOLUTIONS

The previous linear program is difficult to solve because of the big number of variables involved. It has been solved using specialized large scale algorithms ([3], [4], [10], [18]). Another practical approach is to use primal heuristics ([5], [20], [8], [2], [13], [14]).

However, a more promising approach is to use a dual approach ([21], [19], [11], [12]). This approach consists in relaxing the capacity constraints, computing adequate shadow prices. The uncapacitated relaxed problem can be independently solved for each item.

The solution to Manne's formulation assumes a linear approximation of the setup consumption of capacity. Thus, the resulting production plan usually is

unfeasible. Therefore, it is necessary to devise a manner to look for feasibility by minor modification of the solution.

#### 4. HEURISTIC

This section describes a heuristic aimed at obtaining a feasible production plan. It can be used in problems with setup times. Recall that in this case, even to find such a solution is *NP*-complete [15].

The heuristic consists in reducing the capacity requirements in those periods in which insufficient capacity exists. Starting with the last period, the previous period in which infeasibility occurs is detected and three attempts are made to eliminate it. If these attempts are successful, then the closest previous period showing infeasibility is considered next and the process is repeated. If the algorithm fails to eliminate the infeasibility in any of these periods, it stops. If, in turn, period 0 is reached, a feasible production plan has been found. The three attempts are called Blocks I, II and III because that is the order in which they are applied.

Block I splits lots creating new setups in later periods without introducing new infeasibilities. Items are considered in non-decreasing order of the following ratio.

This ratio penalizes the cost and time due to the new setups and favours holding cost savings and infeasibility reduction. As a consequence, this routine makes better use of the available capacity

$$\frac{s_i(a_i + 1)}{b_i h_i}$$

of the later periods of the horizon. Such unused can be important depending on the degree of batching of the solution. An example of this situation is the often found finite-horizon effect which consists in that the latest periods setups are rarely cost effective.

Block II shifts production to earlier periods in which a setup already exists and enough slack is available. Items are considered in non-decreasing order of the ratio  $h_i/b_i$  which penalizes holding cost increase and favours infeasibility reduction. These shifts lead to an increase in holding costs though no additional setup costs are incurred. Even setups can be saved in the feasible period if entire lots are shifted.

Block III also shifts production to earlier periods with slack capacity by creating new setups. Items are considered in non-decreasing order of the ratio

$$\frac{s_i h_i (a_i + 1)}{b_i}$$

which penalizes setup and holding cost increase, and resource consumption due to the new setups, favouring infeasibility reduction. Every shift increases both setup and holding costs. Therefore, this routine is invoked only if blocks I and II fail to eliminate all the infeasibility in the given period.

## 5. INTEGRATION WITH DUAL APPROACHES

The proposed heuristic is a perfect complement to dual approaches since the latter update the resource prices in every iteration generating a cost effective solution (composed of dominant schedules) which, unfortunately, is not feasible. The heuristic makes minor adjustments to such solutions in order to improve its feasibility. In particular, it has been integrated with a primal dual approach [11] and the subgradient method [21].

Also, dual approaches provide lower bounds on the optimal solution, which can be used to assess the quality of the solution obtained by the heuristic.

## 6. COMPUTATIONAL EXPERIENCES

The heuristic, appended to the primal dual and subgradient methods, has been applied to several problems, comparing the solution obtained to those provided by other heuristics ([8], [13]). The results are included in table 1. They show the merit of this heuristic approach.



## CONTRASTES DE HIPÓTESIS BASADOS EN LA $(r, s)$ -DIVERGENCIA: APLICACIÓN A DISTRIBUCIONES MULTINOMIALES Y NORMALES MULTIVARIANTES

MORALES, D., PARDO, L., SALICRÚ, M. y MENÉNDEZ, M.L.

*En este trabajo se obtiene la distribución asintótica de la  $(r, s)$ -divergencia, introducida por Sharma y Mittal 1975, entre dos densidades  $f_{\theta_1}, f_{\theta_2}$  cuando  $\theta_2$  es fijo y  $\theta_1$  desconocido o bien cuando los dos son desconocidos. Se supone que los parámetros desconocidos se estiman de acuerdo con el principio de máxima verosimilitud. Como caso particular se obtienen las distribuciones asintóticas en el caso de poblaciones multinomiales. Se concluye el trabajo construyendo, sobre la base de los estadísticos citados, contrastes de hipótesis para poblaciones normales multidimensionales.*

**Test of hypotheses on the  $(r, s)$ -divergence: applications to multinomial and multivariate normal distributions.**

**Keywords:** Contrastes de hipótesis,  $(r, s)$ -divergencia, distribuciones normales multivariantes.

---

—MORALES, D. y PARDO, L. Dep. Estadística e I.O. Fac. Matemáticas. Univ. Complutense de Madrid. 28040 MADRID (SPAIN).

—SALICRÚ, M. Dep. Estadística. Univ. Barcelona. Av. Diagonal, 645. 08028 BARCELONA (SPAIN).

—MENÉNDEZ, M.L. Dep. Matemática Aplicada. E.T.S. Arquitectura. Univ. Politécnica Madrid. 20049 MADRID (SPAIN).

—Article rebut el desembre de 1991.

—Acceptat el juny de 1992.

## 1. INTRODUCCIÓN

Para un espacio estadístico  $(\mathfrak{X}, \beta_{\mathfrak{X}}, P_{\theta})_{\theta \in \Theta \subset \mathbf{R}^k}$  dominado por una medida  $\mu$   $\sigma$ -finita, de forma que  $f_{\theta}(x) = (dP_{\theta}/d\mu)(x)$ , Sharma y Mittal (1977) definen la  $(r, s)$ -divergencia entre dos funciones de densidad de probabilidad  $f_{\theta_1}(x), f_{\theta_2}(x)$  mediante la expresión

$$(1) \quad D_r^s(\theta_1, \theta_2) = (s-1)^{-1} \left\{ \left( \int_{\mathfrak{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu(x) \right)^{\frac{s-1}{r-1}} - 1 \right\}$$

$r \neq 1, s \neq 1, r > 0$

donde  $\theta_1 = (\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})$  y  $\theta_2 = (\theta_{21}, \dots, \theta_{2k})$ .

Si  $s$  tiende a 1, se obtiene la divergencia de Rényi (1961)

$$\lim_{s \rightarrow 1} D_r^s(\theta_1, \theta_2) = (r-1)^{-1} \log \left( \int_{\mathfrak{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu(x) \right)$$

y al hacer tender  $r$  a 1, se obtiene la divergencia

$$D_1^s(\theta_1, \theta_2) = (s-1)^{-1} (\exp \{(s-1)D(f_{\theta_1}(x), f_{\theta_2}(x))\} - 1) \quad s \neq 1$$

siendo  $D(\theta_1, \theta_2)$  la divergencia dirigida de Kullback-Leibler (1951) definida por

$$D_1^1(\theta_1, \theta_2) = D(\theta_1, \theta_2) = \int_{\mathfrak{X}} f_{\theta_1}(x) \log \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_2}(x)} d\mu(x)$$

Algunas propiedades relativas a la no negatividad, monotonía, convexidad, suficiencia y expresión de la distancia entre distribuciones normales a partir de la  $(r, s)$ -divergencia se obtienen en Pardo, L. y otros (1990).

Bajo las siguientes condiciones de regularidad

(i) El conjunto  $A = \{x \in \mathfrak{X} / f(x, \theta) > 0\}$  no depende de  $\theta$ .

(ii) Para todo  $x \in A$  y para todo  $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_k) \in \Theta$ , existen

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i} f(x, \theta), \quad \frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} f(x, \theta) \quad i, j = 1, \dots, k$$

(iii) Para cada  $B \in \beta_{\mathfrak{X}}$  y para cada  $i, j = 1, \dots, k$ .

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i} \int_B f(x, \theta) d\mu = \int_B \frac{\partial}{\partial \theta_i} f(x, \theta) d\mu$$

y

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \int_B f(x, \theta) d\mu = \int_B \frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} f(x, \theta) d\mu$$

y considerando las estimaciones de las funciones de densidad de probabilidad  $f_{\theta_1}$  y  $f_{\theta_2}$  por el método de máxima verosimilitud, con muestras de tamaño  $n$  y  $m$  respectivamente, Kupperman (1957) estableció, bajo la hipótesis  $\theta_1 = \theta_2$ , que los estadísticos  $2nD(\hat{\theta}_1, \theta_2)$  y  $\frac{n \cdot m}{n+m} D(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)$  se distribuyen asintóticamente según leyes  $\chi^2$  con  $k$  grados de libertad.

El objetivo en este trabajo es doble, primeramente se calculará la distribución asintótica de  $D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)$  y  $D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)$  donde  $\hat{\theta}_1$  y  $\hat{\theta}_2$  denotan los estimadores de máxima verosimilitud de  $\theta_1$  y  $\theta_2$  respectivamente. Por otro lado utilizando estos resultados y los obtenidos en Pardo, L. y otros (1990), se plantean contrastes de hipótesis en poblaciones normales  $n$ -dimensionales acerca del vector de medias, matriz de covarianzas o ambos.

## 2. COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO DE $D_r^s(\theta_1, \theta_2)$

En primer lugar se abordará el problema de encontrar la distribución de  $D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)$ , cuando  $\theta_2$  es conocido y  $\hat{\theta}_1$  es el estimador de máxima verosimilitud de  $\theta_1$ . En este sentido hemos encontrado el siguiente resultado

### Teorema 1

Si  $\theta_1 \neq \theta_2$ , entonces

$$n^{1/2} \left( D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2) \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{L} N(0, T^t I_F^{-1}(\theta_1) T)$$

donde  $I_F(\theta_1)$  es la matriz de información de Fisher y  $T = (t_1, \dots, t_k)^t$  con

$$(2) \quad t_i = \frac{r}{r-1} \left( \int_{\mathcal{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right)^{\frac{s-r}{r-1}} \cdot \int_{\mathcal{X}} \left( \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_2}(x)} \right)^{r-1} \frac{\partial f_{\theta_1}(x)}{\partial \theta_{1i}} d\mu$$

cuando  $T^t I_F^{-1}(\theta_1) T > 0$ .

### Demostración

De considerar el desarrollo de Taylor de la función

$$h_r^s(\theta_{11}, \dots, \theta_{1k}) = \frac{1}{s-1} \left[ \left( \int f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right)^{\frac{s-1}{r-1}} - 1 \right]$$

para el punto  $\hat{\theta}_1 = (\hat{\theta}_{11}, \dots, \hat{\theta}_{1k})$  en un entorno del punto  $\theta_1 = (\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})$  se tiene

$$(3) \quad \begin{aligned} D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2) &= D_r^s(\theta_1, \theta_2) + \sum_{i=1}^k \frac{\partial D_r^s(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_{1i}} (\hat{\theta}_{1i} - \theta_{1i}) + \\ &+ \mathcal{E}_n \|\hat{\theta}_1 - \theta_1\| \end{aligned}$$

donde  $\mathcal{E}_n \xrightarrow{P} 0$  cuando  $\hat{\theta}_1 \rightarrow \theta_1$ .

Ahora bien,

$$\begin{aligned} t_i &= \frac{\partial D_r^s(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_{1i}} = \\ &= \frac{r}{r-1} \left( \int_{\mathfrak{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right)^{\frac{s-r}{r-1}} \cdot \int_{\mathfrak{X}} \left( \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_2}(x)} \right)^{r-1} \frac{\partial f_{\theta_1}(x)}{\partial \theta_{1i}} d\mu \end{aligned}$$

Entonces, de considerar que

$$D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2) \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^k t_i (\hat{\theta}_{1i} - \theta_{1i})$$

siguen la misma distribución y que

$$\sqrt{n}(\hat{\theta}_{11} - \theta_{11}, \dots, \hat{\theta}_{1k} - \theta_{1k}) \xrightarrow{L} N(0, I_F^{-1}(\theta_1))$$

se tiene

$$\sqrt{n} \left( D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2) \right) \xrightarrow{L} N(0, T^t I_F^{-1}(\theta_1) T)$$

con

$$T = (t_1, \dots, t_k)^t$$

■

Cuando  $\theta_1 = \theta_2$ , los términos  $t_i$  del desarrollo de Taylor (3) son nulos, y por eso, es necesario recurrir a los términos de segundo orden. En este supuesto, hemos obtenido

## Teorema 2

Si  $\theta_1 = \theta_2$ , entonces

$$\frac{2nD_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)}{r} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{L} \chi_k^2$$

## Demostración

De considerar el desarrollo de Taylor de segundo orden para la función  $h_r^s(\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})$  cuando  $\theta_1 = \theta_2$  se tiene:

$$D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 h_r^s(\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})}{\partial \theta_{1i} \partial \theta_{1j}} (\hat{\theta}_{1i} - \theta_{1i})(\hat{\theta}_{1j} - \theta_{1j}) + \mathcal{E}_n \|\hat{\theta}_1 - \theta_1\|^2$$

con  $\mathcal{E}_n \xrightarrow{P} 0$  cuando  $\hat{\theta}_1 \rightarrow \theta_1$ .

Atendiendo a que

$$\frac{\partial^2 h_r^s(\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})}{\partial \theta_{1i} \partial \theta_{1j}} = r I_{ij}^F(\theta_1)$$

obtenemos que

$$(4) \quad \frac{2nD_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)}{r} \approx \left[ \sqrt{n}(\hat{\theta}_1 - \theta_1) \right]^t I^F(\theta_1) \left[ \sqrt{n}(\hat{\theta}_1 - \theta_1) \right]$$

y por Serfling (1980, pág. 149), la forma cuadrática (4) sigue una distribución  $\chi_k^2$ . Así, el Teorema 2 queda probado. ■

De consideraciones análogas a las realizadas en los Teoremas 1 y 2, cuando  $\theta_1$  y  $\theta_2$  son desconocidas y han sido obtenidas por el método de máxima verosimilitud a partir de muestras aleatorias independientes de tamaño  $n$  y  $m$  respectivamente, se tiene:

### Teorema 3

Si  $\theta_1 \neq \theta_2$ , entonces

$$(n \cdot m)^{1/2} (D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2)) \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} N(0, mT^t I_F^{-1}(\theta_1)T + nS^t I_F^{-1}(\theta_2)S)$$

donde  $T$  es el vector definido en el teorema 1 y  $S$  es el vector de componentes

$$(5) \quad s_i = - \left( \int_{\mathfrak{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right)^{\frac{s-r}{r-1}} \int_{\mathfrak{X}} \left( \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_2}(x)} \right)^r \frac{\partial f_{\theta_2}(x)}{\partial \theta_{2i}} d\mu$$

cuando  $mT^t I_F^{-1}(\theta_1)T + nS^t I_F^{-1}(\theta_2)S \neq 0$ .

### Demostración

De considerar el desarrollo de Taylor de la función

$$(6) \quad g_r^s(\theta) = g_r^s(\theta_{11}, \dots, \theta_{1k}, \theta_{21}, \dots, \theta_{2k}) = D_r^s(\theta_1, \theta_2)$$

se tiene

$$(7) \quad D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) = D_r^s(\theta_1, \theta_2) + \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^k \frac{\partial D_r^s(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_{ji}} (\hat{\theta}_{ji} - \theta_{ji}) + \mathcal{E}_n \|\hat{\theta} - \theta\|$$

con  $\mathcal{E}_n \rightarrow 0$  cuando  $\hat{\theta} \rightarrow \theta$ .

Entonces

$$(n \cdot m)^{1/2} (D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2)) \approx m^{1/2} \sum_{i=1}^k t_i n^{1/2} (\hat{\theta}_{1i} - \theta_{1i}) + n^{1/2} \sum_{i=1}^k s_i m^{1/2} (\hat{\theta}_{2i} - \theta_{2i})$$

con  $t_i$  definido en (2) y  $s_i$  definido en (5).

Así, el resultado queda probado atendiendo a que

$$T^t n^{1/2} (\hat{\theta}_1 - \theta_1) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{L} N(0, T^t I_F^{-1}(\theta_1)T)$$

y

$$S^t m^{1/2}(\hat{\theta}_2 - \theta_2) \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{L} N(0, S^t I_F^{-1}(\theta_2) S)$$

■

Cuando  $\theta_1 = \theta_2$  el término de 1<sup>er</sup> orden del desarrollo de Taylor (6) es nulo, y en este caso, con el término de 2<sup>do</sup> orden tenemos:

#### Teorema 4

Cuando  $\theta_1 = \theta_2$  se tiene

$$\frac{2nm}{n+m} \frac{D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)}{r} \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} \chi_k^2$$

#### Demostración

Utilizando el desarrollo de Taylor de la función  $g_r^s(\theta)$  se tiene que cuando  $\theta_1 = \theta_2$

$$D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) \approx \frac{r}{2} \left( \sum_{i,j=1}^k \int \frac{1}{f_{\theta_1}(x)} \frac{\partial f_{\theta_1}(x)}{\partial \theta_{1i}} \frac{\partial f_{\theta_2}(x)}{\partial \theta_{2i}} d\mu \right) (\hat{\theta}_{1i} - \theta_{1i})$$

Así, atendiendo a que

$$\left( \frac{n \cdot m}{n+m} \right)^{1/2} (\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2) \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} N(0, I_F^{-1}(\theta_1))$$

se tiene que

$$\frac{n \cdot m}{n+m} (\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2)' I_F(\theta_1) (\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2) \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} \chi_k^2$$

y por tanto

$$\frac{2nm}{m+n} \frac{D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)}{r} \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} \chi_k^2$$

■

#### Nota 1

Los valores de  $t_i$  y  $s_i$  en el caso de  $r = 1$  se obtienen de las expresiones (2) y (5) por continuidad.

### 3. APLICACIÓN A CONTRASTES DE HIPÓTESIS

Los resultados dados en los teoremas anteriores se pueden utilizar para realizar contrastes de bondad de ajuste y homogeneidad. Así, sobre la base del Teorema 2, es posible contrastar  $H_0 : \theta = \theta_1$  frente  $H_1 : \theta \neq \theta_1$ , sin más que utilizar el estadístico

$$(8) \quad T = \frac{2nD_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_1)}{r}$$

y rechazar la hipótesis nula si  $T > \chi_{k(\alpha)}^2$ . La Potencia asintótica del test se obtiene a partir del Teorema 1 y la consistencia a partir de Fraser (1957).

El teorema 4 permite contrastar si dos muestras aleatorias simples e independientes obtenidas de las poblaciones  $f_{\theta_1}(x)$  y  $f_{\theta_2}(x)$ , son tales que  $\theta_1 = \theta_2$ . En este caso, se rechazará la hipótesis  $H_0 : \theta_1 = \theta_2$  si

$$(9) \quad T = \frac{2mn}{m+n} \frac{D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)}{r} > \chi_{k(\alpha)}^2$$

De forma análoga al caso anterior, se obtiene la potencia asintótica y la consistencia del test.

#### Nota 2

Al categorizar variables no necesariamente categóricas, es posible resolver los siguientes contrastes relativos a una o varias muestras.

- (1) Test de bondad de ajuste,  $H_0 : p = p_0$  ( $p_0$  conocida).
- (2) Test de ajuste de  $m$  poblaciones,  $H_0 : p^{(1)} = \dots = p^{(m)} = p_0$  ( $p_0$  conocida).
- (3) Test de homogeneidad de dos poblaciones,  $H_0 : p = q$ .
- (4) Test de homogeneidad de  $m$  poblaciones,  $H_0 : p^{(1)} = \dots = p^{(m)}$ .



#### 4. CASOS PARTICULARES

Al particularizar los resultados anteriores a funciones de densidad de probabilidad  $f_{\theta_1}(x)$  y  $f_{\theta_2}(x)$  siguiendo funciones de densidad de probabilidad multinomiales  $M(p_1, \dots, p_k)$  y  $M(q_1, \dots, q_k)$  se recuperan los resultados obtenidos por Menéndez y otros (1991) en los que

$$D_r^s(\theta_1, \theta_2) = (s-1)^{-1} \left[ \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^{\frac{s-1}{r-1}} - 1 \right]$$

$$t_i = \frac{r}{r-1} \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^{\frac{s-r}{r-1}} p_i^{r-1} \cdot q_i^{1-r}$$

y

$$s_i = - \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^{\frac{s-r}{r-1}} p_i^r \cdot q_i^{-r}$$

Así, la varianza en el teorema 1 es

$$\sigma^2 = \frac{r^2}{(r-1)^2} \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^{2\frac{s-r}{r-1}} \left\{ \sum_{i=1}^k p_i^{2r-1} q_i^{2(1-r)} - \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^2 \right\}$$

y la varianza en el teorema 3 es

$$\sigma^2 = \frac{1}{(r-1)^2} \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^{2\frac{s-r}{r-1}} \left\{ r^2 \sum_{i=1}^k p_i^{2r-1} q_i^{2(1-r)} + (1-r)^2 \sum_{i=1}^k p_i^{2r} q_i^{1-2r} - \right.$$

$$\left. - r^2 \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^2 - (1-r)^2 \left( \sum_{i=1}^k p_i^r q_i^{1-r} \right)^2 \right\}$$

La expresión de la  $(r, s)$ -divergencia entre distribuciones normales  $n$ -dimensionales con parámetros  $(\mu_1, \Sigma_1)$  y  $(\mu_2, \Sigma_2)$  ha sido obtenida por Pardo y otros (1990). En este sentido,

$$\begin{aligned}
D_r^s((\mu_1, \Sigma_1), (\mu_2, \Sigma_2)) &= \\
&= (s-1)^{-1} \left( \exp \left\{ \frac{r(s-1)}{2} ((\mu_1, \mu_2)^T (r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1} (\mu_1, \mu_2)) \right\} \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \frac{|r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1|^{\frac{1-s}{2(r-1)}}}{|\Sigma_1|^{\frac{s-1}{2}} |\Sigma_2|^{\frac{(1-s)r}{2(r-1)}}} - 1 \right) \quad r \pm 1, s \pm 1
\end{aligned}$$

y por continuidad

$$\begin{aligned}
D_1^s((\mu_1, \Sigma_1), (\mu_2, \Sigma_2)) &= \\
&= (s-1)^{-1} \left( \exp \left\{ \frac{(r-1)}{2} ((\mu_1, \mu_2)^T \Sigma_2^{-1} (\mu_1, \mu_2) + \text{tr}(\Sigma_2^{-1} \Sigma_1 - I)) \right\} \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \frac{|\Sigma_2|^{\frac{s-1}{2}}}{|\Sigma_1|^{\frac{s-1}{2}}} - 1 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_r^1((\mu_1, \Sigma_1), (\mu_2, \Sigma_2)) &= \frac{r}{2} ((\mu_1, \mu_2)^T (r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1} (\mu_1, \mu_2)) + \\
&\quad + \frac{1}{2(1-r)} \log \frac{|r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1|}{|\Sigma_1|^{1-r} |\Sigma_2|^r}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D((\mu_1, \Sigma_1), (\mu_2, \Sigma_2)) &= \\
&\quad \frac{1}{2} \left( (\mu_1, \mu_2)^T \Sigma_2^{-1} (\mu_1, \mu_2) + \text{tr}(\Sigma_2^{-1} \Sigma_1 - I) + \log \frac{|\Sigma_2|}{|\Sigma_1|} \right)
\end{aligned}$$

Así, sobre la base de los resultados obtenidos anteriormente para una distribución normal  $N(\mu, \Sigma)$  es posible contrastar: (1)  $H_0 : \mu = \mu_0$  con  $\Sigma$  conocida, (2)  $H_0 : \Sigma = \Sigma_0$  con  $\mu$  conocida y (3)  $H_0 : (\mu, \Sigma) = (\mu_0, \Sigma_0)$ , y para dos poblaciones normales  $N(\mu_1, \Sigma_1)$  y  $N(\mu_2, \Sigma_2)$  es posible contrastar: (1)  $H_0 : \mu_1 = \mu_2$  con  $\Sigma_1$  y  $\Sigma_2$  conocidas, (2)  $H_0 : \mu_1 = \mu_2$  con  $\Sigma_1$  y  $\Sigma_2$  desconocidas pero iguales, y (3)  $H_0 : (\mu_1, \Sigma_1) = (\mu_2, \Sigma_2)$ .

Teniendo en cuenta que:

a) Para  $\theta_1 = (\mu_{11}, \dots, \mu_{1k})$ ,

$$\begin{aligned}
t_i &= \left( D_r^s(\theta_1, \theta_2) + \frac{1}{s-1} \right) \frac{r(s-1)}{2} \left\{ \sum_{j=1}^k (r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)_{ij}^{-1} (\mu_{1j} - \mu_{2j}) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i=1}^k (r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)_{ij}^{-1} (\mu_{1i} - \mu_{2i}) \right\}
\end{aligned}$$

siendo

$$(r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1}_{ij}$$

el elemento  $ij$  de la matriz

$$(r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1}$$

$$\text{b) Para } \theta = \left( {}^1\sigma_{11}, {}^1\sigma_{12}, \dots, {}^1\sigma_{1k}, \dots, {}^1\sigma_{k1}, \dots, {}^1\sigma_{kk} \right)$$

$$\begin{aligned} t_{(i-1)k+j} = & \left( D_r^s(\theta_1, \theta_2) + \frac{1}{s-1} \right) ((\mu_1 - \mu_2)^t (l^i l^j) (\mu_1 - \mu_2)) + \\ & + (s-1)^{-1} \cdot \exp \left\{ \frac{r-1}{2} \left( (\mu_1 - \mu_2)^t (r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1} (\mu_1 - \mu_2) \right) \right\} \cdot \\ & \cdot |\Sigma_2|^{\frac{(s-1)r}{2(r-1)}} \cdot \left\{ \frac{\frac{1-s}{2(r-1)} |r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1|^{\frac{1-s}{2(r-1)}} A_{ij} |\Sigma_1|^{\frac{s-1}{2}}}{|\Sigma_1|^{s-1}} - \right. \\ & \left. - \frac{\frac{s-1}{2} |\Sigma_1|^{\frac{s-1}{2}-1} A_{ij}^* |r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1|^{\frac{1-s}{2(r-1)}}}{|\Sigma_1|^{s-1}} \right\} \end{aligned}$$

donde:

$A_{ij}$  es el adjunto del elemento  $(i, j)$  en la matriz  $r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1$

$A_{ij}^*$  es el adjunto del elemento  $(i, j)$  en la matriz  $\Sigma_1$

$l^i$  es la  $i$ -ésima columna de la matriz  $(r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1}$

$l^j$  es la  $j$ -ésima fila de la matriz  $(r\Sigma_2 + (1-r)\Sigma_1)^{-1}$

$i = 1, \dots, k, \quad j = 1, \dots, k.$

## 5. EJEMPLO

Como una aplicación de los resultados para distribuciones normales multivariantes, procederemos seguidamente al análisis de los datos presentados en Mardia, Kent y Bibby (1979, p. 121) en base a la distancia  $D_r^s((\mu, \Sigma), (\mu^*, \Sigma^*))$  con  $s = 2$  y  $r = 0.5$ . En este sentido, los datos siguientes indican la longitud de la cabeza en el primer y segundo hijo correspondiente a 25 familias.

Primer hijo: 191 195 181 183 176 208 189 197 188 192 179 183 174 190 188  
163 195 186 181 175 192 174 176 197 190.

Segundo hijo: 179 201 185 188 171 192 190 189 197 187 186 174 185 195 187  
161 183 173 182 165 185 178 176 200 187.

En primer lugar se supondrá que la matriz de varianzas covarianzas es conocida y se desea hacer un contraste de igualdad de medias:

1) Contrastar  $H_0: (\mu_1, \mu_2) = (182, 182)$ . Supuesto que

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix},$$

Puesto que  $\hat{\mu}_1 = \bar{x}_1 = 185.72$  y  $\hat{\mu}_2 = \bar{x}_2 = 183.84$ , el estadístico (8) toma el valor

$$T = \frac{2n(s-1) \left( \exp \left\{ \frac{r(s-1)}{2} \left( (\hat{\mu} - \mu_0)^t (\Sigma)^{-1} (\hat{\mu} - \mu_0) \right) \right\} - 1 \right)}{r} =$$

$$= 100 \left( \exp \left\{ 0.25 \left( (3.74, 1.84) \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 3.72 \\ 1.84 \end{pmatrix} \right) \right\} - 1 \right) = 4.39$$

Por tanto al ser  $\chi_{2,0.05}^2 = 5.99$  se acepta la hipótesis nula con una confianza del 95%.

Ahora se supondrá que  $(\mu_1, \mu_2)$  es conocido y se efectuará un contraste de igualdad de matrices de varianzas covarianzas.

2) Contrastar,  $H_0: \Sigma = \Sigma_0 = \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix}$ . Supuesto que  $\mu = (182, 182)$ .

En este caso al ser  $\mu$  conocido,  $\hat{\Sigma} = S + dd^t$  donde  $d = \bar{x} - \mu_0$  y  $S$  es la matriz de varianzas covarianzas muestral. Por tanto se tiene

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 93.481 & 66.875 \\ 66.875 & 96.775 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 13.83 & 6.84 \\ 6.84 & 3.38 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 107.31 & 73.715 \\ 73.71 & 100.110 \end{pmatrix}$$

En este caso el estadístico (8) toma el valor

$$T = 2n \frac{(s-1)^{-1}}{r} \left( \frac{\left| r\Sigma_0 + (1-r)\hat{\Sigma} \right|^{\frac{1-s}{2(r-1)}}}{\left| \Sigma_0 \right|^{\frac{s-1}{2}} \left| \hat{\Sigma} \right|^{\frac{(1-s)r}{2(r-1)}}} - 1 \right) =$$

$$= 100 \left( \frac{\left| 0.5\hat{\Sigma} + 0.5\Sigma_0 \right|}{\left| \Sigma_0 \right|^{1/2} \left| \hat{\Sigma} \right|^{1/2}} - 1 \right)$$

Ahora bien, por un lado

$$0.5\hat{\Sigma} + 0.5\Sigma_0 = \begin{pmatrix} 103.65 & 36.85 \\ 36.85 & 100.05 \end{pmatrix}$$

y por otro,  $|\hat{\Sigma}| = 5308.967$ ,  $|\Sigma_0| = 10000$  y  $|0.5\hat{\Sigma} + 0.5\Sigma_0| = 9012.725$ . Con lo cual se tiene que  $T = 23.69$ . Por otro lado  $\chi_{3,0.05}^2 = 7.82$  y en consecuencia se rechaza la hipótesis nula.

3) Finalmente, vamos a contrastar

$$H_0: \Sigma = \Sigma_0 = \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix}, \mu = (182, 182) \text{ frente} \\ H_1: \Sigma = \Sigma_0 \neq \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix}, \mu \neq (182, 182)$$

En este caso el estadístico, viene dado por

$$T_3 = \frac{2n}{(1-s)r} \left( \exp \left\{ \frac{r(s-1)}{2} \left( (\hat{\mu} - \mu_0)^t (r\Sigma_0 + (1-r)S)^{-1} (\hat{\mu} - \mu_0) \right) \right\} \cdot \frac{|rS + (1-r)\hat{\Sigma}|^{\frac{1-s}{2(r-1)}}}{|S|^{\frac{s-1}{2}} |\hat{\Sigma}|^{\frac{(1-s)r}{2(r-1)}}} - 1 \right) = \\ = 100 \left( \exp \left\{ 0.25 \left[ (3.74, 1.84) \left( \begin{pmatrix} 93.481 & 66.875 \\ 66.875 & 96.775 \end{pmatrix} 0.5 + \right. \right. \right. \right. \\ + \left. \left. \left. 0.5 \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} 3.72 \\ 1.84 \end{pmatrix} \right] \right\} \cdot \frac{\left| \begin{pmatrix} 93.481 & 66.875 \\ 66.875 & 96.775 \end{pmatrix} 0.5 + 0.5 \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix} \right|}{\left| \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix} \right|^{1/2} \left| \begin{pmatrix} 93.481 & 66.875 \\ 66.875 & 96.775 \end{pmatrix} \right|^{1/2}} - 1 \right) = 28.95$$

Por otro lado,  $\chi_{5,0.05}^2 = 11.07$  y en consecuencia se rechaza la hipótesis nula.

## 6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] **Fraser, D.A.S.** (1957). "Nonparametric Methods in Statistics", John Wiley and Sons. New York.
- [2] **Kullback, S. and Leibler, A.** (1951). "On the Information and Sufficiency", *Ann. Math. Statist.*, **22**, 79–86.
- [3] **Kupperman, M.** (1957). "Further applications of information theory to multivariate analysis and statistical inference", Ph. D. dissertation on file at the library of The George Washington University.
- [4] **Mardia, K.V.; Kent, J.T. and Bibby, J.T.** (1979). *Multivariate Analysis*. Academic Press, New York.
- [5] **Menéndez, M.L.; Morales, D.; Pardo, L. y Salicrú, M.** (1991). "Some statistical application of  $(r, s)$ –directed divergences". To appear in *Utilitas Mathematica*.
- [6] **Morales, D.; Pardo, L.; Salicrú, M. y Menéndez, M.L.** (1991). "A test of independence based on the  $(r, s)$ –directed divergence". To appear in *TamKang Journal of Mathematics*.
- [7] **Pardo, L., Pardo, J.A. y Menéndez, M.L.** (1990). "The convexity with respect to gaussian distribution of  $(r, s)$ –directed divergence". Communicated.
- [8] **Salicrú, M.; Menéndez, M.L.; Morales, D. y Pardo, L.** (1991). "Asymptotic properties of unified  $(r, s)$ –directed divergence in a stratified sampling". Communicated.
- [9] **Serfling, R.J.** (1980). "Approximation theorems of Mathematical Statistics". Wiley, New York.
- [10] **Sharma, B.D. y Mittal, D.P.** (1977). "New Non-additive Measures of Relative Information". *J. Comb. Inform. and Syst. Sci.*, **2**, 122–133.

## ENGLISH SUMMARY:

### TEST OF HYPOTHESES ON THE $(r, s)$ -DIVERGENCE: APPLICATIONS TO MULTINOMIAL AND MULTIVARIATE NORMAL DISTRIBUTIONS

Morales, D., Pardo, L., Salicrú, M. and Menéndez, M.L.

Let  $(\mathfrak{X}, \beta_{\mathfrak{X}}, P_{\theta})_{\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^k}$  be a statistical space dominated by a measure  $\mu$   $\sigma$ -finite, such that  $f_{\theta}(x) = \left(\frac{dP_{\theta}}{d\mu}\right)(x)$ . Sharma and Mittal (1977) define the  $(r, s)$ -divergence between two probability density functions  $f_{\theta_1}(x)$  and  $f_{\theta_2}(x)$  as follows

$$D_r^s(\theta_1, \theta_2) = (s-1)^{-1} \left\{ \left( \int_{\mathfrak{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu(x) \right)^{\frac{s-1}{r-1}} - 1 \right\},$$

$$r \neq 1, s \neq 1, r > 0$$

where  $\theta_1 = (\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})$  and  $\theta_2 = (\theta_{21}, \dots, \theta_{2k})$ .

When  $s \rightarrow 1$  or  $r \rightarrow 1$  it is possible to define the  $(r, s)$ -divergence by continuity. In this sense, when  $s \rightarrow 1$  the divergence given by Renyi (1961) is obtained and when  $r \rightarrow 1$  and  $s \rightarrow 1$  the divergence given by Kullback-Leibler (1951) is obtained. Under the usual regularity assumptions, the asymptotic distributions of  $D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)$  and  $D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)$  are obtained, where  $\hat{\theta}_1$  and  $\hat{\theta}_2$  are the maximum likelihood estimators of  $\theta_1$  and  $\theta_2$  based on samples of sizes  $n$  and  $m$  respectively. By using these results and those one obtained by Pardo L. *et al.* (1990), a widerange of statistical hypothesis about the mean vectors and the variance-covariance matrices of  $n$ -variate normal distributions can be tested.

First we find the asymptotic distribution of  $D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)$ , when  $\theta_2$  is known and  $\hat{\theta}_1$  is the maximum likelihood estimator of  $\theta_1$ . We have obtained the following result.

#### Theorem 1

If  $\theta_1 \neq \theta_2$ , then

$$n^{1/2} \left( D_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2) \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{L} N(0, T^t I_F^{-1}((\theta_1)T)),$$

where  $I_F(\theta_1)$  is the Fisher information matrix and  $T = (t_1, \dots, t_k)^t$  with

$$t_i = \frac{r}{r-1} \left( \int_{\mathcal{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right)^{\frac{s-1}{r-1}} \int_{\mathcal{X}} \left( \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_2}(x)} \right)^{r-1} \frac{\partial f_{\theta_1}(x)}{\partial \theta_{1i}} d\mu$$

when  $T^t I_F^{-1}(\theta_1) T > 0$ .

The result can be proved as follows. Consider the Taylor series expansion of the function

$$h_r^s(\theta_{11}, \dots, \theta_{1k}) = \frac{1}{s-1} \left( \left[ \int_{\mathcal{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right]^{\frac{s-1}{r-1}} - 1 \right)$$

at the point  $\hat{\theta}_1 = (\hat{\theta}_{11}, \dots, \hat{\theta}_{1k})$  in a neighbourhood of the point  $\theta_1 = (\theta_{11}, \dots, \theta_{1k})$ . Study the asymptotic distribution of the first order term by using the Central Limit Theorem.

When  $\theta_1 = \theta_2$ , the first order term equals to zero, so it is necessary to use the second order term and to study its asymptotic distribution. In this last case, we have obtained the following result.

### Theorem 2

If  $\theta_1 = \theta_2$ , then

$$\frac{2nD_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_2)}{r} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{L} \chi_k^2$$

When  $\theta_1$  and  $\theta_2$  are both unknown, we estimate them with maximum likelihood estimators based on independent random samples of sizes  $n$  and  $m$  respectively. Similar arguments to those given in theorems 1 and 2 yields to:

### Theorem 3

If  $\theta_1 \neq \theta_2$ , then

$$(nm)^{1/2} \left( D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) - D_r^s(\theta_1, \theta_2) \right) \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} N \left( 0, mT^t I_F^{-1}(\theta_1) T + nS^t I_F^{-1}(\theta_2) S \right),$$

where  $T$  has been defined in theorem 1 and  $S$  is a vector whose components are:

$$s_i = - \left( \int_{\mathcal{X}} f_{\theta_1}(x)^r f_{\theta_2}(x)^{1-r} d\mu \right)^{\frac{s-r}{r-1}} \int_{\mathcal{X}} \left( \frac{f_{\theta_1}(x)}{f_{\theta_2}(x)} \right)^{r-1} \frac{\partial f_{\theta_1}(x)}{\partial \theta_{2i}} d\mu$$

when  $mT^t I_F^{-1}(\theta_1) T + nS^t I_F^{-1}(\theta_2) S \neq 0$ .



**Theorem 4**

If  $\theta_1 = \theta_2$ , then

$$\frac{2nm}{n+m} \frac{D_s^r(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)}{r} \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{L} \chi_k^2$$

The previous theorems can be used to test for goodness of fit and homogeneity. Theorem 2 allows us to test  $H_0: \theta = \theta_1$  against  $H_1: \theta \not\leq \theta_1$ , by using the statistics

$$T = \frac{2nD_r^s(\hat{\theta}_1, \theta_1)}{r}$$

We reject the null hypothesis if  $T > \chi_{k(\alpha)}^2$ . The asymptotic power of this test can be obtained from theorem 1 and its consistency from Fraser (1957).

Theorem 4 allows us to test that two independent random samples from  $f_{\theta_1}(x)$  and  $f_{\theta_2}(x)$  respectively, are such that  $\theta_1 = \theta_2$ . We reject  $H_0: \theta_1 = \theta_2$  if

$$T = \frac{2mn}{m+n} \frac{D_r^s(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)}{r} > \chi_{k(\alpha)}^2.$$

Similarly its asymptotic power and consistency can be obtained.

After discretizing in different categories a random variable, the following hypotheses can be tested with one or more samples

- (1) Test for goodness of fit  $H_0: p = p_0$  ( $p_0$  known)
- (2) Test for goodness of fit of  $m$  populations  $H_0: p^{(1)} = \dots = p^{(m)} = p_0$  ( $p_0$  known)
- (3) Test for homogeneity of two populations,  $H_0: p = q$
- (4) Test for homogeneity of  $m$  populations,  $H_0: p^{(1)} = \dots = p^{(m)}$ .

When  $f_{\theta_1}(x)$  and  $f_{\theta_2}(x)$  are taken to be multinomial distributions  $\mathcal{M}(p_1, \dots, p_k)$  and  $\mathcal{M}(q_1, \dots, q_k)$ , the results of Menéndez *et al.* (1991) are obtained as particular cases.

On the other hand, when  $f_{\theta_1}(x)$  and  $f_{\theta_2}(x)$  are multivariate normal distributions, it is possible to test

- (1)  $H_0: \mu = \mu_0$  with  $\Sigma$  known,
- (2)  $H_0: \Sigma = \Sigma_0$  with  $\mu$  known

(3)  $(\mu, \Sigma) = (\mu_0, \Sigma_0)$  with  $\mu_0$  and  $\Sigma_0$  both known.

Furthermore, when dealing with two samples, the following hypotheses can also be tested:

(1)  $H_0: \mu_1 = \mu_2$  with  $\Sigma_1$  and  $\Sigma_2$  known

(2)  $H_0: (\mu_1, \Sigma_1) = (\mu_2, \Sigma_2)$ .

## UN CONTRASTE EN MODELOS DE GERMEN Y GRANO

PLAZA DELGADO, M.\* y MONTES SUAY, F.†

*El trabajo presenta un test de Montecarlo, basado en el área comprendida en un intervalo entre las curvas de dilatación y erosión, para contrastar el modelo booleano frente a otros modelos de germen y grano con modelos de gérmenes de tipo de agrupación o repulsión pero manteniendo la distribución del grano.*

**A Test in Germ-Grain Models.**

**Keywords:** Inference on Boolean models, germ-grain models.

### 1. MODELO BOOLEANO Y ALTERNATIVAS

El modelo booleano es un conjunto aleatorio que se inscribe en el contexto más general de lo que Hanisch (1981) denomina modelos de germen y grano. Un modelo de germen y grano en  $\mathbb{R}^2$  es un conjunto aleatorio cerrado  $X$  de la forma

$$X = \bigcup_{n=1}^{+\infty} (x_n + X_n)$$

---

\* PLAZA DELGADO, M.: Universidad de Castilla-La Mancha.

† MONTES SUAY, F.: Universitat de València.

—Article rebut el maig de 1992.

—Acceptat l'octubre de 1992.

siendo  $\{x_i\}$  un proceso puntual y  $\{X_i\}$  una sucesión de compactos ambos en  $\mathbb{R}^2$ .

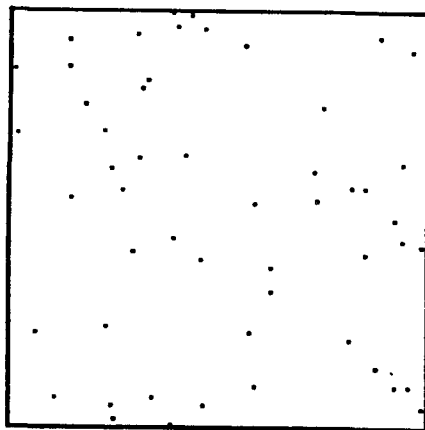
Un modelo booleano  $X = (X_0, \lambda)$  es un modelo de germen y grano donde  $\Phi = \{x_1, x_2, \dots\}$  es un proceso puntual de Poisson estacionario de intensidad  $\lambda$ , y  $\{X_1, X_2, \dots\}$  es una sucesión de compactos idéntica e independientemente distribuidos como  $X_0$ , independientes de  $\Phi$ , y tales que  $E(\nu_2(X_0 \oplus \check{K})) < +\infty$  para todo compacto  $K$ . Se indica por  $\check{K}$  el conjunto simétrico de  $K$  respecto del origen, y por  $\nu_2$  la medida de Lebesgue en  $\mathbb{R}^2$ .

Las razones del amplio uso que se ha hecho, y que se hace, del modelo booleano son su flexibilidad, sencillez, manejabilidad en cuanto a la expresión de sus características básicas, y utilidad tanto para describir imágenes bifásicas como, a veces, explicar su génesis (Stoyan, Kendall y Mecke, 1987, pág. 68).

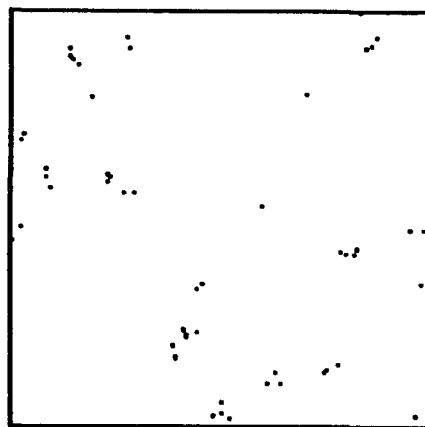
El contraste sobre una imagen bifásica de un modelo booleano depende de las alternativas que se consideren: otros valores de los parámetros sin alterar las familias de distribución del germen y del grano, la distribución de los gérmenes sin cambiar las demás características, la distribución de los granos, etc. Pero las alternativas más naturales, y también las más sencillas, al modelo booleano se derivan de alterar las hipótesis relativas al proceso de gérmenes asociado, manteniendo idénticas todas las demás características del modelo. No obstante, el problema de contraste que origina dicho cambio no puede tratarse como un problema típico de modelo en procesos puntuales, ya que el proceso de los gérmenes  $x_i$  estará oculto, en las imágenes bifásicas, por los granos  $X_i$  que se “apoyan” en ellos.

Nos proponemos en este artículo construir un procedimiento de contraste para el modelo booleano que nos permita obtener cierta orientación alternativa respecto de la regularidad del proceso puntual de los gérmenes en un modelo de germen y grano. Para ello, por sencillez y flexibilidad, hemos tomado como alternativas modelos de agregación y de repulsión, también llamados respectivamente cluster de Poisson y hard-core (Mattern 1960, Stoyan, Kendall y Mecke, 1985). En un proceso puntual de agregación el centro de los grupos de puntos sigue un proceso puntual de Poisson con intensidad  $\lambda$ ; el número de puntos en cada grupo sigue una distribución de Poisson de media  $\mu$ , y están distribuidos uniformemente en una bola de radio  $R$  con centro en el centro del grupo. En el proceso puntual de repulsión elegido como alternativa se parte de un proceso puntual de Poisson de intensidad  $\lambda$ , del que se suprimen ordenadamente los puntos que distan menos que  $h$  de alguno de los anteriores no rechazado. Las figuras siguientes son simulaciones en el cuadrado unidad de un proceso puntual estacionario de Poisson con  $\lambda = 50$ ; de un proceso puntual de agregación con

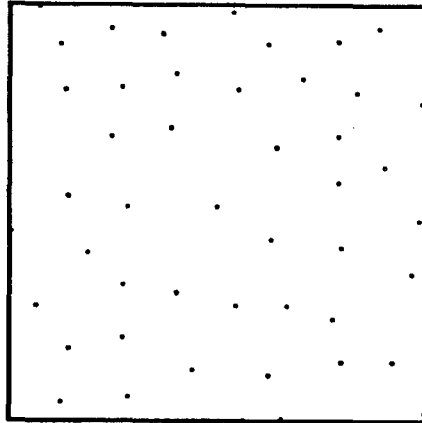
$\lambda = 25, \mu = 2$  y  $R = 0.025$ , figura 2; y un proceso puntual de repulsión con  $\lambda = 200$  y  $h = 0.1$  en la figura 3.



**Figura 1.**  
Realización de un proceso de Poisson con  $\lambda = 50$ .



**Figura 2.**  
Realización de un proceso puntual de agrupación con  $\lambda = 25$  y  $\mu = 2$ .



**Figura 3.**

Realización de un proceso puntual de repulsión con  $\lambda = 200$  y  $h = 0.1$ .

## 2. ESTIMACIÓN Y CONTRASTE EN MODELOS BOOLEANOS

Los problemas generales asociados al uso de los modelos estadísticos son la estimación de los parámetros y el contraste del modelo. Para la estimación paramétrica en modelos booleanos en el plano, esencialmente modelos de bolas, se dispone fundamentalmente de los métodos propuestos en Dupač (1980), Serra (1982), Kellerer (1985) y Ayala, Ferrándiz y Montes (1989b).

Los principales métodos de contraste para este tipo de modelos booleanos planos son los que se recogen a continuación:

- a) En Diggle (1981) se utiliza la función de distribución de contacto esférico teórica,  $H_S(x)$ , y la estimada sobre una figura objeto de estudio  $\hat{H}_S(x)$  para calcular

$$T_0 = \int_0^a \left( H_S(x) - \hat{H}_S(x) \right)^2 dx$$

con el fin de determinar el rango de  $T_0$  entre 99 valores análogos relativos a otras tantas simulaciones realizadas según el modelo que se quiere contrastar. La distribución de contacto esférico de un conjunto aleatorio  $X$  es la función de distribución de la distancia de un punto elegido al azar de fuera de  $X$  al punto más próximo de  $X$ . En general, para cada elemento estructurante  $B$ , un compacto que contenga al origen, la distribución de contacto se define como:

$$H_B(r) = 1 - \frac{P(X \cap rB = \emptyset, o \notin X)}{(1-p)} \quad \text{para } r \geq 0$$

con  $p$  la fracción de volumen de  $X$ . Para la distribución de contacto esférico  $B$  es la bola unidad.

- b) En Serra (1982) se propone o bien considerar la función  $g(x) = -\log(1 - \hat{H}_S(x))$ , o bien  $h(x) = -\log(\hat{Q}(xS_0))$ , donde  $\hat{Q}(xS_0)$  es el estimador de la probabilidad de que el conjunto  $xS_0$  esté en el poro, y tratar de comparar la una ó la otra, con la forma de un polinomio cuadrático, que es la clase de función que les correspondería a  $g$  o a  $h$  en un modelo booleano. En Hall (1988) se apuntan para el método que utiliza  $h(x)$  las dificultades de que se desconoce la varianza de  $\hat{Q}(xS_0)$ , de que existen altas correlaciones entre los valores estimados en una misma imagen de  $\hat{Q}(xS_0)$  para distintos valores de  $x$ , y de que  $h(x)$  no depende de la distribución del grano sino sólo a través de su área y de su perímetro medios.
- c) En Ripley (1986, 1988) se sugiere la utilización de un método de contraste, que se aplica a la imagen del brezo de Diggle (1981), consistente en comparar la figura que componen las curvas de dilatación, erosión, apertura y clausura estimadas sobre la imagen observada con la figura que componen las mismas curvas estimadas sobre una realización simulada según los parámetros estimados sobre la imagen a estudiar.

El estudio de estos métodos sugiere las siguientes consideraciones:

- a) la estrecha relación entre los métodos de estimación y contraste,
- b) los contrastes presentados son prácticamente visuales, excepto en Diggle (1981) que se da un resultado cuantificado en términos de rango,
- c) ninguno de los métodos da una orientación sobre el sentido de la modificación del modelo cuando éste sea inadecuado a la imagen observada.

A la vista de estas consideraciones la motivación de nuestro trabajo es el interés por obtener un contraste cuantificado que además pudiera sugerir el sentido de la alteración más conveniente en las características del proceso de los gérmenes de un modelo para mejorar la adecuación a una figura real dada.

### 3. EL CONTRASTE DEL ÁREA ENTRE LAS CURVAS DE DILATACIÓN Y EROSIÓN

En Ripley (1988) se utilizan las funciones de dilatación, clausura, apertura y erosión para mostrar de manera visual la falta de adecuación entre la imagen del brezo de Diggle y una realización simulada según los parámetros estimados del modelo correspondiente. Este procedimiento puede usarse para distinguir entre realizaciones de un modelo booleano y de ejemplos de las alternativas antes consideradas. Esto es lo que ocurre en efecto con las realizaciones siguientes que pertenecen respectivamente a un modelo booleano con  $\lambda = 100$  y grano circular de radio uniforme en  $[0, 0.1]$  (figura 4), a un modelo de germen y grano donde los gérmenes forman un proceso puntual de agregación de parámetros  $\lambda = 46, \mu = 3$  y  $R = 0.1$ , y la misma distribución de grano (figura 5), y a un modelo de germen y grano con el proceso puntual de los gérmenes de repulsión con  $\lambda = 320$ , y  $h = 0.085$ , y una distribución de grano igual a las anteriores (figura 6).

En efecto, a estas figuras corresponde una fracción de vacío aproximada de 0.40 y los patrones de regularidad que en el apartado anterior observábamos en los distintos procesos considerados se manifiestan en estas figuras en la desigual distribución de zonas blancas y negras. Este comportamiento diferencial

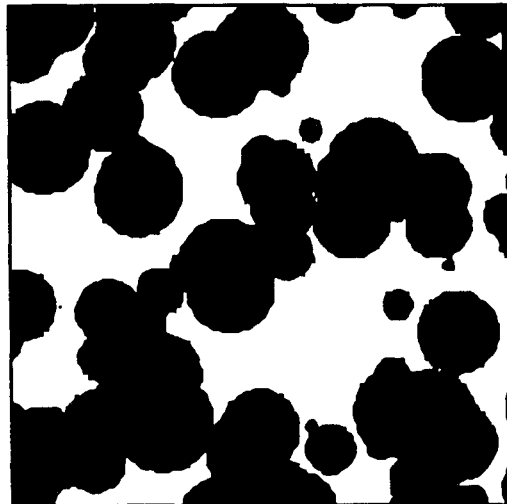
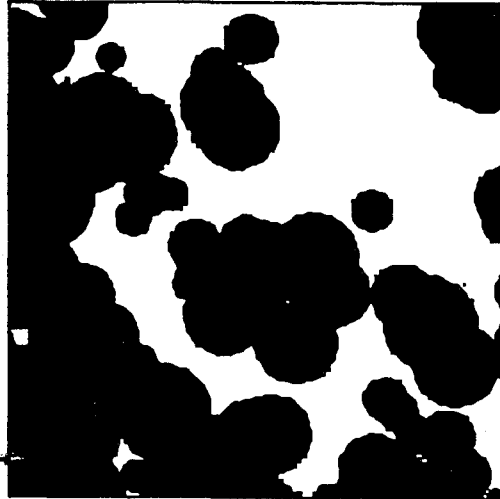


Figura 4.

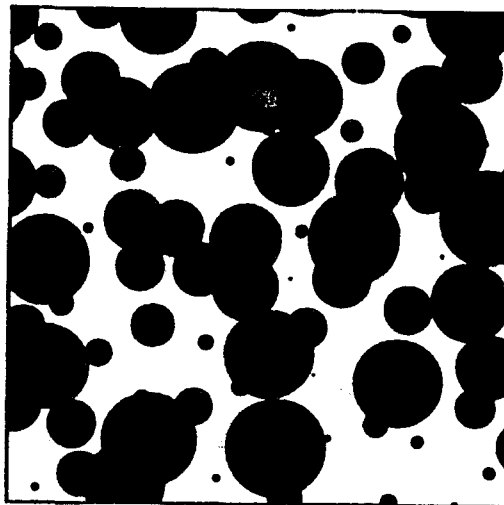
Modelo Booleano con  $\lambda = 100$  y grano circular de radio uniforme en el intervalo  $[0, 0.1]$ .





**Figura 5.**

Modelo de germen-grano con germen un proceso de agrupación con  $\lambda = 46$  y  $\mu = 3$ , y grano circular de radio uniforme en el intervalo  $[0, 0.1]$ .



**Figura 6.**

Modelo de germen-grano con germen un proceso de repulsión con  $\lambda = 320$ ,  $h = 0.085$  y grano circular de radio uniforme en el intervalo  $[0, 0.1]$ .

queda también reflejado en la representación de los funcionales resumen, a saber, dilatación, clausura, apertura y erosión:  $d_B(x)$ ,  $c_B(x)$ ,  $o_B(x)$  y  $e_B(x)$  de las figuras 4, 5 y 6 que son respectivamente las figuras 7, 8 y 9, donde se toma como  $B$  el hexágono elemental de la trama de digitalización, y  $x$  es un número natural. Estos funcionales se estiman respectivamente por:

$$\begin{aligned} d_B(x) &= \text{fra vol}(X \oplus x\check{B}) \\ c_B(x) &= \text{fra vol}((X \oplus x\check{B}) \ominus xB) \\ o_B(x) &= \text{fra vol}((X \ominus x\check{B}) \oplus xB) \\ e_B(x) &= \text{fra vol}(X \ominus x\check{B}) \end{aligned}$$

Definiendo como es usual

$$\begin{aligned} A \oplus B &= \{x + y: x \in A, y \in B\} = \bigcup_{y \in B} A_y = \bigcup_{x \in A} B_x \\ A \ominus B &= \bigcap_{y \in B} A_y = (A^C \oplus B)^C \end{aligned}$$

El diferente comportamiento de los distintos modelos en cuanto a la rapidez de alcanzar sus valores extremos, sugiere que las variables que se recogen en la tabla 1, derivadas todas ellas de los funcionales resumen de Ripley, pueden servir de punto de partida en el problema de diseñar un contraste que permita distinguir entre los comportamientos de los modelos propuestos.

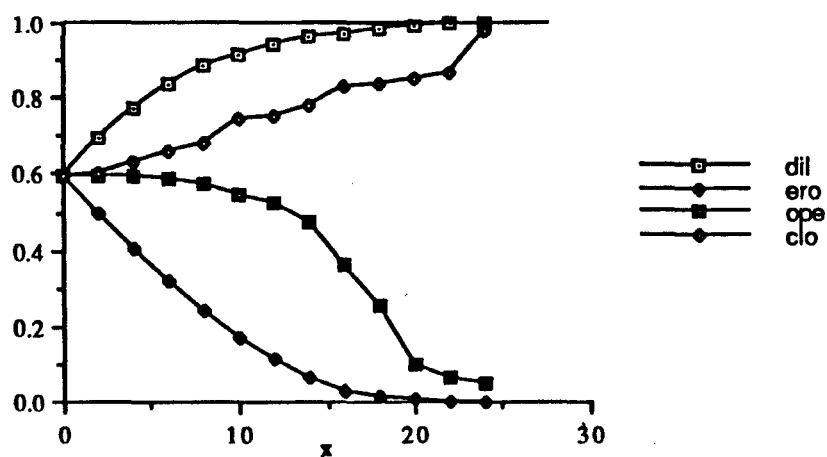
**Tabla 1**

Variable	Significado de la variable
$a1$	área entre las curvas $d_B(r)$ y $c_B(r)$
$a2$	área entre las curvas $o_B(r)$ y $e_B(r)$
$a3$	área entre las curvas $d_B(r)$ y $e_B(r)$
$dl99$	menor valor de $r$ tal que $d_B(r) \geq 0.99$
$cl99$	menor valor de $r$ tal que $c_B(r) \geq 0.99$
$dl95$	menor valor de $r$ tal que $d_B(r) \geq 0.95$
$cl95$	menor valor de $r$ tal que $c_B(r) \geq 0.95$
$er01$	menor valor de $r$ tal que $e_B(r) \leq 0.01$
$op01$	menor valor de $r$ tal que $o_B(r) \leq 0.01$
$er05$	menor valor de $r$ tal que $e_B(r) \leq 0.05$
$op05$	menor valor de $r$ tal que $o_B(r) \leq 0.05$

En Plaza (1991) se realiza un estudio exhaustivo de la capacidad que estas variables tienen para discriminar entre los tres modelos, utilizando para ello 50 realizaciones aleatorias de cada uno de los modelos que dan lugar a las figuras 4, 5 y 6. El análisis discriminante mostró que la variable  $\alpha_3$ , área comprendida en un intervalo entre las curvas de dilatación y erosión, presentaba por si sola una capacidad discriminante similar al conjunto de las 11. La tabla 2 pone de manifiesto este hecho.

**Tabla 2**

grupo	casos	clasificación con las 11 var			clasificación con $\alpha_3$		
		MB	Cluster	Hard	MB	Cluster	Hard
MB	50	42 84%	1 2%	7 14%	38 76%	2 4%	10 20%
Cluster	50	6 12%	44 88%	0 0%	8 16%	42 84%	0 0%
Hard	50	3 6%	0 0%	47 94%	6 12%	0 0%	44 88%
Bien clasificados		88.67%			82.67%		



**Figura 7.**

Representación de los funcionales resumen correspondientes a la figura 4.

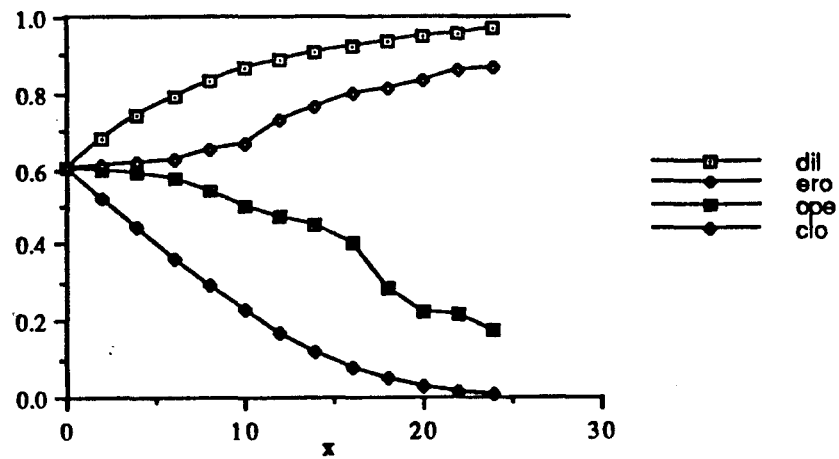


Figura 8.

Representación de los funcionales resumen correspondientes a la figura 5.

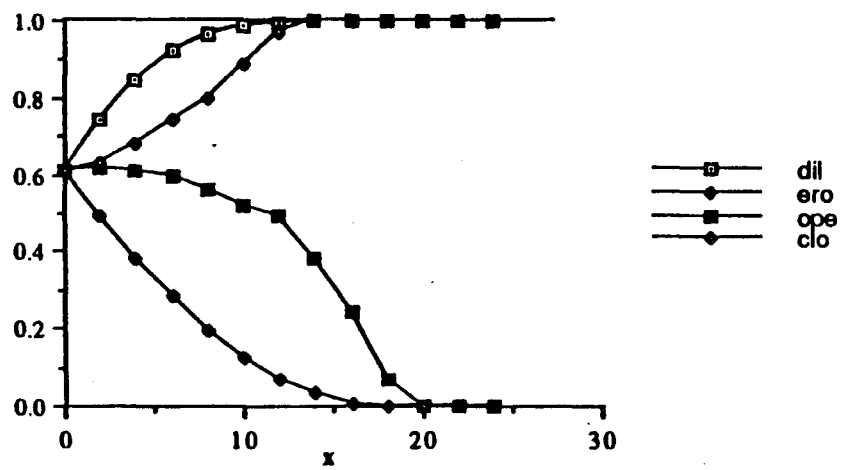


Figura 9.

Representación de los funcionales resumen correspondientes a la figura 6.

Estos resultados nos llevan a la construcción de un test de Montecarlo basado exclusivamente en la variable  $a_3$  para contrastar las hipótesis de que las figuras 4 y 5 corresponden a modelos booleanos. En un test de Montecarlo se trata de comparar el valor de una característica de un objeto real con la misma característica medida sobre realizaciones de dicho objeto simuladas según la hipótesis. Si el valor de la característica medida en el objeto real es muy extremo con respecto a los obtenidos por simulación, ello proporciona evidencia en contra de la hipótesis que se quiere contrastar. El funcionamiento del contraste lo probamos como sigue:

- a) Si la figura 5 correspondiera a un modelo booleano con grano circular de radio uniforme en  $[0, 0.1]$ , de la expresión  $\text{Prob}\{0 \in X\} = \exp\{-\lambda E\nu_2(X)\}$  se obtendría un valor de  $\lambda$  por la estimación de la fracción de vacío  $1 - p = 0.390$ . Resulta  $\lambda = 89.92$ . Y se puede comparar el área entre las curvas de dilatación y de erosión de la figura 8, que es 15.33, con el área entre las curvas estimadas sobre 50 realizaciones simuladas de un modelo booleano con las características que corresponderían a la figura 5 de serlo. El resultado obtenido es que los 50 valores así calculados están en el intervalo  $[16.38, 18.40]$ .
- b) En la figura 6 puede razonarse de manera análoga obteniéndose  $1 - p = 0.409$  y  $\lambda = 85.37$ . El área correspondiente entre las curvas de dilatación y de erosión, que están en la figura 9, es 18.73. Y las áreas correspondientes a 50 realizaciones simuladas de un modelo booleano con  $\lambda = 85.37$  y grano circular de radio uniforme en  $[0, 0.1]$  están en el intervalo  $[16.30, 18.40]$ .

Obsérvese que para las cien simulaciones de los dos modelos booleanos, cincuenta de cada uno, que nos han servido para comparar las áreas entre las curvas de dilatación y erosión, y que corresponden a dos modelos booleanos muy parecidos, ninguna de ellas ha dado valores del estadístico de contraste fuera del intervalo (15.33, 18.73).

#### 4. UN EJEMPLO REAL DE APLICACIÓN

La figura 10 está tomada de Margalef (1974, pág. 849). Corresponde a un esquema de 'brousse tigrée' tomado de una fotografía aérea sobre  $13^\circ 6'N$ ,  $10^\circ E$  en los bordes de un escudo laterítico; la parte negra corresponde a vegetación arborescente con *Combretum*.

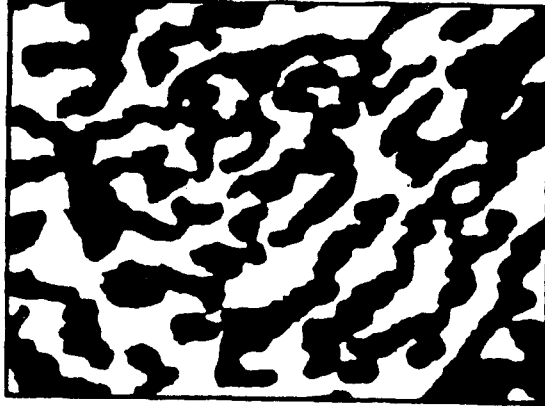


Figura 10.

Esquema correspondiente a una vegetación arborescente con Combretum (tomado de Margalef, 1974).

Sobre ella, tras ser digitalizada, se realizó el proceso de estimación paramétrica con el método de las dilataciones de Ayala, Ferrándiz y Montes (1989a). En este método se obtienen los valores de  $\lambda$ ,  $a$  área media del grano y  $s$  perímetro medio de  $X_0$  de las ecuaciones:

$$\begin{aligned} P(x_j \in X^C) &= p_0 = \exp\{-\lambda a\} \\ P(x_j \in (X \oplus \check{T}_1)^C) &= p_1 = \exp\left\{-\lambda \left(a + \frac{st}{\pi}\right)\right\} \\ P(x_j \in (X \oplus \check{T}_2)^C) &= p_2 = \exp\left\{-\lambda \left(a + \frac{s}{2\pi} U(T_2) + \nu_2(T_2)\right)\right\} \end{aligned}$$

donde  $T_1$  es un segmento de longitud  $t$ , y  $T_2$  un compacto con  $U(T_2)$  de perímetro y  $A(T_2)$  de área.

En Plaza (1991) está la justificación de la versión digitalizada de este método, cuyas fórmulas para trama de digitalización hexagonal son:

$$\begin{aligned} P(x_j \in X^C) &= p_0 = \exp\{-\lambda f_a \mathbb{E}(\hat{A}(X_0))\} \\ P(x_j \in (X \oplus iL)^C) &= p_1 = \exp\left\{-\lambda f_a \left(\mathbb{E}(\hat{A}(X_0)) + \frac{\mathbb{E}(\hat{U}(X_0)) + 3}{3} i\right)\right\} \\ P(x_j \in (X \oplus iH)^C) &= p_2 = \exp\left\{-\lambda f_a (\mathbb{E}(\hat{A}(X_0)) + (\mathbb{E}(\hat{U}(X_0)) + 3)i + 3i^2)\right\} \end{aligned}$$

con  $\hat{U}$  y  $\hat{A}$  los perímetros y áreas digitales,  $f_a = \sqrt{3/2}a_k^2 = 1.526\text{E-}5$  el factor del área. Expresiones éstas basadas en las fórmulas para las áreas de las dilataciones de un conjunto convexo mediante un múltiplo del elemento estructural  $H$  de la trama de digitalización hexagonal, y en la definición de perímetro entero para grano en el anillo convexo  $S(H)$ , uniones finitas de conjuntos convexos para la trama hexagonal con número de conectividad igual a 1.

Para  $i = 5$  se obtienen los valores  $p_0 = 0.4309$ ,  $p_1 = 0.2934$  y  $p_2 = 0.0930$ , que conducen a las estimaciones  $\lambda = 332.6$ ,  $a = 2.531\text{E-}3$  y  $s = 1.729\text{E-}1$ . Si por sencillez suponemos que la distribución del radio del grano es uniforme, entonces se obtiene que su intervalo de distribución es  $[1.547\text{E-}2, 3.957\text{E-}2]$ . Con esos parámetros se pueden obtener 19 realizaciones simuladas de este modelo con fracciones de vacío en el intervalo  $0.569 \pm 0.025$ . Tras digitalizarlas y calcular las curvas de dilatación y erosión, se tiene que los 19 valores correspondientes al estadístico de contraste están en el intervalo  $(8.50, 8.89)$ , y el correspondiente a la imagen de la figura 10 es 8.48.

Este resultado apuntaría a una tendencia hacia un modelo de agrupación en el proceso puntual de los gérmenes.

El diseño del contraste basado en el estadístico propuesto, área en un intervalo entre las curvas de dilatación y erosión, está pensado para detectar alteraciones en la distribución del proceso de Poisson de los gérmenes, permaneciendo idéntico todo lo demás. Desde el punto de vista teórico es interesante estudiar la robustez de este estadístico frente a cambios de la forma y la distribución del tamaño de los granos, o incluso de la forma del elemento estructurante  $B$  utilizado en las operaciones morfológicas. En este trabajo el objetivo principal es presentar un contraste que supone, en nuestra opinión, una cierta mejora en los sentidos apuntados respecto de los contrastes propuestos hasta ahora, y que presenta gran aplicabilidad en la práctica.

## 5. AGRADECIMIENTOS

La precisión de muchos de los aspectos de interés que puedan contenerse en este artículo se deben a la benevolencia y al buen criterio del desconocido referee al que no podemos dejar de expresar nuestro más sincero reconocimiento.

## 6. REFERENCIAS

- [1] **Ayala, G., Ferrándiz, J. y Montes, F.** (1989a). "Two Methods of Estimation in Boolean Models". *Acta Stereol.*, **8/2**, 629–634.
- [2] **Ayala, G., Ferrándiz, J. y Montes, F.** (1989b). "On Parametric Estimation in Boolean Models". 5th International Workshop on Stereology, Stochastic & Image Analysis. CWI. Amsterdam. Pendiente de publicar en *Ressegna di Metodi Statistici ed Applicazione*.
- [3] **Diggle, P.J.** (1981). "Binary mosaics and the spatial pattern of heather". *Biometrics*, **37**, 531–539.
- [4] **Dupač, V.** (1980). "Parameter estimation in the Poisson field of discs". *Biometrics*, **67**, 187–190.
- [5] **Hall, P.** (1988). *Introduction to theory of coverage Processes*. Wiley. New York.
- [6] **Hanisch, K.H.** (1981). "On classes of random sets and point processes". *Serdica*, **7**, 160–166.
- [7] **Kellerer, A.M.** (1985). "Counting figures in planar random configurations". *Jour. Appl. Probl.*, **22**, 68–81.
- [8] **Margalef, R.** (1974). *Ecología*. Omega. Barcelona.
- [9] **Mattern, B.** (1986). *Springer Lecture Notes Statist.* **36** (2 ed.), Springer-Verlag, New York.
- [10] **Plaza, M.** (1991). "Contrastes en modelos de germen y grano". Tesis Doctoral. Valencia.
- [11] **Ripley, B.D.** (1986). "Statistics, images and pattern recognition". *The Canadian Jour. of Statist.*, Vol. 14, **2**, 83–111.
- [12] **Ripley, B.D.** (1988). *Spatial Inference for Spatial Processes*. Cambridge University Press.
- [13] **Serra, J.** (1982). *Image Analysis and Mathematical Morphology*. Academic Press. London.
- [14] **Stoyan, D., Kendall, W.S. y Mecke, J.** (1987). *Stochastic Geometry and its Applications*. Wiley. Chichester.



## ENGLISH SUMMARY:

### A TEST IN GERM-GRAIN MODELS

Plaza, M. and Montes, F.

#### 1. BOOLEAN MODEL AND ALTERNATIVES

The Boolean model is a random set that can be considered as a particular case of those models called by Hanisch (1981) germ-grain models. These models, in  $\mathbb{R}^2$ , are random closed sets defined by

$$X = \bigcup_{n \geq 1} (x_n + X_n),$$

where  $\Phi = \{x_n\}$  is a point process and  $\{X_n\}$  is a sequence of compact sets, both in  $\mathbb{R}^2$ . For the Boolean model,  $X = (X_0, \lambda)$ ,  $\Phi$  is a Poisson process with parameter  $\lambda$ , and the compact sets,  $\{X_n\}$ , are i.i.d. as  $X_0$  verifying  $E[\nu_2(X_0 \oplus \check{K})] < +\infty$  for all compact  $K$ , where  $\nu_2$  stands for Lebesgue measure in  $\mathbb{R}^2$ .

The aim of the paper is to derive a test procedure for the Boolean model that detects the deviation of the model towards its natural alternatives: the hard-core model (with a hard-core process as germs) and the cluster model (with a Poisson cluster process as germss).

#### 2. ESTIMATION AND TEST IN BOOLEAN MODELS

A large part of literature on *parametric estimation* for Boolean models is devoted to ball models in  $\mathbb{R}^2$ : Dupač (1980), Serra (1982), Kellerer (1985) y Ayala, Ferrándiz and Montes (1989b).

The most interesting *testing methods* for bidimensional models have been proposed by

- (1) Diggle (1981): he uses the theoretical first contact distribution function,  $H_S(x)$ , and the estimated from a simulated Boolean model with the same

probabilistic characteristics,  $\check{H}_S(x)$ , in a Montecarlo test based on the rank of  $T_0 = \int_0^a \left( H_S(x) - \check{H}_S(x) \right)^2 dx$ .

- (2) Serra (1982): he proposes to compare the experimental functions  $g(x) = -\log(1 - \check{H}_S(x))$  or  $h(x) = -\log \left( \hat{Q}(xS_0) \right)$ , where  $\hat{Q}(xS_0) = \mathcal{P}(xS_0 \subset X^c)$ , with a quadratic polynomial, its theoretical counterpart in the case of a Boolean model. The method was improved by Hall (1988).
- (3) Ripley (1986, 1988). He suggests a test method based on the joint graph of the dilation, erosion, opening and closing curves for the observed and simulated images.

A detailed examination of these methods allows us to point out that:

- (1) estimation and test methods are very related,
- (2) all of them, except Diggle's methods, are visual,
- (3) they give no orientation about the direction of the deviation when the Boolean hypothesis is rejected.

### 3. A TEST BASED ON THE AREA BETWEEN THE DILATION AND EROSION CURVES

From realizations of a Boolean model (fig. 4) and two germ-grains models with the same grain distribution as that but different germ processes, a cluster Poisson process (fig. 5) and a hard-core process (fig. 6), and all of them with similar volume fraction, we estimate the dilation, erosion, opening and closing curves by means of

$$\begin{aligned}
 \text{dilation } d_B(x) &= \text{vol frac}(X \oplus x\check{B}) \\
 \text{closing } c_B(x) &= \text{vol frac}((X \oplus x\check{B}) \ominus xB) \\
 \text{opening } o_B(x) &= \text{vol frac}((X \ominus x\check{B}) \oplus xB) \\
 \text{erosion } e_B(x) &= \text{vol frac}(X \ominus x\check{B})
 \end{aligned}$$

The figs. 7, 8 and 9 show the joint graphs of these curves for the three models and following Ripley's suggestion some parameters, listed in table 1, are derived. An

exhaustive study about its capability for discriminating among the three models can be found in Plaza (1991). The study concludes, see table 2, that the *area between the dilation and erosion curves*, in a fixed interval, can be used alone for this purpose and a Montecarlo test based on it is derived.

#### 4. APPLICATION TO A REAL EXAMPLE

Fig. 10 shows an aerial photograph, taken from Margalef (1974, pag. 849), where the black part is an arborescent vegetation called *combretum*. In order to describe it by means of a Boolean model, we digitalize the image and the dilations method proposed by Ayala, Ferrándiz and Montes (1989a) furnish us estimations for  $\lambda$ ,  $a$ , the mean area of  $X_0$ , and  $s$ , the mean perimeter of  $X_0$ . In this case  $\lambda = 332.6$ ,  $a = 2.531\text{E-}3$  y  $s = 1.729\text{E-}1$ . These values are used to simulate 19 realizations of the corresponding Boolean model and on each the are between dilation and erosion curves is calculated being 8.50 and 8.89 the extreme values. For our image in fig. 10 this value is 8.48, the smallest one, suggesting a clusterization in the germ process as an alternative to the rejected Boolean model.



## QUANTILE PLOTS IN THE ANALYSIS OF HETEROSCEDASTIC MODELS

M. PEPIÓ and C. POLO

Laboratorio de Estadística

E.T.S.E.I.T. – U.P.C.

*Recent developments in quality engineering methods have led to considerable interest in the analysis of variance, building a dispersion model, identifying important effects from replicated experiments and checking for significance by means of a half-normal plot. A methodology based on a chi-squared quantile plot is presented here for checking first the presence of heteroscedasticity, outliers and other data peculiarities, and after the estimation stage a new stepwise procedure tests for significant effects.*

**Quantile Plots in the Analysis of Heteroscedastic Models.**

**Keywords:** Chi-squared Plot; Dispersion Model; Stepwise Test.

### 1. INTRODUCTION

In the process of ascertaining the functional relationship amongst the observed response and the experimental factors, two points are to be considered.

---

–Article rebut el juliol de 1991.

–Acceptat el novembre de 1992.

On the one hand, to include in the model all knowledge anticipated by the physical nature of the phenomena under analysis and, on the other hand, to look graphically into the data to reveal specific shapes to modelize the response. From a data analytic viewpoint, one would like to have procedures which use some sort of statistical model for aiding the process of making inferences, while at the same time not requiring a commitment on any narrow specification of objectives, including the unquestioned acceptance of all the assumptions made in the model. Thus the techniques should have value not only for identifying possibly real effects but also for indicating the presence of outliers, heteroscedasticity and other peculiarities which are often assumed to be non-existent by the formal model.

## 2. QUANTILE PLOTS

Quantile plots [2, 3, 4] are general purpose displays that portray many distributional features of a set of data. Quantile plots not only are useful for graphically describing the distribution of a set of data values, but they can also be used to assess the fidelity of a set of data to a hypothesized probability distribution.

For many analyses the calculation and plotting of quantiles will suffice to enable an experimenter to discover most of the salient distributional features of a data set. This technique allows an analyst to see more complex variations in the data than those that are provided by simple summary statistics. The entire range of the distribution can be examined, and subtle shifts in shape, location and spread are easily detectable by departures from linearity, zero intercept and unit slope.

The most widely used quantile plot is likely the Normal Probability Plot, comparing the empirical distribution function of a set of data with the Normal distribution function. Be  $y_{(1)} \leq \dots \leq y_{(n)}$  the ordered observations,  $p_i$  a cumulative proportion associated with the  $i$ -th ordered observation —  $(i - 0.5)/n$  and  $i/(n + 1)$  are very common — and  $q(p_i)$  the standard normal quantile, the Normal Probability Plot is a plot of the points  $\{y_{(i)}, q(p_i)\}$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

### 3. QUANTILE PLOT FOR VARIABILITY

Common variance is a standard assumption in many statistical analysis (Linear Model, Anova, etc.) checked afterwards by means of a plot of residuals versus the predicted values. Nevertheless, if there are  $r$  replications within each cell of a multiway cross-classification or within each treatment of an  $n = 2^k$ , possibly fractional, factorial experiment, then the analysis leads to  $n$  sums of squared derivations from the within-replication mean,  $s_1^2, \dots, s_n^2$ , each with  $\nu = r - 1$  degrees of freedom.

Given the assumption of normality and no correlation, to test the homoscedasticity and assess the relative magnitudes of  $s_1^2, \dots, s_n^2$ , these once divided by the unknown variance can be considered as a random sample from a central chi-squared distribution, and the appropriate quantile plot is thus a plot of the ordered values  $s_{(1)}^2 \leq \dots \leq s_{(n)}^2$ , against the quantiles of a  $\chi^2$  distribution with  $r - 1$  degrees of freedom. If all observations have the same variance the plot configuration would be linear with zero intercept and the slope would be an estimate of the common variance. But if the configuration is suggestive of two or more straight lines a reasonable interpretation would be that the treatments or cells belonging to the same linear piece have an underlying common variance but those that belong to two different pieces do not share a common variance.

### 4. DISPERSION MODEL

If lack of homoscedasticity is detected a commonly used method for identifying important dispersion effects from replicated experiments is based on a least squares analysis of the logarithm of the within-replication variance [1].

Let  $Y_{ij} (i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, r)$  be the responses of  $r$  replications of an  $n = 2^k$  factorial experiment. The data are supposed to follow a location-dispersion model

$$(1) \quad Y_{ij} = m_i + \sigma_i \varepsilon_{ij}$$

where the  $\varepsilon_{ij}$  random values are independent, normally distributed, with zero mean and unit variance. A model [5, 7] relates the variances  $\sigma_i^2$  to the dispersion effects  $\theta_k$  by means of

$$(2) \quad h(\sigma^2) = A\theta$$

where  $\sigma^2$  is the vector of variances,  $\theta$  the vector of unknown parameters,  $\mathbf{A}$  denotes the regression matrix associated with the design and  $\mathbf{a}_i$  will be used to denote the  $i$ th row of  $\mathbf{A}$ . For inference about the dispersion effects we use the sums of squared deviations from the within-replications mean  $\bar{Y}_{i.}$ ,

$$(3) \quad S_i = \sum_{j=1}^r (Y_{ij} - \bar{Y}_{i.})^2 \quad i = 1, \dots, n$$

and then  $S_i/\sigma_i^2 = u_i$  is distributed  $\chi^2$  with  $\nu = r - 1$  degrees of freedom. Thus, in order to have an additive model, we take logarithms ( $h(\bullet) \equiv \ln$ ), getting

$$\ln S_i = \ln \sigma_i^2 + \ln u_i = \mathbf{a}_i \theta + \ln u_i$$

where the random component  $\ln u_i$  is  $\ln \chi^2$ .

With the least squares estimator  $\hat{\theta}$ ,

$$(4) \quad \hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{r-1} e^{\mathbf{a}_i \hat{\theta}}$$

is an unbiased estimator for the variance of each treatment.

If  $\hat{\sigma}_i^2$  is a good estimate of  $\sigma_i^2$  then a plot of  $S_i/\hat{\sigma}_i^2$  against the quantiles of the  $\chi^2$  distribution with  $\nu = r - 1$  must show the whole set of points near to a straight line through the origin. Then a stepwise method to find out the significant dispersion effects  $\theta_i$  is to introduce in the regression function the estimated effects one by one as per biggest absolute value to obtain the estimates  $\hat{\sigma}_i^2$  and the quantile plot. If the plot shows any kind of departure from the straight line the regression function is incomplete requiring at least a new term. The procedure ends when the plot may be considered as sufficiently null and no other departures are uncovered.

## 5. AN EXAMPLE

Pignatiello and Ramberg [6] presented an experiment concerning the development of a heat-treatment process of leaf springs in trucks so that the free height,  $Y$ , of a spring in an unloaded condition be as close as possible to the target value of eight inches with minimum variability. The design factors were  $B$ , furnace temperature;  $C$ , heating time;  $D$ , transfer time;  $E$ , hold down time, and  $O$ , quench-oil temperature. Among the five factors, quench-oil temperature is not easily controllable, and Pignatiello and Ramberg treated it as both a control factor and a noise factor. In our analysis we treat quench-oil temperature as



a control factor to estimate the regression function for the dispersion model and check for its significance. This results in three replications of a  $2^{5-1}$  factorial. The data are presented in Table 1, jointly with the treatment means,  $\bar{Y}_{i.}$ , and the sums of squared deviations,  $S_i$ .

**Table 1**  
Data From a Replicated  $2^{5-1}$  factorial experiment.

Nº	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>BC</i>	<i>D</i>	<i>BD</i>	<i>CD</i>	<i>E</i>	<i>O</i>		$Y_{ij}$		$\bar{Y}_{i.}$	$S_i$	
1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	7,78	7,78	7,81	7,79	0,0006
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	8,15	8,18	7,88	8,07	0,0546
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	7,50	7,56	7,50	7,52	0,0024
4	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	7,59	7,56	7,75	7,63	0,0208
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	7,94	8,00	7,88	7,94	0,0072
6	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	7,69	8,09	8,06	7,95	0,0993
7	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	7,56	7,62	7,44	7,54	0,0168
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	-1	7,56	7,81	7,69	7,69	0,0312
9	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	7,50	7,25	7,12	7,29	0,0745
10	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	7,88	7,88	7,44	7,73	0,1290
11	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	7,50	7,56	7,50	7,52	0,0024
12	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	7,63	7,75	7,56	7,65	0,0184
13	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	7,32	7,44	7,44	7,40	0,0096
14	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	7,56	7,69	7,62	7,62	0,0084
15	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	7,18	7,18	7,25	7,20	0,0033
16	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	7,81	7,50	7,59	7,63	0,0510

Fig. 1 is quantile plot of the ordered  $S_i$ , displaying, as we may see, two distinct set of points. Accordingly, we apply least squares to estimate the dispersion effects,  $\hat{\theta}$ , as shown in Table 2.

**Table 2**  
Estimates of the dispersion coefficients.

Alias	$\hat{\theta}$	$\hat{\theta}^*$	$\hat{\theta}'$
<i>I</i>	-4.2382	-4.3739	-4.2924
<i>B + CDE</i>	0.9443	1.0800	0.9985
<i>C + BDE</i>	-0.2832	-0.1475	-0.2290
<i>BC + DE</i>	0.0005	-0.1352	-0.0537
<i>D + BCE</i>	0.1241	0.2598	0.1784
<i>BD + CE</i>	-0.2133	-0.3490	-0.2676
<i>CD + BE</i>	0.3364	0.2007	0.2822
<i>E + BCD</i>	0.1078	0.2435	0.1620
<i>O</i>	0.1401	0.0044	0.0859
<i>BO</i>	-0.2952	-0.1595	-0.2410
<i>CO</i>	-0.2974	-0.1617	-0.2431
<i>DO</i>	-0.5549	-0.4192	-0.5006
<i>EO</i>	0.0648	0.2005	0.1190
<i>BCO</i>	0.5448	0.4091	0.4906
<i>BDO</i>	0.2154	0.0797	0.1611
<i>CDO</i>	0.4282	0.2924	0.3739

The biggest absolute effect is associated to factor *B*, furnace temperature, giving the estimates

$$\hat{\sigma}_1^2 = \frac{1}{2} \text{EXP} [-4.2382 + 0.9443 * B]$$

and Fig. 2(a) plots the ordered  $S_i/\hat{\sigma}_{1i}^2$  against the quantiles of the  $\chi^2$  distribution of  $\nu = 2$ . This figure shows all points except one near a straight line through the origin. The anomalous point corresponds to  $S_9$ . We proceed to introduce the next biggest absolute effect into the regression function to obtain the estimates

$$\hat{\sigma}_2^2 = \frac{1}{2} \text{EXP}[-4 - 2382 + 0.9443*B - 0.5549*D*O]$$

and the quantile plot of Fig. 2(b). This figure displays a pattern similar to that of panel 2(a) and the deviant point corresponds again to the same treatment. Then  $S_9$  is considered an outlier and in order to correct it the bigger or the smaller replicate must be replaced by the average of the other two. If the bigger, 7.5, is the replaced one, then  $S_9^* = 0.0085$  and the estimated effects are denoted  $\hat{\theta}^*$  and exhibited in Table 2. The quantile plots of  $S_i^*/\hat{\sigma}_{1i}^{*2}$  and  $S_i^*/\hat{\sigma}_{2i}^{*2}$  are shown in panels (a) and (b) of Fig. 3, and none is a null one. But when we replace the smallest data value, 7.12, we obtain  $S_9' = 0.0313$ , the effects  $\hat{\theta}'$  of Table 2 and the quantile plots of Fig. 4. The first three panels, (a), (b) and (c), are associated to the regression function with only one, two and three effects introduced according their biggest absolute value. Looking at these plots we see that the anomaly has been removed and can infer that only factor  $B$  effects dispersion, thus

$$(5) \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{2} \text{EXP}[-4.2924 + 0.9985*B]$$

is the best estimate of the variability associated to each treatment. Fig. 4(d) is a quantile plot of the sums of squared deviations,  $S_i'$ , once amended the anomalous value of number 9 treatment. This exhibit also shows two distinct straight lines proving the heteroscedasticity of the process.

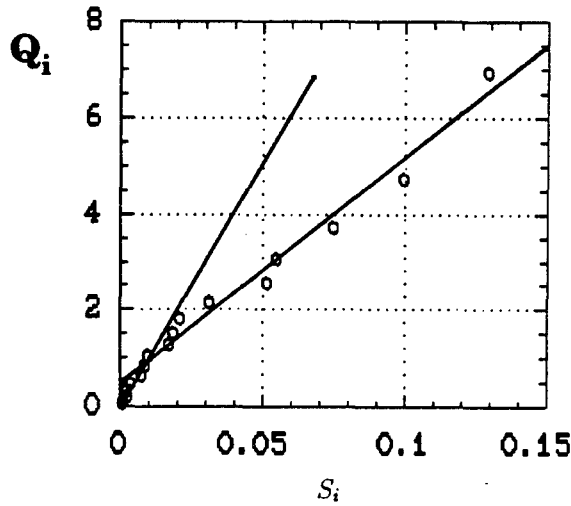


Figure 1.  
Chi-squared quantile plot corresponding to Table 1.

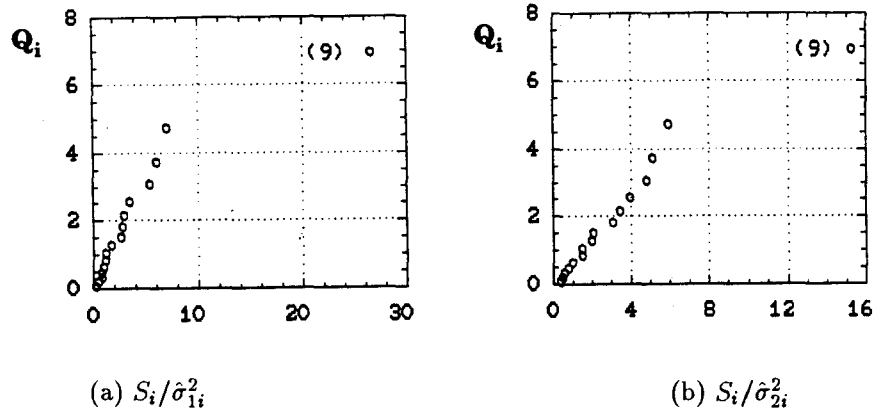


Figure 2.  
Q-plots for the stepwise regresion.

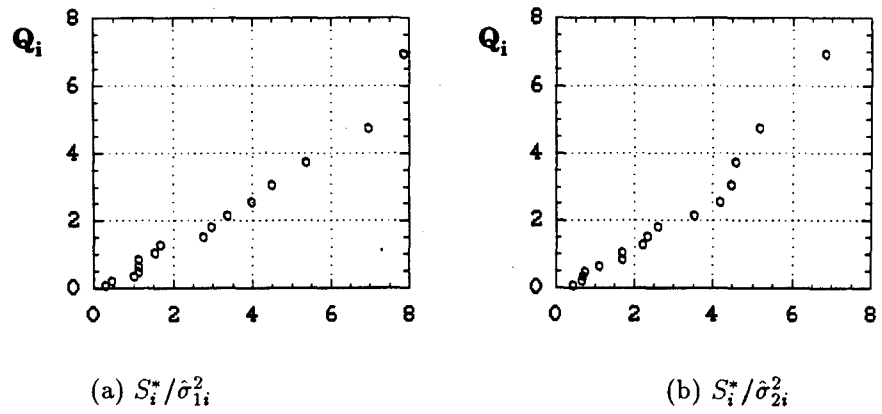
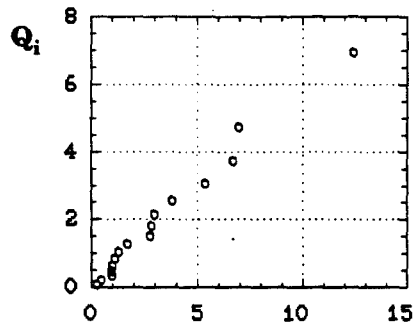
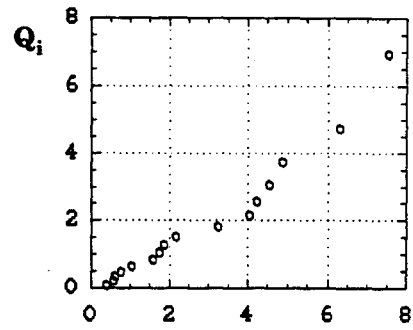


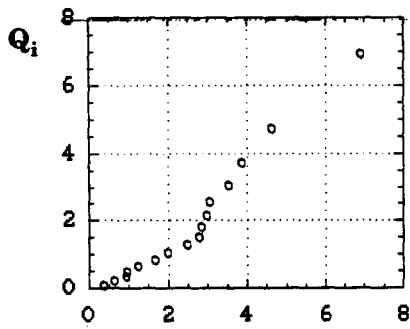
Figure 3.  
Chi-squared probability plots disentangling the outlier.



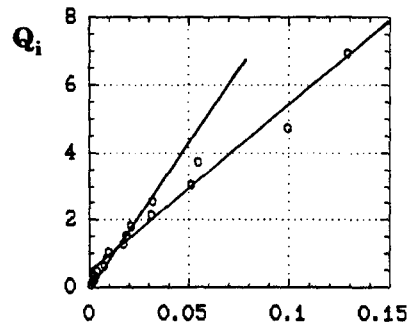
(a)  $S'_i/\hat{\sigma}_{1i}^2$



(b)  $S'_i/\hat{\sigma}_{2i}^2$

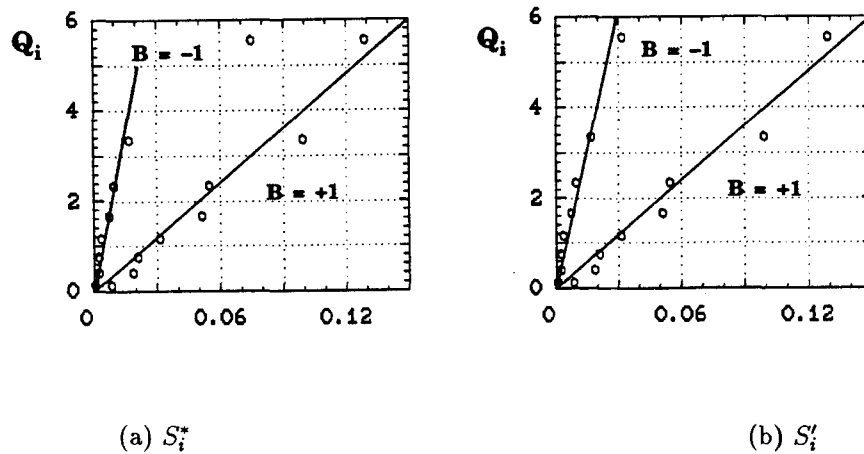


(c)  $S'_i/\hat{\sigma}_{3i}^2$



(d)  $S'_i$

**Figure 4.**  
Plots for removing the outlier and looking for significance.



**Figure 5.**  
Q-plots of two subsets of sums of squared deviations.

Since the process variability only depends on factor  $B$ , the sums of squared deviations can be split in two sets of equal variance according the  $B$  levels, and a quantile plot of each set has to show a linear configuration. Fig. 5 exhibits these plots: panel (a) displays data as measured and shows clearly two straight lines and one deviant point,  $S_9$ . Panel (b) of figure 5 corresponds to the sums of squared deviations after amending that anomaly, its configuration corroborates the conclusions of our analysis.

## 6. REFERENCES

- [1] Bartlett, M.S. and Kendall, D.G. (1946). "The Statistical Analysis of Variance — Heterogeneity and the Logarithmic Transformation". *J.R.S.S., Ser. B*, **8**, 128–138.
- [2] Daniel, C. (1959). "Use of Half-Normal Plots in Interpreting Factorial Two-level Experiments". *Technometrics*, **1**, 311–341.

- [3] ——— (1976). “Applications of Statistics to Industrial Experimentation”. J. Wiley.
- [4] **Gnanadesikan, R.** (1988). “Graphical Methods for Internal Comparison in ANOVA and MANOVA”. *Handbook of Statistics*, **1**, North-Holland.
- [5] **Pepió, M. and Polo, C.** (1989). “Estimación eficiente para la optimización de un proceso”. *Qüestió*, Vol **13**, **1-2-3**, 193–211.
- [6] **Pignatiello, J.J. and Ramberg, J.S.** (1985). “Discussion on Kackar’s paper”. *Journal of Quality Tecnology*, **17** (4), 198–209.
- [7] **Polo, C. and Pepió, M.** (1991). “Modelización y Optimización de Procesos”. CPDA.





## CIRCULACIONES Y FLUJO MÁXIMO CON COTAS PARAMÉTRICAS

H.I. CALVETE y P. MATEO

Universidad de Zaragoza

*Se estudian los problemas de obtención de circulaciones factibles y de flujo máximo en redes con cotas inferiores y superiores sobre los arcos, que son funciones lineales dependientes de un parámetro. Se caracteriza la existencia de circulaciones paramétricas y de flujos paramétricos factibles y se dan condiciones necesarias y suficientes para la optimalidad de un flujo paramétrico. Finalmente, se proponen algoritmos que permiten su cálculo.*

**Circulations and maximum flow parametric bounds.**

**Keywords:** Maximum flow, circulation, parametric.

### 1. INTRODUCCIÓN

El objeto de la programación paramétrica es estudiar el comportamiento de las soluciones óptimas y de la función objetivo de un problema cuando se realizan modificaciones en sus coeficientes. Este tipo de estudio tiene importancia ya que en muchas aplicaciones se presentan un gran número de problemas que difieren

---

—Article rebut el novembre de 1991.

—Acceptat el juliol de 1992.

uno de otro sólo en pequeñas modificaciones del problema original. Desde el punto de vista de la programación lineal, el problema se resuelve calculando la solución óptima para intervalos adyacentes de variación del parámetro. Si el problema es  $\text{Max } Z = c^T x$  sujeto a  $\{Ax = b(\lambda), x \geq 0, \lambda \in [0, \Lambda]\}$  entonces la función  $Z_{\max}(\lambda)$  es una función lineal a trozos, continua y cóncava sobre el intervalo en el que existe solución. Además, dados dos puntos de ruptura  $\lambda_k < \lambda_{k+1}$  y una solución óptima  $x^*$  para  $\lambda^*$ ,  $\lambda_k < \lambda^* < \lambda_{k+1}$ ,  $x^*$  es óptima sobre el intervalo cerrado  $[\lambda_k, \lambda_{k+1}]$  (véase Gal (1979)).

Ruhe (1985) aplica esta aproximación, que a menudo se denomina horizontal, al problema de máximo flujo paramétrico. En ella se construye la solución óptima y el valor del máximo flujo “trozo a trozo”, es decir, en cada etapa del algoritmo se obtiene la solución óptima para un intervalo de variación del parámetro adyacente al de la iteración anterior. En consecuencia, se dispone de la solución exacta sobre los intervalos adyacentes ya estudiados, pero no se tiene información sobre la solución óptima para el resto de los valores del parámetro.

Hamacher y Foulds (1989) desarrollan una aproximación distinta al tratamiento de este problema, en la que, en cada iteración, se determina una mejora del flujo existente definida sobre todo el intervalo de variación del parámetro. Esta aproximación se denomina vertical. En este caso, el valor óptimo de la función objetivo se aproxima por una función continua y lineal a trozos, sobre el intervalo en el que existe solución.

En la figura 1 se ilustran ambas aproximaciones. La línea gruesa indica el valor de  $Z(\lambda)$ , que aproxima  $Z_{\max}(\lambda)$ , obtenido tras dos iteraciones. La flecha señala el sentido en el que se mueve el algoritmo.

En este artículo se considera el problema de obtener circulaciones factibles y de determinar el valor del flujo máximo que puede circular por una red en la que hay definidas cotas superiores e inferiores sobre los arcos que son funciones lineales de un parámetro  $\lambda$ , que toma valores en el intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$ . Los algoritmos que se presentan, en la línea del propuesto por Hamacher y Foulds, consideran en cada iteración flujos no triviales sobre todo el rango de variación del parámetro, que se acercan de una manera “vertical” a una circulación factible o a un flujo máximo.

En la sección 2 se introducen los conceptos básicos, y se obtienen condiciones necesarias y suficientes para la existencia de una circulación paramétrica y de un flujo paramétrico factibles. La sección 3 incluye un algoritmo para la obtención de una circulación paramétrica factible basado en una técnica de etiquetado. Dado el caso, el algoritmo determina asimismo un conjunto de nodos para el que no se verifica la condición de existencia de circulaciones factibles. En la sección 4 se caracterizan los flujos paramétricos máximos. La sección 5 incluye

un algoritmo para la obtención de flujos paramétricos máximos, a partir de un flujo paramétrico factible. Finalmente, en la sección 6, se muestra un caso ilustrativo.

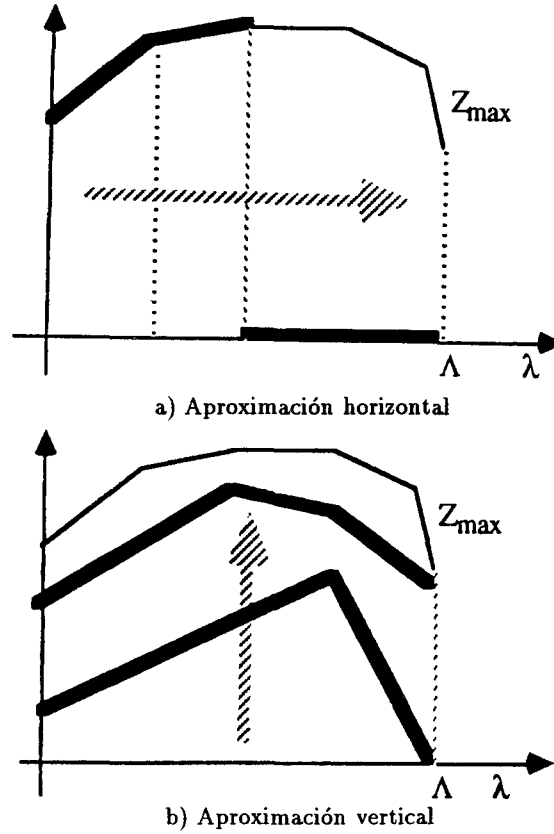


Figura 1. Cálculo del valor de un flujo máximo paramétrico.

## 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA Y CONDICIONES DE FACTIBILIDAD

Sea la red dirigida  $G = [N, A]$  con conjunto de nodos  $N = \{1, \dots, n\}$  y conjunto de arcos  $A = \{(i, j) : i, j \in N\}$ . Para cada arco  $(i, j)$ , se definen una cota inferior paramétrica  $l_{ij}(\lambda) = a_{ij} + \lambda b_{ij}$  y una cota superior paramétrica  $c_{ij}(\lambda) = \bar{a}_{ij} + \lambda \bar{b}_{ij}$ .

El intervalo de variación del parámetro es tal que, para cada  $\lambda$ ,  $0 \leq l_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda)$ , para todo  $(i, j) \in A$ . Dicho intervalo se denotará por  $[\lambda_1, \lambda_2]$ .

### Definición 2.1

Un flujo paramétrico sobre el arco  $(i, j)$  es una función lineal a trozos  $f_{ij}(\lambda)$  definida en el intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$ , tal que  $l_{ij}(\lambda) \leq f_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda)$ ,  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ .

### Notación

Dados  $X, Y \subset N$ , denotaremos  $(X, Y) = \{(i, j) \in A : i \in X, j \in Y\}$ . Si sobre el conjunto de arcos  $A$  se tiene definida una función dependiente de un parámetro  $H_{ij}(\lambda)$ , denotaremos  $H(X, Y; \lambda) = \sum_{(i, j) \in (X, Y)} H_{ij}(\lambda)$ .

### Definición 2.2

Llamaremos circulación paramétrica en la red  $G$  a la función  $f: A \times [\lambda_1, \lambda_2] \rightarrow \mathbb{R}^+$  tal que a  $((i, j), \lambda)$  hace corresponder  $f_{ij}(\lambda)$ , de forma que se verifica, para cada  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ ,

$$(2.1) \quad \sum_{(i, j) \in A} f_{ij}(\lambda) - \sum_{(j, i) \in A} f_{ji}(\lambda) = 0 \quad \forall i \in N$$

$$(2.2) \quad 0(\lambda) \leq l_{ij}(\lambda) \leq f_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda) \quad \forall (i, j) \in A$$

donde  $0(\lambda) = 0$ ,  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ .

### Teorema 2.1

Una condición necesaria y suficiente para que exista una circulación paramétrica factible en el intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$  es que  $\forall X \subset N$  y  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$

$$(2.3) \quad c(X, \overline{X}; \lambda) \geq l(\overline{X}, X; \lambda)$$

### Demostración

Fijado  $\lambda^* \in [\lambda_1, \lambda_2]$ , la existencia de una circulación factible es equivalente a la existencia de un flujo de valor  $l(N, N; \lambda^*)$  en la red  $G' = [N', A']$ , donde  $N' = N \cup \{s, t\}$ ,  $A' = A \cup \{(s, i), i \in N\} \cup \{(i, t), i \in N\}$ , en la que hay definidas capacidades

$$c'_{ij} = \begin{cases} c_{ij}(\lambda^*) - l_{ij}(\lambda^*) & (i, j) \in A \\ l(N, j; \lambda^*) & i = s, j \in N \\ l(i, N; \lambda^*) & i \in N, j = t \end{cases}$$

Para ello, una condición necesaria y suficiente es que cualquier corte que separe  $s$  y  $t$  en la red  $G'$  tenga al menos capacidad  $l(N, N; \lambda^*)$ . Esto se transforma, véase Ford y Fulkerson (1962), en que una condición necesaria y suficiente para que exista una circulación factible con respecto a las cotas fijas  $l_{ij}(\lambda^*)$  y  $c_{ij}(\lambda^*)$  es que,  $\forall X \subset N$  se cumpla

$$c(X, \overline{X}; \lambda^*) \geq l(\overline{X}, X; \lambda^*)$$

En consecuencia, al variar  $\lambda^*$  se obtiene la condición (2.3). ■

Sean ahora 1 y  $n$  nodos distinguidos denominados nodo entrada y nodo salida de la red, respectivamente.

### Definición 2.3

Llamaremos flujo paramétrico de 1 a  $n$  en la red  $G$  a la función  $f: A \times [\lambda_1, \lambda_2] \rightarrow \mathbb{R}^+$  tal que a  $((i, j), \lambda)$  hace corresponder  $f_{ij}(\lambda)$ , de forma que se verifica, para cada  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ ,

$$(2.4) \quad \sum_{(i,j) \in A} f_{ij}(\lambda) - \sum_{(j,i) \in A} f_{ji}(\lambda) = \begin{cases} v(\lambda) & i = 1 \\ 0 & i \neq 1, n \\ -v(\lambda) & i = n \end{cases}$$

$$(2.5) \quad 0(\lambda) \leq l_{ij}(\lambda) \leq f_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda) \quad \forall (i, j) \in A$$

La función lineal a trozos  $v(\lambda)$  recibe el nombre de valor del flujo paramétrico.

El problema de máximo flujo paramétrico consiste en encontrar un flujo paramétrico de valor  $v^*(\lambda)$  tal que  $v^*(\lambda) \geq v(\lambda), \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$  y  $\forall v(\lambda)$  valor de un flujo paramétrico.

### Teorema 2.2

Una condición necesaria y suficiente para que exista un flujo paramétrico factible de 1 a  $n$  en el intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$  es que  $\forall X \subset N$  tal que  $\{1, n\} \subset X$  ó  $\{1, n\} \subset \overline{X}$ , y  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$

$$(2.6) \quad c(X, \overline{X}; \lambda) \geq l(\overline{X}, X; \lambda)$$

### Demostración

Considerando la red ampliada  $G^* = [N, A^*]$  en la que se han añadido los arcos  $(1, n)$  y  $(n, 1)$  con cotas inferior y superior 0 e  $\infty$ , respectivamente, es equivalente encontrar un flujo paramétrico factible de 1 a  $n$  en la red original y una circulación factible en la red ampliada. Aplicando el teorema 2.1, la condición (2.3) resulta trivial si  $1 \in X$  y  $n \in \bar{X}$ , o viceversa. ■

### 3. CONSTRUCCIÓN DE UNA CIRCULACIÓN FACTIBLE

El algoritmo que se describe a continuación para el cálculo de una circulación paramétrica factible consta de dos etapas, una de etiquetado de nodos y otra de cambio de flujo sobre los arcos de la red.

Cada nodo  $j$  que se etiqüete recibirá etiquetas de la forma  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$  ó  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$ , donde  $p_j$  es un índice que permite numerar las sucesivas etiquetas que se le asignan al nodo  $j$ ;  $i$  es el nodo, ya etiquetado, desde el que se etiqueta  $j$ ; el símbolo “+” indicará que se está utilizando el arco  $(i, j)$  para etiquetar  $j$ , y el símbolo “-” que se utiliza el arco  $(j, i)$ ;  $q_i$  es el número de la etiqueta del nodo  $i$  que se utiliza en el cálculo de la función  $\varepsilon_j(\lambda)$ ; y  $\varepsilon_j(\lambda)$  es una función que toma valor distinto de cero en un conjunto de puntos  $I_j \subset [\lambda_1, \lambda_2]$ , que se definirá posteriormente.

En un momento cualquiera del algoritmo, un nodo puede estar etiquetado y completamente examinado (con todas sus etiquetas examinadas), etiquetado y no completamente examinado (alguna etiqueta permanece sin examinar), y no etiquetado.

El algoritmo puede comenzar con cualquier  $f$  que satisfaga las ecuaciones (2.1). En particular, podemos tomar  $f \equiv 0$ .

Se selecciona un arco  $(k, h)$  que no verifique las condiciones (2.2). En este caso, existen valores del parámetro  $\lambda$  tal que

- a)  $l_{kh}(\lambda) > f_{kh}(\lambda)$  ó
- b)  $f_{kh}(\lambda) > c_{kh}(\lambda)$ .

**Caso a):** Sea  $I^* = \{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]: l_{kh}(\lambda) > f_{kh}(\lambda)\}$ . Se comienza asignando a  $h$  la etiqueta  $(1, k^+, \bullet, \varepsilon_h(\lambda); I_h)$  donde

$$\varepsilon_h(\lambda) = l_{kh}(\lambda) - f_{kh}(\lambda), \quad I_h = I^*$$

A continuación se trata de determinar una trayectoria desde  $h$  hasta  $k$  aplicando las reglas de etiquetado que se detallan más adelante. Si se consigue etiquetar el nodo  $k$  se detiene la rutina de etiquetado, se define  $\varepsilon_k(\lambda) = 0$  para  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_k$ , y se pasa a la etapa de cambio de flujo cuyas reglas se indican posteriormente. Tras completar dicha etapa, es decir, una vez llegados al nodo  $h$ , se suma  $\varepsilon_k(\lambda)$  al flujo que circula por el arco  $(k, h)$ .

**Caso b):** Sea  $I^* = \{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]: f_{kh}(\lambda) > c_{kh}(\lambda)\}$ . Se comienza asignando a  $k$  la etiqueta  $(1, h^-, \bullet, \varepsilon_k(\lambda); I_k)$  donde

$$\varepsilon_k(\lambda) = f_{kh}(\lambda) - c_{kh}(\lambda), \quad I_k = I^*$$

A continuación se trata de determinar una trayectoria desde  $k$  hasta  $h$  aplicando las reglas de etiquetado. Si se logra etiquetar el nodo  $h$  se detiene la rutina de etiquetado, se define  $\varepsilon_h(\lambda) = 0$  para  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_h$ , y se pasa a la etapa de cambio de flujo, que se aplica intercambiando  $k$  por  $h$  y  $h$  por  $k$ . Tras completar dicha etapa, es decir, una vez llegados al nodo  $k$ , se resta  $\varepsilon_h(\lambda)$  al flujo que circula por el arco  $(k, h)$ .

El proceso se repite, borrando cada vez las etiquetas de los nodos, hasta que el arco  $(k, h)$  verifique las condiciones (2.2). Estas etapas se iteran hasta que todos los arcos cumplan dichas condiciones.

Si en el proceso de etiquetado existe algún conjunto  $I$  de valores de  $\lambda$  para el que es imposible llegar desde  $h$  hasta  $k$  (o desde  $k$  hasta  $h$ ), entonces, para todo  $\lambda \in I$ , no existe una circulación paramétrica factible. En efecto, sea  $X$  el conjunto de nodos  $i$  etiquetados en los que en alguna etiqueta  $I_i \supset I$ , entonces, por las reglas de etiquetado,

$$f_{ij}(\lambda) \geq c_{ij}(\lambda), \quad \forall (i, j) \in (X, \overline{X}) \quad \text{y} \quad f_{ji}(\lambda) \leq l_{ji}(\lambda), \quad \forall (j, i) \in (\overline{X}, X), \quad \lambda \in I$$

y además, para el arco  $(k, h)$  ó  $f_{kh}(\lambda) > c_{kh}(\lambda)$  ó  $f_{kh}(\lambda) < l_{kh}(\lambda)$ , en consecuencia

$$0 = f(X, \overline{X}; \lambda) - f(\overline{X}, X; \lambda) > c(X, \overline{X}; \lambda) - l(\overline{X}, X; \lambda), \quad \forall \lambda \in I$$

y en consecuencia se incumple la condición (2.3).

### Reglas de etiquetado

Sea  $i$  un nodo cualquiera etiquetado y con alguna etiqueta sin examinar. Sea ésta  $(p_i, g^\pm, q_g, \varepsilon_i(\lambda); I_i)$ , entonces

- (1) Se identifican todos los nodos  $j$  para los que existe  $I'$  tal que  $f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda)$  con  $\lambda \in I'$  e  $I' \cap I_i \neq \emptyset$ . A estos nodos se les asigna la etiqueta

$$(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j = I' \cap I_i)$$

donde  $p_j$  es 1 si es la primera etiqueta de ese nodo, si hay más etiquetas se incrementa en una unidad el índice de la última;  $q_i$  es el índice  $p_i$  de la etiqueta que se está examinando, cuyo  $\varepsilon_i(\lambda)$  se utiliza en el cálculo de la función  $\varepsilon_j(\lambda)$ ; y  $\varepsilon_j(\lambda) = \min\{\varepsilon_i(\lambda), c_{ij}(\lambda) - f_{ij}(\lambda)\}$  calculado para  $\lambda \in I' \cap I_i$ .

- (2) Se identifican todos los nodos  $j$  para los que existe  $I'$  tal que  $f_{ji}(\lambda) > l_{ji}(\lambda)$  con  $\lambda \in I'$  e  $I' \cap I_i \neq \emptyset$ . A estos nodos se les asigna la etiqueta

$$(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j = I' \cap I_i)$$

donde  $p_j$  y  $q_i$  están definidos como en (1), y  $\varepsilon_j(\lambda) = \min\{\varepsilon_i(\lambda), f_{ji}(\lambda) - l_{ji}(\lambda)\}$  calculado para  $\lambda \in I' \cap I_i$ .

Si al tratar de asignar una etiqueta al nodo  $j$ , el conjunto  $I_j$  que se construye está incluido en el correspondiente conjunto de otra etiqueta de dicho nodo, el etiquetado no se realiza.

Este proceso se repite con todas las etiquetas del nodo  $i$  que en ese momento estén sin examinar. Al finalizar, el nodo  $i$  pasa a estar etiquetado y completamente examinado. Si eventualmente el nodo  $i$  recibe alguna nueva etiqueta, su situación cambiará a etiquetado y no completamente examinado.

Se elige un nuevo nodo no completamente examinado y se repite el proceso.

### Reglas para el cambio de flujo

En esta etapa el nodo  $k$  estará etiquetado.

Si la etiqueta del nodo  $k$  es de la forma  $(1, j^+, q_j, \varepsilon_k(\lambda); I_k)$ , sustituimos  $f_{jk}(\lambda)$  por  $f_{jk}(\lambda) + \varepsilon_k(\lambda)$ .

Sea el nodo  $j$ , seleccionamos la etiqueta cuyo índice  $p_j$  coincide con el valor  $q_j$  de la etiqueta del nodo  $k$ . Aquella podrá ser alguna de las siguientes:



a')  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$

b')  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$

En el caso a') sustituimos  $f_{ij}(\lambda)$  por  $f_{ij}(\lambda) + \varepsilon_k(\lambda)$ . En el caso b') sustituimos  $f_{ji}(\lambda)$  por  $f_{ji}(\lambda) - \varepsilon_k(\lambda)$ . Se pasa al nodo  $i$  y se le aplica el mismo procedimiento, hasta llegar al nodo  $h$ . Una vez alcanzado el nodo  $h$  se vuelve al procedimiento general.

Si la etiqueta asignada al nodo  $k$  fue  $(1, j^-, q_j, \varepsilon_k(\lambda); I_k)$ , sustituimos  $f_{kj}(\lambda)$  por  $f_{kj}(\lambda) - \varepsilon_k(\lambda)$ . Se selecciona el nodo  $j$  y se repite el proceso anterior.

#### 4. CARACTERIZACIÓN DE UN FLUJO PARAMÉTRICO MÁXIMO

En lo que sigue consideraremos como intervalo de variación del parámetro aquel intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$ , no vacío, para el que el problema planteado tenga solución factible.

##### Definición 4.1

Un  $m$ -corte es un conjunto de  $m$  cortes que separan 1 y  $n$ ,  $(X_1, \overline{X}_1), \dots, (X_m, \overline{X}_m)$ , cada uno de los cuales tiene asociado un conjunto de valores del parámetro,  $I_1, \dots, I_m$ , que forman una partición del intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$ .

El  $m$ -corte se denotará por  $\mathbf{X} = ((X_1, \overline{X}_1), \dots, (X_m, \overline{X}_m); I_1, \dots, I_m)$ .

Denotando  $\mathbf{1}_A(\bullet)$  la función indicador del conjunto  $A$ , se define la capacidad del  $m$ -corte como la función lineal a trozos:

$$\begin{aligned} C(\lambda) &= \sum_{r=1}^m (c(X_r, \overline{X}_r; \lambda) - l(\overline{X}_r, X_r; \lambda)) \mathbf{1}_{I_r}(\lambda) = \\ &= \sum_{r=1}^m \left( \sum_{(i,j) \in (X_r, \overline{X}_r)} c_{ij}(\lambda) - \sum_{(j,i) \in (\overline{X}_r, X_r)} l_{ji}(\lambda) \right) \mathbf{1}_{I_r}(\lambda) \end{aligned}$$

**Lema**

Para cualquier  $m$ -corte  $X$ , de capacidad  $\mathbb{C}(\lambda)$ , y cualquier flujo paramétrico factible de 1 a  $n$ ,  $f$ , de valor  $v(\lambda)$  se verifica:

$$v(\lambda) \leq \mathbb{C}(\lambda), \quad \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$$

**Demostración**

Sea  $\lambda^* \in [\lambda_1, \lambda_2]$  cualquiera, pero fijo. Sea  $r$  el índice tal que  $\lambda^* \in I_r$ . Como  $(X_r, \bar{X}_r)$  es un corte que separa 1 y  $n$ , puede escribirse:

$$\begin{aligned} v(\lambda^*) = f(X_r, \bar{X}_r; \lambda^*) &= f(\bar{X}_r, X_r; \lambda^*) \leq \\ &\leq c(X_r, \bar{X}_r; \lambda^*) - l(\bar{X}_r, X_r; \lambda^*) = \mathbb{C}(\lambda^*) \end{aligned}$$

Luego

$$v(\lambda) \leq \mathbb{C}(\lambda), \quad \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2].$$

■

**Teorema 4.1:** *Teorema del flujo paramétrico máximo – mínimo  $m$ -corte.*

El flujo paramétrico  $f$ , de valor  $v(\lambda)$ , es un flujo paramétrico máximo si y sólo si existen  $m$  y un  $m$ -corte asociado, de capacidad  $\mathbb{C}(\lambda)$ , tal que

$$(4.1) \quad v(\lambda) = \mathbb{C}(\lambda), \quad \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$$

**Demostración**

Para demostrar la suficiencia, basta considerar que si  $v(\lambda) = \mathbb{C}(\lambda)$ ,  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ , por el lema anterior este flujo paramétrico alcanza el máximo valor posible, luego será un flujo paramétrico máximo.

Sea ahora un flujo paramétrico máximo  $f$  de valor  $v(\lambda)$ . Construimos iterativamente un  $m$ -corte siguiendo el algoritmo cuya descripción de alto nivel se da en la tabla 1. En él, se subdivide iterativamente el intervalo  $[\lambda_1, \lambda_2]$  en subconjuntos  $I_r$  para los que se toma  $X_r$  como el conjunto de los nodos a los que se puede llegar desde el nodo 1 por trayectorias que incluyen arcos  $(i, j)$  para los que  $f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda)$  ó  $f_{ij}(\lambda) > l_{ij}(\lambda)$ ,  $\lambda \in I_r$ .

Comprobemos que efectivamente es un  $m$ -corte. La construcción por divisiones sucesivas garantiza que  $\{I_r, r = 1, \dots, m\}$  es una partición. Además, cada

par  $(X_r, \overline{X}_r)$  es un corte que separa 1 y  $n$ . En efecto, por construcción,  $1 \in X_r$ ; supongamos que  $n \notin \overline{X}_r$ . Existiría entonces una trayectoria de 1 a  $n$ , con todos sus nodos en  $X_r$ , tal que sobre los arcos hacia adelante,  $(i, j)$ , de la trayectoria se cumple  $f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda)$  y sobre los arcos hacia atrás,  $(j, i)$ ,  $f_{ji}(\lambda) > l_{ji}(\lambda)$  para cada  $\lambda \in I_r$ .

Se calculan entonces, para  $\lambda \in I_r$ , las siguientes funciones:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(\lambda) &= \min(c_{ij}(\lambda) - f_{ij}(\lambda)) \quad \text{sobre los arcos hacia adelante de la trayectoria} \\ \varepsilon_2(\lambda) &= \min(f_{ji}(\lambda) - l_{ji}(\lambda)) \quad \text{sobre los arcos hacia atrás de la trayectoria}\end{aligned}$$

$$\text{Sea } \varepsilon(\lambda) = \begin{cases} \min\{\varepsilon_1(\lambda), \varepsilon_2(\lambda)\} & \lambda \in I_r \\ 0 & \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_r \end{cases}$$

Construimos un nuevo flujo paramétrico  $f^*$  que coincide con  $f$  en los arcos no incluidos en la trayectoria, que toma valor  $f_{ij}(\lambda) + \varepsilon(\lambda)$  en los arcos hacia adelante de la trayectoria y valor  $f_{ji}(\lambda) - \varepsilon(\lambda)$  en los arcos hacia atrás.

Puede comprobarse sin dificultad que  $f^*$  verifica las condiciones (2.4) y (2.5), y el valor del flujo es  $v^*(\lambda) = v(\lambda) + \varepsilon(\lambda)$ . Además, para  $\lambda \in I_r$ ,  $\varepsilon(\lambda) > 0$ , por tanto  $v^*(\lambda) > v(\lambda)$ , en contra de la hipótesis de que  $f$  era un flujo paramétrico máximo. En consecuencia,  $n \in \overline{X}_r$ , para todo  $r$ , y  $\mathbf{X} = ((X_1, \overline{X}_1), \dots, (X_m, \overline{X}_m); I_1, \dots, I_m)$  es un  $m$ -corte.

Notemos que, una vez construido el  $m$ -corte:

$$f(X_r, \overline{X}_r; \lambda) = c(X_r, \overline{X}_r; \lambda) \quad \text{y} \quad f(\overline{X}_r, X_r; \lambda) = l(\overline{X}_r, X_r; \lambda), \quad \lambda \in I_r, \\ r = 1, \dots, m.$$

En efecto, supongamos que  $f(X_r, \overline{X}_r; \lambda) < c(X_r, \overline{X}_r; \lambda)$  para algún  $r$  y para todo  $\lambda \in I'$  con  $I' \subset I_r$ . Entonces existe al menos un arco  $(i, j)$  tal que  $i \in X_r, j \in \overline{X}_r$  y  $f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda), \lambda \in I'$ . Por construcción de  $X_r$  dicha situación daría lugar a que  $j$  perteneciera a  $X_r$  o a la formación de un nuevo  $X_s$  tal que  $X_s = X_r \cup \{j\}, I_s = I'$  y  $I_r = I_r \setminus I'$ , y el algoritmo iteraría de nuevo, en contra de la hipótesis de que el algoritmo ha terminado.

De manera análoga se prueba que  $f(\overline{X}_r, X_r; \lambda) = l(\overline{X}_r, X_r; \lambda), \lambda \in I_r, r = 1, \dots, m$ . En consecuencia,

$$v(\lambda) = f(X_r, \overline{X}_r; \lambda) - f(\overline{X}_r, X_r; \lambda) = c(X_r, \overline{X}_r; \lambda) - l(\overline{X}_r, X_r; \lambda), \quad \lambda \in I_r, \\ r = 1, \dots, m$$

y por tanto para el  $m$ -corte construido  $v(\lambda) = \mathbb{C}(\lambda), \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ . ■

**Tabla 1**  
Rutina de construcción del  $m$ -corte mínimo.

```

 $m = 1$   $X_1 = \{1\}$   $I_1 = [\lambda_1, \lambda_2]$   $r = 1$ 
MIENTRAS ( $r \leq m$ )
PRINCIPIO
    MIENTRAS ( $i \in X_r$ . AND.  $j \notin X_r$ . AND.  $(i, j) \in A$ )
    PRINCIPIO
         $I' = \{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]: f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda)\}$ 
        SI ( $I' \neq \emptyset$ )
        PRINCIPIO
             $I' = I' \cap I_r$ 
            SI ( $I' \subset I_r$ )/ $\ast \subset$  Indica contenido estricto  $\ast$ /
            PRINCIPIO
                 $m = m + 1$   $X_m = X_r \cup \{j\}$ 
                 $I_m = I'$   $I_r = I_r \setminus I_m$ 
            FIN
            SI ( $I_r \equiv I'$ )
            PRINCIPIO
                 $X_r = X_r \cup \{j\}$ 
            FIN
        FIN
    FIN
    FIN /* Fmientras */
    MIENTRAS ( $i \in X_r$ . AND.  $j \notin X_r$ . AND.  $(j, i) \in A$ )
    PRINCIPIO
         $I' = \{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]: f_{ji}(\lambda) > l_{ji}(\lambda)\}$ 
        SI ( $I' \neq \emptyset$ )
        PRINCIPIO
             $I' = I' \cap I_r$ 
            SI ( $I' \subset I_r$ )/ $\ast \subset$  Indica contenido estricto  $\ast$ /
            PRINCIPIO
                 $m = m + 1$   $X_m = X_r \cup \{j\}$ 
                 $I_m = I'$   $I_r = I_r \setminus I_m$ 
            FIN
            SI ( $I_r \equiv I'$ )
            PRINCIPIO
                 $X_r = X_r \cup \{j\}$ 
            FIN
        FIN
    FIN
    FIN /* Fmientras */
     $r = r + 1$ 
FIN /* Fmientras */

```

## 5. CONSTRUCCIÓN DE UN FLUJO PARAMÉTRICO MÁXIMO

El algoritmo que se propone está basado en una técnica de etiquetado semejante a la presentada en la sección 3. El procedimiento empieza con un flujo paramétrico factible  $f$ .

### Etapa de etiquetado

El nodo 1 se etiqueta siempre como  $(1, \bullet, \bullet, \infty; [\lambda_1, \lambda_2])$ ; en este momento el nodo 1 está etiquetado y sin examinar, el resto de los nodos está no etiquetado.

Sea  $i$  un nodo cualquiera etiquetado y con alguna etiqueta sin examinar. Sea ésta  $(p_i, g^\pm, q_g, \varepsilon_i(\lambda); I_i)$ . Se aplican a este nodo las reglas de etiquetado desarrolladas en la sección 3. Se repite el proceso hasta que se etiqueta el nodo  $n$  o hasta que no se pueden asignar más etiquetas y el nodo  $n$  no está etiquetado.

Si se consigue etiquetar el nodo  $n$  se detiene la rutina de etiquetado y se pasa a la etapa de cambio de flujo. Si no se puede etiquetar el nodo  $n$ , el algoritmo ha finalizado y el flujo paramétrico actual será un flujo paramétrico máximo.

En efecto, basta considerar el  $m$ -corte cuyos conjuntos  $I_1, \dots, I_m$  son los que aparecen en la definición del flujo paramétrico actual. Fijado  $I_r$ , el conjunto  $X_r$  es el conjunto de nodos etiquetados cuya etiqueta tiene como quinto parámetro un conjunto que contiene a  $I_r$ . Este  $m$ -corte verifica la condición (4.1) luego el flujo es óptimo.

### Etapa de cambio de flujo

En esta etapa, el nodo  $n$  estará etiquetado. Definimos  $\varepsilon_n(\lambda) = 0$  para  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_n$ .

Si la etiqueta es de la forma  $(1, j^+, q_j, \varepsilon_n(\lambda); I_n)$ , sustituimos  $f_{jn}(\lambda)$  por  $f_{jn}(\lambda) + \varepsilon_n(\lambda)$ . Sea el nodo  $j$ , seleccionamos la etiqueta cuyo índice  $p_j$  coincide con el valor  $q_j$  de la etiqueta del nodo  $n$ . Ésta podrá ser de la forma:

- a)  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$
- b)  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$

En el caso a) sustituimos  $f_{ij}(\lambda)$  por  $f_{ij}(\lambda) + \varepsilon_n(\lambda)$ . En el caso b) sustituimos  $f_{ji}(\lambda)$  por  $f_{ji}(\lambda) - \varepsilon_n(\lambda)$ . Se pasa al nodo  $i$  y se le aplica el mismo procedimiento, hasta llegar al nodo 1. En este momento se borran las etiquetas y se repite el proceso de etiquetado.

Si la etiqueta asignada al nodo  $n$  fue  $(1, j^-, q_j, \varepsilon_n(\lambda); I_n)$ , sustituimos  $f_{nj}(\lambda)$  por  $f_{nj}(\lambda) - \varepsilon_n(\lambda)$ . Se selecciona el nodo  $j$  y se repite el proceso anterior.

### Observación 5.1

El flujo paramétrico factible con el que comenzar este procedimiento puede obtenerse aplicando el algoritmo de la sección 3 a la red ampliada  $G^* = [N, A^*]$  en la que se han añadido los arcos  $(1, n)$  y  $(n, 1)$  con cotas inferior y superior 0 e  $\infty$ , respectivamente.

### Observación 5.2

Una vez finalizado el algoritmo, el  $m$ -corte asociado al flujo paramétrico máximo se calcula de manera inmediata. El número de conjuntos  $I_i$  que forman la partición del intervalo en el que existe solución es  $m$ . A cada uno de estos  $I_i$  se le asocia el conjunto  $X_i$  formado por los nodos en alguna de cuyas etiquetas figure un conjunto que contenga a  $I_i$ .

### Complejidad computacional

El algoritmo de etiquetado propuesto está basado en la búsqueda de trayectorias que aumentan el flujo. Considerando que los sucesivos etiquetados se realizan siguiendo la regla “examinar las etiquetas de los nodos en el orden en el que se asignaron”, puede realizarse un razonamiento semejante al presentado por Edmonds y Karp (1973), identificando junto con los arcos embotellados el conjunto de valores de  $\lambda$  para el que se produce el embotellamiento. Así, el número de trayectorias de aumento de flujo queda acotado, en el peor caso, por  $O(\tau mn)$ , siendo  $\tau$  el número de puntos de ruptura,  $m$  el número de arcos y  $n$  el número de nodos.

La complejidad para la fase de etiquetado tiene orden  $O(\tau^2 n^2)$ , en el caso más desfavorable, con tal que se garantice que el número de etiquetas de cada nodo no es mayor que  $\tau$ . Esto puede conseguirse sin más que asignar las etiquetas de un nodo cualquiera de forma que los sucesivos conjuntos  $I_i$  sean disjuntos. Para ello basta tomar como conjunto  $I_i$  de la última etiqueta que se asigna la diferencia entre el conjunto que se asignaría y la unión de los conjuntos  $I_i$  de las etiquetas previamente asignadas.

En conjunto, la complejidad global es, por tanto, de orden  $O(\tau^3 mn^3)$ .

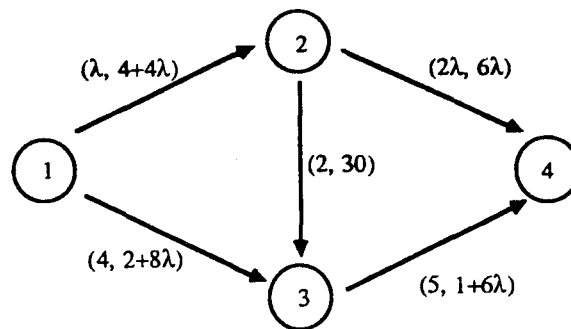
## 6. CASO ILUSTRATIVO

En este apartado se obtiene el flujo paramétrico máximo para el problema mostrado en el figura 2. Las expresiones sobre los arcos indican las capacidades inferior y superior, respectivamente.

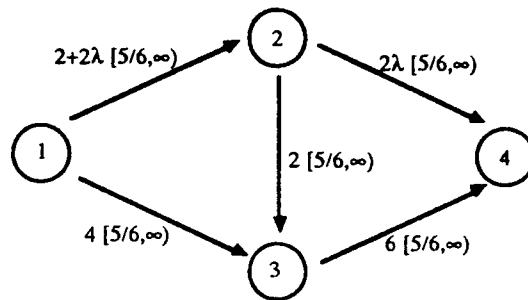
El intervalo inicial de variación del parámetro es  $[2/3, \infty)$ . Para el cálculo de un flujo paramétrico inicial aplicamos el algoritmo desarrollado en la sección 3. Se introducen los arcos  $(1,4)$  y  $(4,1)$  con cotas cero e infinito, y comenzamos con flujo cero sobre todos los arcos. En la tabla 2 se muestran los etiquetados de las distintas etapas del algoritmo, así como el flujo sobre los arcos resultantes de dichas etapas. En la iteración 4 se observa que sólo puede etiquetarse el nodo 3, por tanto en el intervalo  $[2/3, 5/6)$  el problema no tiene solución factible, por lo que se elimina del estudio. Para dicho intervalo el conjunto  $X = \{3\}$  no verifica la condición (2.6). La figura 3 muestra el flujo factible inicial con el que comenzamos el algoritmo desarrollado en la sección 5. La tabla 3 muestra los sucesivos etiquetados y flujos. Puesto que en la iteración 3 no puede etiquetarse el nodo 4, el flujo máximo es el flujo obtenido en la iteración 2, que se muestra en la figura 4. El 2-corte paramétrico será  $X = ((X_1, \bar{X}_1), (X_2, \bar{X}_2); I_1, I_2)$ , donde

$$X_1 = \{1, 2, 3\} \quad I_1 = [5/6, 1)$$

$$X_2 = \{1, 3\} \quad I_2 = [1, \infty)$$

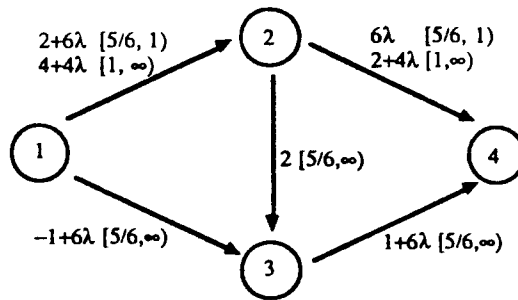


**Figura 2.**  
Cotas inferiores y superiores.



**Figura 3.**

Flujo inicial.



**Figura 4.**

Flujo paramétrico máximo.



**Tabla 2**  
Construcción de un flujo paramétrico factible.

Etapa	Arco seleccionado	Etiqueta	Flujo resultante
1	(1, 2)	1: $(1, 4^+, 1, \lambda; [2/3, \infty))$	$(1, 2): \lambda; [2/3, \infty)$
		2: $(1, 1^+, \cdot, \lambda; [2/3, \infty))$	$(1, 3): 0; [2/3, \infty)$
		3: $(1, 2^+, 1, \frac{\lambda}{30} [2/3, 30) \cup [30, \infty))$	$(1, 4): 0; [2/3, \infty)$
		4: $(1, 2^+, 1, \lambda; [2/3, \infty))$	$(2, 3): 0; [2/3, \infty)$
			$(2, 4): \lambda; [2/3, \infty)$
			$(3, 4): 0; [2/3, \infty)$
			$(4, 1): \lambda; [2/3, \infty)$
2	(1, 3)	1: $(1, 4^+, 1, 4; [2/3, \infty))$	$(1, 2): \lambda; [2/3, \infty)$
		3: $(1, 1^+, \cdot, 4; [2/3, \infty))$	$(1, 3): 4; [2/3, \infty)$
		4: $(1, 3^+, 1, 4; [2/3, \infty))$	$(1, 4): 0; [2/3, \infty)$
			$(2, 3): 0; [2/3, \infty)$
			$(2, 4): \lambda; [2/3, \infty)$
			$(3, 4): 4; [2/3, \infty)$
			$(4, 1): 4+\lambda; [2/3, \infty)$
3	(2, 3)	1: $(1, 4^+, 1, \frac{6\lambda-3}{2} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty))$	$(1, 2): \frac{7\lambda-3}{2+\lambda} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty)$
		2: $(1, 1^+, 1, \frac{6\lambda-3}{2} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty))$	$(1, 3): 4; [2/3, \infty)$
		3: $(1, 2^+, \cdot, 2; [2/3, \infty))$	$(1, 4): 0; [2/3, \infty)$
		4: $(1, 3^+, 1, \frac{6\lambda-3}{2} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty))$	$(2, 3): \frac{6\lambda-3}{2} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty)$
			$(2, 4): \lambda; [2/3, \infty)$
			$(3, 4): \frac{6\lambda+1}{6} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty)$
			$(4, 1): \frac{7\lambda+1}{6+\lambda} [2/3, 5/6) \cup [5/6, \infty)$
4	(2, 3)	3: $(1, 2^+, \cdot, 5-6\lambda; [2/3, 5/6))$	$(1, 2): 2+\lambda; [5/6, \infty)$
			$(1, 3): 4; [5/6, \infty)$
			$(1, 4): 0; [5/6, \infty)$
			$(2, 3): 2; [5/6, \infty)$
			$(2, 4): \lambda; [5/6, \infty)$
			$(3, 4): 6; [5/6, \infty)$
			$(4, 1): 6+\lambda; [5/6, \infty)$
5	(2, 4)	1: $(1, 4^+, 1, \lambda; [5/6, \infty))$	$(1, 2): 2+2\lambda; [5/6, \infty)$
		2: $(1, 1^+, 1, \lambda; [5/6, \infty))$	$(1, 3): 4; [5/6, \infty)$
		3: $(1, 4^-, 1, \frac{\lambda}{1} [5/6, 1) \cup [1, \infty))$	$(1, 4): 0; [5/6, \infty)$
		4: $(1, 2^+, \cdot, \lambda; [5/6, \infty))$	$(2, 3): 2; [5/6, \infty)$
			$(2, 4): 2\lambda; [5/6, \infty)$
			$(3, 4): 6; [5/6, \infty)$
			$(4, 1): 6+2\lambda; [5/6, \infty)$

**Tabla 3**  
Construcción de un flujo paramétrico máximo.

Etapa	Etiqueta	Flujo resultante
1	1: $(1, \circ, \circ, \infty; [5/6, \infty))$	$(1, 2): \begin{matrix} 2+6\lambda & [5/6, 1) \\ 4+4\lambda & [1, \infty) \end{matrix}$
	2: $(1, 1^+, 1, 2+2\lambda; [5/6, \infty))$	$(1, 3): 4; [5/6, \infty)$
	3: $(1, 1^+, 1, -2+8\lambda; [5/6, \infty))$	$(2, 3): 2; [5/6, \infty)$
	4: $(1, 2^+, 1, \begin{matrix} 4\lambda & [5/6, 1) \\ 2+2\lambda & [1, \infty) \end{matrix}; [5/6, \infty))$	$(2, 4): \begin{matrix} 6\lambda & [5/6, 1) \\ 2+4\lambda & [1, \infty) \end{matrix}$
		$(3, 4): 6; [5/6, \infty)$
2	1: $(1, \circ, \circ, \infty; [5/6, \infty))$	$(1, 2): \begin{matrix} 2+6\lambda & [5/6, 1) \\ 4+4\lambda & [1, \infty) \end{matrix}$
	2: $(1, 1^+, 1, 2-2\lambda; [5/6, 1))$	$(1, 3): -1+6\lambda; [5/6, \infty)$
	3: $(1, 1^+, 1, -2+8\lambda; [5/6, \infty))$	$(2, 3): 2; [5/6, \infty)$
	4: $(1, 3^+, 1, -5+6\lambda; [5/6, \infty))$	$(2, 4): \begin{matrix} 6\lambda & [5/6, 1) \\ 2+4\lambda & [1, \infty) \end{matrix}$
		$(3, 4): 1+6\lambda; [5/6, \infty)$
3	1: $(1, \circ, \circ, \infty; [5/6, \infty))$	
	2: $(1, 1^+, 1, 2-2\lambda; [5/6, 1))$	
	3: $(1, 1^+, 1, 3+2\lambda; [5/6, \infty))$	

## 7. CONCLUSIONES

Se han obtenido condiciones necesarias y suficientes para la caracterización de circulaciones factibles y de flujo máximo cuando en la red las cotas inferiores y superiores sobre los arcos son funciones lineales de un parámetro.

Se han propuesto algoritmos de etiquetado para la construcción de dichas circulaciones factibles y flujo máximo.

Tales algoritmos tienen una complejidad de orden  $O(\tau^3 mn^3)$ . El algoritmo básico puede modificarse con objeto de mejorar su complejidad. En este sentido, se están considerando modificaciones en la fase de etiquetado que permitan asignar una única etiqueta por nodo, rebajando así la complejidad asociada a la fase de etiquetado a un orden  $O(\tau^2 mn^3)$ .

## 8. REFERENCIAS

- [1] **Ford, L.R. y Fulkerson, D.R.** (1962). *Flows in Networks*, Princeton, Princeton University Press.
- [2] **Gal, T.** (1979). *Postoptimal Analyses, Parametric Programming, and Related Topics*, New York, McGraw-Hill.
- [3] **Hamacher, H.W. y Foulds, L.R.** (1989). "Algorithms for Flows with Parametric Capacities". *ZOR, Methods and Models of Operations Research*, **33**, 21–37.
- [4] **Ruhe, G.** (1985). "Characterization of all optimal solutions and parametric maximal flows in networks". *Optimization*, **16**, 51–61.
- [5] **Edmonds, J. y Karp, R.M.** (1972). "Theoretical Improvements in Algorithmic Efficiency for Network Flow Problems". *Journal of the ACM*, **19**, 248–264.

## ENGLISH SUMMARY:

### CIRCULATIONS AND MAXIMUM FLOW WITH PARAMETRIC BOUNDS

H.I. Calvete and P. Mateo

## 1. INTRODUCTION

In parametric programming the behavior of the objective function and optimal solutions in dependence of modifications in the problem data are investigated. Being the problem  $\text{Max } Z = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$  subject to  $\{\mathbf{Ax} = \mathbf{b}(\lambda), \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \lambda \in [0, \Lambda]\}$ , from parametric linear programming, it is well known that  $Z_{\max}(\lambda)$  is a piecewise linear continuous and concave function. Moreover, given two breakpoints  $\lambda_k < \lambda_{k+1}$  and an optimal solution  $\mathbf{x}^*$  for  $\lambda^*$ ,  $\lambda_k < \lambda^* < \lambda_{k+1}$ ,  $\mathbf{x}^*$  is optimal over the whole closed interval  $[\lambda_k, \lambda_{k+1}]$  (see Gal (1979)).

Ruhe (1985) and Hamacher and Foulds (1989) apply two different approaches to the parametric maximum flow problem, usually called horizontal and vertical approach, respectively. These approaches are illustrated in Figure 1. The thick line shows the function  $Z(\lambda)$ , which approximates  $Z_{\max}(\lambda)$ , after two iterations. The arrow points out the direction in the algorithm progression.

In this paper, we study the problem of getting circulations and maximum flow on networks with lower and upper bounds when these bounds are parametric linear functions. The existence of parametric circulations and feasible parametric flows are characterized. Necessary and sufficient conditions for the optimality of parametric flows are provided. Finally, algorithms based on labeling techniques for their computation are proposed. These algorithms follow the approach of Hamacher and Foulds.

## 2. PROBLEM FORMULATION AND FEASIBILITY THEOREMS

Let  $G = [N, A]$  be a directed network, consisting of a collection of nodes  $N = \{1, \dots, n\}$  together with a set of arcs  $A = \{(i, j): 1, j \in N\}$ . Suppose that each arc  $(i, j)$  has associated with it a lower parametric bound  $l_{ij}(\lambda) = a_{ij} + \lambda b_{ij}$  and an upper parametric bound  $c_{ij}(\lambda) = \bar{a}_{ij} + \lambda \bar{b}_{ij}$ . The range of  $\lambda$  is given by the interval  $[\lambda_1, \lambda_2]$  in which  $0 \leq l_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda), \forall (i, j) \in A$ .

### Definition 2.1

A parametric flow on arc  $(i, j)$  is a piecewise linear function  $f_{ij}(\lambda)$  defined on  $[\lambda_1, \lambda_2]$ , such that  $l_{ij}(\lambda) \leq f_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda), \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ .

### Definition 2.2

A parametric circulation in the network  $G$  is a function  $f: A \times [\lambda_1, \lambda_2] \rightarrow \mathbb{R}^+$  mapping  $((i, j), \lambda)$  into  $f_{ij}(\lambda)$ , that verifies for each  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ ,

$$(2.1) \quad \sum_{(i,j) \in A} f_{ij}(\lambda) - \sum_{(j,i) \in A} f_{ji}(\lambda) = 0 \quad \forall i \in N$$

$$(2.2) \quad 0(\lambda) \leq l_{ij}(\lambda) \leq f_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda) \quad \forall (i, j) \in A$$

where  $0(\lambda) = 0, \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ .

### Theorem 2.1

A necessary and sufficient condition for a parametric circulation on  $[\lambda_1, \lambda_2]$  to exist is that

$$(2.3) \quad c(X, \bar{X}; \lambda) \geq l(\bar{X}, X; \lambda)$$

hold  $\forall X \subset N$  and  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ .

### Definition 2.3

Let 1 and  $n$  be two distinguished nodes of  $N$ . A parametric flow from 1 to  $n$  in  $G$  is a function  $f: A \times [\lambda_1, \lambda_2] \rightarrow \mathbb{R}^+$  satisfying,  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ ,

$$(2.4) \quad \sum_{(i,j) \in A} f_{ij}(\lambda) - \sum_{(j,i) \in A} f_{ji}(\lambda) = \begin{cases} v(\lambda) & i = 1 \\ 0 & i \neq 1, n \\ -v(\lambda) & i = n \end{cases}$$

$$(2.5) \quad 0(\lambda) \leq l_{ij}(\lambda) \leq f_{ij}(\lambda) \leq c_{ij}(\lambda) \quad \forall (i, j) \in A$$

The piecewise linear function  $v(\lambda)$  is the value function of parametric flow  $f$ .

The maximum parametric flow problem is to find a parametric flow with value  $v^*(\lambda)$  such that  $v^*(\lambda) \geq v(\lambda)$ ,  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$  and  $\forall v(\lambda)$  value function of a parametric flow.

### Theorem 2.2

A necessary and sufficient condition for a feasible parametric flow from 1 to  $n$  on  $[\lambda_1, \lambda_2]$  to exist is that

$$(2.6) \quad c(X, \overline{X}; \lambda) \geq l(\overline{X}, X; \lambda)$$

hold  $\forall X \subset N$  such that either  $\{1, n\} \subset X$  or  $\{1, n\} \subset \overline{X}$ , and  $\forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$ .

## 3. CONSTRUCTION OF A FEASIBLE CIRCULATION

The algorithm consists of two stages: a labeling process and a flow change. The computation progresses by a sequence of such stages until it terminates either constructing a feasible circulation or proving that there is no feasible circulation.

The algorithm may be started with any  $f$  that satisfies the equations (2.1), say  $f \equiv 0$ . We proceed to assign labels to nodes  $j$  of the network, a label having one of the two forms  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$  or  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$ , where  $p_j$  is an index which numbers the successive labels of node  $j$ ;  $i$  is the labeled node from  $j$  is labeled; the sign “+” indicates that the arc  $(i, j)$  is used to label  $j$ , and the sign “−” indicates that the arc used is  $(j, i)$ ;  $q_i$  is the number of node  $i$  label used to evaluate the function  $\varepsilon_j(\lambda)$ ; and, finally,  $\varepsilon_j(\lambda)$  is a function not null over a set  $I_j \subset [\lambda_1, \lambda_2]$ , to be defined later.

During the algorithm a node is considered to be in one of the three states: labeled and completely scanned, labeled and not completely scanned, and unlabeled.

Let be  $(k, h)$  an arc for which one of the bound conditions (2.2) is violated. Then, there are values of the parameter  $\lambda$  such that, either

- a)  $l_{kh}(\lambda) > f_{kh}(\lambda)$  or
- b)  $f_{kh}(\lambda) > c_{kh}(\lambda)$ .

**Case a):** Let  $I^* = \{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]: l_{kh}(\lambda) > f_{kh}(\lambda)\}$ . Start a labeling process assigning to node  $h$  the label  $(1, k^+, \bullet, \varepsilon_h(\lambda); I_h)$  where

$$\varepsilon_h(\lambda) = l_{kh}(\lambda) - f_{kh}(\lambda), \quad I_h = I^*$$

Then, search for a path from  $h$  to  $k$  using the labeling rules. If node  $k$  is labeled, stop the labeling process, set  $\varepsilon_k(\lambda) = 0$  for  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_k$ , and go to the flow change rules.

Having finished the flow change process, namely, when  $h$  has been reached, add  $\varepsilon_k(\lambda)$  to the flow on the arc  $(k, h)$ .

**Case b):** Let  $I^* = \{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]: f_{kh}(\lambda) > c_{kh}(\lambda)\}$ . Start a labeling process assigning to node  $k$  the label  $(1, h^-, \bullet, \varepsilon_k(\lambda); I_k)$  where

$$\varepsilon_k(\lambda) = f_{kh}(\lambda) - c_{kh}(\lambda), \quad I_k = I^*$$

Then, search for a path from  $k$  to  $h$  using the labeling rules. If node  $h$  is labeled, stop the labeling process, set  $\varepsilon_h(\lambda) = 0$  for  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_h$ , and go the flow change rules interchanging  $k$  and  $h$ .

Having finished the flow change process, namely, when  $k$  has been reached, subtract  $\varepsilon_h(\lambda)$  to the flow on the arc  $(k, h)$ .

The general step is repeated for the arc  $(k, h)$ , discarding the old labels each time, until it verifies the conditions (2.2). The process is repeated until every arc in the network verifies such conditions.

In the above process, if we find a set  $I$  such that  $\forall \lambda \in I$  there is no possibility to reach  $k$  from  $h$  (or  $h$  from  $k$ ) then there is not a feasible circulation  $\forall \lambda \in I$ .

### Labeling rules

Select any labeled node  $i$  with some unscanned label. Suppose it is  $(p_i, g^\pm, q_g, \varepsilon_i(\lambda); I_i)$ , then

- (1) If  $(i, j)$  is an arc with  $f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda) \forall \lambda \in I'$  and  $I' \cap I_i \neq \emptyset$ , assign  $j$  the label  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j = I' \cap I_i)$ , where  $p_j$  will be 1 if this is the first label of this node, otherwise the index of the latest one will be increased by 1;  $q_i$  is the  $p_i$  index of the label that is being scanned and whose  $\varepsilon_i(\lambda)$  is used to evaluate the function  $\varepsilon_j(\lambda)$ ; and  $\varepsilon_j(\lambda) = \min\{\varepsilon_i(\lambda), c_{ij}(\lambda) - f_{ij}(\lambda)\}$  evaluate for  $\lambda \in I' \cap I_i$ .
- (2) If  $(j, i)$  is an arc with  $f_{ji}(\lambda) > l_{ji}(\lambda) \forall \lambda \in I'$  and  $I' \cap I_i \neq \emptyset$ , assign  $j$  the label  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j = I' \cap I_i)$ , where  $p_j$  and  $q_i$  are defined as in (1), and  $\varepsilon_j(\lambda) = \min\{\varepsilon_i(\lambda), f_{ji}(\lambda) - l_{ji}(\lambda)\}$  evaluate for  $\lambda \in I' \cap I_i$ .

If in the process of labeling node  $j$ ,  $I_j$  is included in the fifth coordinate of any label of the same node, then this labeling will not be executed.

This step is repeated for every unscanned label of node  $i$ . After this, node  $i$  will be labeled and completely scanned. If eventually node  $i$  receives a new label their status will change to labeled and not completely scanned.

Select a new node not completely scanned and repeat the previous step.

### Flow change rules

At this time, the node  $k$  has been labeled. If  $k$  is labeled  $(1, j^+, q_j, \varepsilon_k(\lambda); I_k)$ , replace  $f_{jk}(\lambda)$  by  $f_{jk}(\lambda) + \varepsilon_k(\lambda)$ ; if  $k$  is labeled  $(1, j^-, q_j, \varepsilon_k(\lambda); I_k)$ , replace  $f_{kj}(\lambda)$  by  $f_{kj}(\lambda) - \varepsilon_k(\lambda)$ .

In either case, next turn attention to node  $j$ . Select the label whose  $p_j$  index agrees with the  $q_j$  index of node  $k$  label. In general, if  $j$  is labeled  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$ , replace  $f_{ij}(\lambda)$  by  $f_{ij}(\lambda) + \varepsilon_k(\lambda)$ , and if labeled  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$  replace  $f_{ji}(\lambda)$  by  $f_{ji}(\lambda) - \varepsilon_k(\lambda)$ , and go on to node  $i$ . Stop the flow change when node  $h$  is reached, and go back to general procedure.

## 4. CHARACTERIZATION OF A MAXIMUM PARAMETRIC FLOW

It will be assumed that a feasible parametric flow from 1 to  $n$  exists on the not empty interval  $[\lambda_1, \lambda_2]$ .

**Definition 4.1**

A  $m$ -cut  $\mathbf{X} = ((X_1, \bar{X}_1), \dots, (X_m, \bar{X}_m); I_1, \dots, I_m)$  is a set of  $m$  cuts separating 1 and  $n$ ,  $(X_1, \bar{X}_1), \dots, (X_m, \bar{X}_m)$ , each of them associated to a set of parameters values  $I_1, \dots, I_m$ , which are a partition of  $[\lambda_1, \lambda_2]$ .

Let  $\mathbf{1}_A(\bullet)$  be the indicator function of  $A$ . The capacity of  $\mathbf{X}$  is the following piecewise linear function

$$\mathbb{C}(\lambda) = \sum_{r=1}^m \left( \sum_{(i,j) \in (X_r, \bar{X}_r)} c_{ij}(\lambda) - \sum_{(j,i) \in (\bar{X}_r, X_r)} l_{ji}(\lambda) \right) \mathbf{1}_{I_r}(\lambda)$$

**Lemma**

Let  $f$  be a feasible parametric flow from 1 to  $n$  of value  $v(\lambda)$  and let  $\mathbf{X}$  be a  $m$ -cut of capacity  $\mathbb{C}(\lambda)$ , then

$$v(\lambda) \leq \mathbb{C}(\lambda), \quad \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$$

**Theorem 4.1:** *Theorem of maximum parametric flow – minimum  $m$ -cut.*

The parametric flow  $f$  of value  $v(\lambda)$  is a maximum parametric flow if and only if there exist  $m$  and a  $m$ -cut of capacity  $\mathbb{C}(\lambda)$  such that

$$(4.1) \quad v(\lambda) = \mathbb{C}(\lambda), \quad \forall \lambda \in [\lambda_1, \lambda_2]$$

**Proof**

The sufficiency is a consequence of lemma. In order to prove the necessity, taking a maximum parametric flow  $f$  of value  $v(\lambda)$ , a  $m$ -cut is constructed following the algorithm described in table 1. In short,  $[\lambda_1, \lambda_2]$  is subdivided in sets  $I_r$  which are associated to  $X_r$ , the set of reachable nodes from node 1 by a path that includes arcs  $(i, j)$  such that either  $f_{ij}(\lambda) < c_{ij}(\lambda)$  or  $f_{ij}(\lambda) > l_{ij}(\lambda)$ ,  $\lambda \in I_r$ .



## 5. CONSTRUCTION OF A MAXIMUM PARAMETRIC FLOW

The following algorithm is based in labeling and changing flow as the one proposed in section 3. To start the computation an initial feasible parametric flow  $f$  is needed.

### Labeling routine

The node 1 receives the label  $(1, \bullet, \bullet, \infty; [\lambda_1, \lambda_2])$ ; the node 1 is now labeled and unscanned, all other nodes are unlabeled.

Select any labeled node  $i$  with any unscanned label. Suppose this is  $(p_i, g^\pm, q_g, \varepsilon_i(\lambda); I_i)$ . Apply the labeling rules developed in section 3 to this node.

Repeat the process until either the node  $n$  is labeled, or until no more labels can be assigned and  $n$  is unlabeled. If node  $n$  is labeled, stop the labeling routine and go to flow change routine; otherwise, the algorithm has terminated, and the current parametric flow is a maximum parametric flow.

### Flow change routine

The node  $n$  has been labeled. Set  $\varepsilon_n(\lambda) = 0$  for  $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \setminus I_n$ .

If  $n$  is labeled  $(1, j^+, q_j, \varepsilon_n(\lambda); I_n)$ , replace  $f_{jn}(\lambda)$  by  $f_{jn}(\lambda) + \varepsilon_n(\lambda)$ ; if  $n$  is labeled  $(1, j^-, q_j, \varepsilon_n(\lambda); I_n)$ , replace  $f_{nj}(\lambda)$  by  $f_{nj}(\lambda) - \varepsilon_n(\lambda)$ .

In either case, next turn attention to node  $j$ . Select the label whose  $p_j$  index agrees with the  $q_j$  index of node  $n$  label. In general, if  $j$  is labeled  $(p_j, i^+, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$ , replace  $f_{ij}(\lambda)$  by  $f_{ij}(\lambda) + \varepsilon_n(\lambda)$ , and if labeled  $(p_j, i^-, q_i, \varepsilon_j(\lambda); I_j)$  replace  $f_{ji}(\lambda)$  by  $f_{ji}(\lambda) - \varepsilon_n(\lambda)$ , and go on to node  $i$ . Stop the flow change when node 1 is reached, discard the old labels, and go to labeling routine.

### Remark 5.1

In order to start the algorithm, an initial feasible parametric flow can be constructed by applying the algorithm of section 3 to the extended network  $G^* = [N, A^*]$ , obtained from  $G$  by adding the arcs  $(1, n)$  and  $(n, 1)$  with lower and upper bounds 0 and  $\infty$ , respectively.

### Computational complexity

In the worst case, the number of flow augmenting paths is bounded by  $O(\tau mn)$ , where  $\tau$  is the number of breakpoints,  $m$  is the number of arcs and  $n$

is the number of nodes. The complexity of labeling routine has order  $O(\tau^2 n^2)$ . As a whole, the order of complexity is  $O(\tau^3 mn^3)$ .

## 6. ILLUSTRATIVE CASE

A maximum parametric flow is computed for the network of figure 2, where lower and upper bounds are shown on arcs.

An initial parametric flow is computed by applying the algorithm of section 3. In table 2 the successive labelings are shown together with flows on different iterations.

In table 3 the labelings and flows obtained from applying the algorithm of section 5 are shown. The maximum parametric flow is shown in figure 4.

## SECCIÓ DOCENT I PROBLEMES

La introducció de la nova “SECCIÓ DOCENT I PROBLEMES” a la revista QÜESTIÓ es fa amb l'objectiu d'incloure una secció on es publiquen articles de caire docent, difícilment publicables en revistes de recerca. Alhora es continua amb la antiga secció de problemes. A cada número de QÜESTIÓ s'inclourà d'un a tres problemes i les solucions es donaran en el número següent.

Els lectors poden, si ho volen, proposar problemes amb les solucions pertinents i enviar-los a QÜESTIÓ, que farà una selecció i en publicarà els més adequats, fent la corresponent referència a l'autor.

També seran ben rebudes solucions alternatives a les propostes fetes per l'autor dels problemes; l'editorial es reservarà, però, el dret a publicar-les.



## PROBLEMES PROPOSATS

### PROBLEMA N° 44

Dado el modelo lineal

$$Y_i = \alpha + \beta X_i,$$

con las observaciones

$Y_i$	$X_i$
10	1
35	3
45	5

se sabe que la matriz de varianzas-covarianzas de las perturbaciones es

$$\sigma^2 \Omega = \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & 0.6 & 0.2 \\ 0.6 & 0.8 & 0.6 \\ 0.2 & 0.6 & 0.9 \end{pmatrix}$$

- (a) Si  $e_1, e_2$  y  $e_3$  son las componentes del vector de errores, ¿son estocásticamente independientes?
- (b) Estimar los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  por MCO (mínimos cuadrados ordinarios).
- (c) Estimar el parámetro  $\sigma^2$  y la matriz de varianzas-covarianzas de  $\hat{\beta}_{\text{MCO}} = (\alpha, \beta)'$  bajo las hipótesis del modelo lineal básico.
- (d) Obtener una estimación insesgada de  $\sigma^2$  utilizando los residuos MCO.
- (e) Obtener una estimación insesgada de la matriz de varianzas-covarianzas de los estimadores obtenidos en el apartado (b).
- (f) Estimar  $\alpha$  y  $\beta$  por MCG (mínimos cuadrados generalizados).
- (g) Estimar  $\sigma^2$  y la matriz de varianzas-covarianzas de los estimadores obtenidos en el apartado (f) utilizando los resultados de dicho apartado.

Pedro Sánchez

Universitat de Barcelona

#### PROBLEMA N° 45

Considerar el siguiente esquema de muestreo llamado “muestreo sistemático circular”:

- a) Se selecciona una unidad “ $i$ ” de la población  $U = \{1, 2, \dots, i, \dots, N\}$  con probabilidad común  $1/N$ .
- b) La muestra consta de las unidades  $(i + jk) \bmod(N)$  para  $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ .

Usualmente  $k$  es  $[N/n]$  ó  $[N/n] + 1$ , pero tomemos  $k = 1$ . Comprobar que la varianza de este esquema puede ser menor que la del muestreo aleatorio simple sin reemplazamiento con la media muestral como estimador común a ambos diseños, reordenando las unidades en la población  $U$ .

M. Ruiz Espejo

Universidad Complutense de Madrid

#### PROBLEMA N° 46

Es bien sabido que con muestreo sistemático ordinario no se puede estimar insesgadamente la varianza del estimador media muestral. Gautschi (1957, *Ann. Math. Statist.*) fue quien generalizó el muestreo sistemático a muestreo sistemático de múltiple arranque; en el muestreo de doble arranque

- a) Se seleccionan dos unidades de arranque por muestreo aleatorio simple sin reemplazamiento entre las primeras  $2k$  unidades de la población  $U = \{1, 2, \dots, N\}$ . Sean estas unidades de arranque “ $i$ ” y “ $j$ ”,  $1 \leq i < j \leq 2k$ , siendo  $N = nk$ .
- b) La muestra sistemática de doble arranque  $s_{ij}$  está compuesta por las unidades  $i, i + 2k, i + 4k, \dots$  y  $j, j + 2k, j + 4k, \dots$  hasta  $N$  en ambos casos, y por tanto su tamaño muestral efectivo es  $n$ .

Proponer un estimador insesgado de la varianza de la media muestral  $\bar{y}_{ij}$  que es insesgada para la media poblacional  $\bar{y}$  (como caso particular de muestreo por conglomerados).

M. Ruiz Espejo

Universidad Complutense de Madrid

# A MATHEMATICAL MODEL FOR THE LOTTERY

M. S. NIKULIN\*

(Italian *lotteria*, from Hlot — meaning lot or destiny)

According to the Great Soviet Encyclopaedia (II edition,  $\approx 60^{\text{e}}$  years)

*“A lottery is a financial transaction which consists of the issue, with the permission of the corresponding state department, free sale of the lottery’s winning tickets, followed by the drawing and delivery of the winnings (in money or in valuable items) to the holders of the winning tickets. In the USSR, the arrangement of lotteries by social institutions is permitted only if authorized by The Council of Ministers of USSR.*

*In capitalistic countries lotteries are organized by private persons or private organizations and serve as a source of financial gain for adroit business-men —organizers of the lotteries, appropriating a bigger share of the received funds by various machinations and abuses”.*

According to the American Encyclopaedia:

*“Lotteries are generally schemes for distributing prizes by lot or chance. In their simplest form lotteries consist of the sale of tickets bearing different numbers, duplicate numbers being placed in a receptacle, such as a hat or a drum, from which numbers are drawn to establish the prize winners, being those holding the tickets with those corresponding numbers.”*

From “Educated Guessing” Samuel Kotz (1983, Marcel Dekker):

*“A lottery is a game of chance with low stakes and potentially high winnings, which account for the widespread appeal of this type of gambling. In its simplest form, a player bets on a number and wins if the state also selects that number. While we usually view a lottery as a game, many applications exist in the real world. For example, insurance is a lottery with the premium of a policy playing the role of the value of a lottery ticket”.*

---

\*Pr. Mikhaïl Nikulin. Université Bordeaux 2. Mathématiques Stochastiques. BP26. F-33076 Bordeaux Cedex.

Gambling in the form of lotteries, dates from the earliest times. The Roman emperors, Nero and Augustus, used them to distribute the slaves. In Europe, one of the first lotteries was apparently in **Florence** in 1530, although little historical information remains. One of the most famous lotteries is one in **Genoa** which has continued since its inception at the beginning of the 17th Century, if not somewhat earlier.

The heyday of **Genoa** was in the 11th Century —the epoch of the Crusades. During the 11th and 12th Centuries **Genoa** was a powerful seafaring city-state. The power in **Genoa** of the 13th Century rested with the great merchants and the land owners, involved in international commerce.

But in the early 14th Century **Venice** already dominated the trade of the **Adriatic** and possessed many colonies throughout the Near East. **Genoa**, being at that time at the height of her power, challenged the position of **Venice** in eastern trade. Between 1378 and 1381 the War of **Chioggia** was fought between **Venice** and **Genoa**. **Genoa** was defeated and never regained a dominant trading position.

In the latter 15th Century **Genoa** was a *bone of contention* between **France** and **Milan**. **Genoa**, itself, had colonies in the Crimea (Feodossia, Sudak, Balaklava) from which it extracted its due. However, **Genoa's** "right" to govern Feodossia was received from Mangu Khan, one of the chiefs of the **Golden Horde**. There were other colonies **Genoa** conquered solely by itself. Since **Genoa** was dependent it had been obliged to take part in the battle of Russia against the Tatars (the Battle of Kulikovo) on the side of the Tatars. Russia had been under the sovereignty of the Tatars for a long time when Dmitri Donskoi, who reigned in **Moscow**, began the conflict with the Tatars. On September 8, 1380, Dmitri defeated the Tatar armies. This victory was in no sense decisive, but Kulikovo broke the prestige of the Tatar armies and thus it marked the turning point. **Genoa** was in contact with **Byzantium** which guaranteed it access to the straits of the Black Sea. This was very important for **Genoa**. In 1453 **Byzantium** (the Eastern Empire) fell as a consequence of the siege and capture of **Constantinople** by Mohammed the Conqueror: this ended a thousand year rule by the Byzantine Empire. The colonies of **Genoa** on the Black Sea were usurped and smashed. **Genoa** never recovered its previous position as a seafaring city-state after this, although the Genoese merchants tried to transfer their trade to the Atlantic Ocean. The decline of sea trade had as a consequence the decline of shipbuilding. **Genoa** began to develop the production of a silk, but soon resorted to another type of business activity; that of banking transactions. Somewhere between the fifteenth and sixteenth centuries **Genoa** became an international financial center.



In 1528, however, the great Genoese admiral, Andrea Doria, re-established the republic, with a pronounced aristocratic constitution. The republic was governed by The Great Council. The five members of the Council were to be elected each year from 90 candidates. Naturally, the people of **Genoa** were interested in the results of this election. They forecasted and bet. It is possible to suppose that the financiers of **Genoa** saw in this interest a source of possible gain and received with the help of their banks the varied stakes from all who were willing, in exchange for a promise to pay the fortunate forecaster a very large sum of money. Of course, an unfortunate forecaster did not receive his money back. However, the financiers soon understood that it wasn't convenient to link together their new source of funds solely to the election in the Great Council. Profits were limited as the elections were held but once a year and the well informed populace could accurately predict the results. Prediction could be accurate because the forecasters were closely connected with the voters and therefore might act assuredly, knowing beforehand all, or certain of the names, of the future members of the Great Council.

The financiers did not need the election itself, but only the model of the election, which might then be repeated often enough (for example, monthly) to guarantee a defense for the banks against the excessively well informed forecasters. It is precisely this model that was used to establish the **famous Genoese Lottery**, which was expanded, little by little, in many countries of Europe and existed in Austria and Italy until 1914.

The returns from the lotteries were so large, that the governments were interested and began to take them under their control (a form of "nationalization"). The Genoese Republic itself took control of the Lottery as early as 1620.

The passionate desire for wealth associated with the Genoese lottery was a constant source of misfortune, ruin and crime. In the beginning of 19th century Laplace spoke out against the organization of the lotteries. He underlined the immoral side of Genoese lotteries as the means of robbing the poorest stratum of society, those not able through lack of education and absence of probability intuition, to understand that adroit business-men used this gambling for the robbery of poor men. Because the stake being lost by a poor man is equal in form only to the stake being lost by a rich man! These protests were supported in several countries and so in the 19th Century the organization of Genoese lotteries were prohibited in England and in France.

How was the Genoese lottery organized? First at all, it is necessary to underline that it was the model of the election in the Great Council, which was mentioned earlier. Instead of 90 candidates for five vacant places there were 90 numbers from 1 to 90. Each **drawing** imitated the election of the five members of the Great Council. Namely, from 90 numbers were extracted at random

(without replacement) five numbers. According to the rules of the Lottery one can bet a stake on any one of the numbers from 1 to 90, or on any set of two, three, four of five numbers. In each of these five possible cases a player has a gain if and only if all beforehand called numbers belong to the set of five numbers which were extracted at random under the corresponding drawing. For example, if you bet on two numbers 1 and 90, you win only if 1 and 90 belong to the set of five numbers extracted by chance. Otherwise you lose and the stake passes to the organizers of the lottery. A winning player receives a lot more than his stake. In addition the gain increases abruptly with the number of numbers on which one bets.

The table below shows how the gains depend on quantity of numbers on which stakes were made.

quantity of numbers on which player bets	gain obtained by player in case of winning (stake is taken equal to 1)
1	15
2	270
3	5 500
4	75 000
5	1 000 000

The reasoning about the possible issues for players in The Genoese lottery and the rules of constructions of this reasoning were of interest to many people. The majority wanted “a gambling system to win for sure”. For example, the Soviet newspaper “Soviet Sport” in February 1974 published a report with extracts from letters of the contemporary “exploiters of the system” in the Soviet “Sport-lottery” game (the Russian version of the famous Lotto 6/49). The report quotes the management of “Sport-Lottery” as confirming that this system exists and apparently consists of three points:

- 1) *the regular purchase of lottery tickets;*
- 2) *careful filling out of the ticket;*
- 3) *to have enough patience to wait for your winnings.*

It is clear that the organizers of the Genoese lottery wanted their system to maximize profits. Thus, there was “the requirements of the practice” which comprised not only the needs of the lottery but generally all mass games of chance. It was necessary to construct a mathematical model describing the rules and situations arising in the game and permitting planning through calculation of

returns, losses etc. The search for this model continued up to 18th century. At the beginning much effort was expended on the search for deterministic models. The failures of this approach stimulated a revision of all mathematical models used in the financial transactions and business of organizing lotteries. The most promising approach was connected with “calculating the possible chances”. In the contemporary language of probability we could call this approach the modeling of the game in terms of the probability space of equally likely elementary events.

Thus, for the satisfaction of requirements of the gaming practice, it was necessary to have a new mathematical mechanism. The search for this model resulted in the creation of the theory of probability in 17th and 18th centuries.

A probability model of the Genoese lottery can be expressed in terms of drawing balls from an urn. Here is one **Model**.

An urn contains  $n$  balls ( $n = 90$ ), of which  $m$  are white ( $m = 5$ ) and  $n - m$  are black ( $n - m = 85$ ). From the urn  $k$  balls ( $k \leq m$ ) are drawn “at random” ( $k$  is the quantity of numbers on which one bets,  $k = 1, 2, 3, 4, 5$ ). If all  $k$  drawn balls are white, then a gambler is a winner, otherwise he loses. It is assumed that each individual ball is equally likely to be drawn, and hence there are  $\binom{n}{k}$  different ways to choose  $k$  balls from the urn. The term “to draw at random” means that all possible ways to draw  $k$  balls from the urn are equally likely; it means that the probability that  $k$  specified balls will be chosen is

$$(1) \quad \frac{1}{\binom{n}{k}}.$$

It is evident that the number of favorable cases is  $\binom{m}{k}$ . Thus the required probability of winning when one bets on  $k$  white balls will be

$$(2) \quad P_k = \frac{\binom{m}{k}}{\binom{n}{k}} = \frac{m(m-1)(m-2) \cdots (m-k+1)}{n(n-1)(n-2) \cdots (n-k+1)}, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

If  $n = 90$ ,  $m = 5$  we obtain the probability distribution:

$$(3) \quad$$

$k$	1	2	3	4	5
$P_k$	$\frac{1}{18}$	$\frac{2}{801}$	$\frac{1}{11748}$	$\frac{4}{511038}$	$\frac{1}{43949268}$

(see, for example, Faddeev, Nikulin, Sokolovsky, 1989).

Let  $X_k$  be a random variable such that

$$(4) \quad X_k = \begin{cases} 1, & \text{if a player wins (all } k \text{ drawn balls are white),} \\ 0, & \text{if a player loses.} \end{cases}$$

Taking the basic bet per trial as the unit and denoting by  $g_k$  the gain of the player received in the case of his winning, the “returns” of the player is the random variable  $Y_k$ :

$$(5) \quad Y_k = g_k X_k - 1 = \begin{cases} -1, & \text{in the case of losing,} \\ g_k - 1, & \text{in the case of winning.} \end{cases}$$

It is evident that the expectation and the variance of  $K_k$  are

$$(6) \quad E X_k = P \{X_k = 1\} = P_k \quad \text{and} \quad \text{Var } X_k = P_k(1 - P_k),$$

and hence the expectation and the variance of the returns are

$$(7) \quad m_k = E Y_k = g_k P_k - 1$$

and

$$(8) \quad v_k = \text{Var } Y_k = g_k^2 P_k(1 - P_k), \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

In particular, if  $n = 90$  and  $m = 5$ , then  $m_k$  and  $v_k$  have the values given in the table:

$$(9) \quad \begin{array}{c|ccccc} k & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \hline m_k & -\frac{1}{6} & -\frac{29}{89} & -\frac{1562}{2937} & -\frac{72673}{85173} & -\frac{10737317}{10987317} \\ \hline v_k & \frac{425}{36} & \frac{1438200}{7921} & & & \end{array}$$

It is interesting to note that all  $m_k$  are negative!

Suppose that  $N_k$  players take part in the lottery independently of each other, and they bet same stake (equal to 1) on  $k$  balls; let  $X_{ki}$  be the random variable,

$$(10) \quad X_{ki} = \begin{cases} 1, & \text{if } i\text{-th player wins (all } k \text{ drawn balls are white),} \\ 0, & \text{if } i\text{-th player loses, } 1 \leq i \leq N_k. \end{cases}$$

Let  $Y_{ki}$  be the random variable representing the return of the  $i$ -the player. Then the statistic

$$(11) \quad G_k = Y_{k1} + Y_{k2} + \dots + Y_{kN_k}$$

represents the total return of all  $N_k$  players in one trial, bet on  $k$  balls. It is evident that

$$(12) \quad G_k = g_k \mu_k - N_k,$$

where the statistic

$$(13) \quad \mu_k = X_{k1} + X_{k2} + \cdots + X_{kN_k}$$

has the Binomial distribution  $B(N_k, P_k)$  with the parameters  $N_k$  and  $P_k$ . Hence, if  $N_k \rightarrow \infty$  then according to the Theorem of Bernouilli about the law of large numbers, the **mean return**

$$(14) \quad \frac{G_k}{N_k} = \frac{g_k \mu_k}{N_k} - 1$$

converges in probability to

$$(15) \quad m_k = g_k P_k - 1 < 0.$$

Moreover, since the event  $\{G_k \leq x\}$  can occur if and only if the event

$$(16) \quad \left\{ \mu_k \leq \frac{x + N_k}{g_k} \right\}$$

occurs, then if  $N_k \rightarrow \infty$ , from the de Moivre-Laplace theorem, it follows that

$$(17) \quad P\{G_k \leq x\} = \Phi\left(\frac{\frac{x + N_k}{g_k} - N_k P_k}{\sqrt{N_k P_k (1 - P_k)}}\right) + o(1),$$

i.e., if we choose  $x$  such that  $(x + N_k)/g_k$  is an integer, we obtain one approximation according to which (with the correction on the continuity)

$$(18) \quad P\{G_k \leq x\} \cong \Phi\left(\frac{x + \frac{g_k}{2} - N_k m_k}{\sqrt{N_k v_k}}\right),$$

where  $m_k$  and  $v_k$  are given by (8). In particular, if  $x = 0$  and  $N_k/\mu_k$  is an integer, then (18) implies that

$$(19) \quad P\{G_k \leq 0\} \cong \Phi\left(\frac{g_k - 2N_k m_k}{2\sqrt{N_k v_k}}\right), \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

For example,

$$(20) \quad P\{G_1 \leq 0\} \cong \Phi\left(\frac{45 + N_1}{5\sqrt{17N_1}}\right).$$

From (19) it follows immediately, that the organizers of the lottery will have “a **guaranteed return**” only if there are many players!

Let us consider now the question of a possible “gambling system to win” with certainty. Let us suppose that one player at times  $t = 1, 2, \dots$ , where  $t$  is a number of trial of the lottery, bets per trial with the number  $k$  the stake  $S_{k,t}$  on  $k$  balls and he wants to win the sum  $h$  and to cover his expenses  $E_{k,t}$ , accumulated to the  $t$ -th trial. It is clear that he will achieve his goal, if in the  $t$ -th trial he bets a stake  $S_{k,t}$ , which satisfies the equation

$$(21) \quad g_k S_{k,t} = S_{k,t} + E_{k,t} + h,$$

i.e., if

$$(22) \quad S_{k,t} = \frac{E_{k,t} + h}{g_k - 1},$$

and if the player wins (!) in this trial. If he loses then it is natural to put

$$(23) \quad \begin{cases} E_{k,t+1} = E_{k,t} + S_{k,t}, \\ E_{k,1} = 0, \end{cases}$$

and to determine the value of the new stake  $S_{k,t+1}$  in the next trial by

$$(24) \quad S_{k,t+1} = \frac{E_{k,t+1} + h}{g_k - 1}.$$

It is easily to verify that

$$(25) \quad S_{k,t} = h \frac{g_k^{t-1}}{(g_k - 1)^t}$$

and

$$(26) \quad E_{k,t} = h \left[ \left( \frac{g_k}{g_k - 1} \right)^{t-1} \right], \quad t = 1, 2, \dots$$

For example, if  $k = 1$ , then from (25) and (26) it follows that

$$(27) \quad S_{1,t} = \frac{h}{14} \left( \frac{15}{14} \right)^{t-1}, \quad E_{1,t} = h \left[ \left( \frac{15}{14} \right)^{t-1} \right], \quad t = 1, 2, \dots,$$

and one can remark that the variables  $S_{1,t}$  and  $E_{1,t}$  increase very quickly. Under these tactics the player will receive his return  $h$  in the trial with the number  $T = t$  ( $T$  is a random variable) with the probability

$$(28) \quad P\{T = t\} = P_k(1 - P_k)^{t-1}, \quad t = 1, 2, \dots$$

where  $P_k$  is the probability of winning in an individual trial.

Hence, as  $t \longrightarrow \infty$ , then

$$(29) \quad \mathbf{P}\{T \geq t\} = \sum_{i=t}^{\infty} P_k (1 - P_k)^{i-1} = (1 - P_k)^{t-1} \longrightarrow 0,$$

from which it follows that

$$(30) \quad \mathbf{P}\{T < \infty\} = 1,$$

i.e., with the probability 1 the player will achieve his goal for the finite number of trials (1), moreover

$$(31) \quad \mathbf{E} T = \frac{1}{P_k} < \infty,$$

since  $P_k > 0$ , and

$$(32) \quad \mathbf{Var} T = \frac{1 - P_k}{P_k^2}.$$

In particular, if we put  $k = 1$ ,  $n = 90$  and  $m = 5$ , then in this case we obtain

$$(33) \quad P_k = P_1 = \frac{1}{18}, \quad \mathbf{P}\{T \geq t\} = \left(1 - \frac{1}{18}\right)^{t-1},$$

$$(34) \quad \mathbf{E} T = 18 \quad \text{and} \quad \mathbf{Var} T = 306.$$

We give a table (35) of some values of the probability  $\mathbf{P}\{T \geq t\}$  and the function  $E_{1,t}$  ( $E_{1,t}$  is the accumulated loss of the player to the trial with the number  $t$ , see (23), (26) and (27)).

$$(35) \quad$$

$t$	10	20	30	40	50	60
$\mathbf{P}(T \geq t)$	0.598	0.337	0.191	0.107	0.061	0.034
$\frac{E_{1,t}}{h}$	0.9	2.7	6.4	13.8	28.4	57.6

Let us change the rules of the game a little. We suppose that

$$(36) \quad S_{1,1} = 1, \quad E_{1,1} = 0, \quad h = 0.$$

On the one hand it is clear that if  $h = 0$ , it is not interesting to play. But we consider the situation when a player was talked into buying a ticket, and let

$$(37) \quad \begin{cases} g_1 S_{1,t} = S_{1,t} + E_{1,t}, & t = 1, 2, \dots \\ E_{1,t+1} = E_{1,t} + S_{1,t}, & t = 1, 2, \dots \end{cases}$$

i.e., we consider the tactics when the player wish to recover his expenses. In this case  $E_{1,2} = 1$  and

$$(38) \quad E_{1,t+1} = E_{1,t} \frac{g_1}{g_1 - 1}, \quad t = 2, 3, \dots$$

Therefore

$$(39) \quad E_{1,t} = \left( \frac{g_1}{g_1 - 1} \right)^{t-2}, \quad t = 2, 3, \dots, \quad (E_{1,1} = 0),$$

and

$$(40) \quad S_{1,t} = \frac{g_1^{t-2}}{(g_1 - 1)^{t-1}}, \quad t = 2, 3, \dots \quad (S_{1,1} = 1).$$

Now we consider the lottery Lotto 6/49. There are  $n = 49$  numbers,  $m = 6$  and  $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ . In this case

$$(41) \quad p_k = \frac{\binom{6}{k} \binom{43}{6-k}}{\binom{49}{6}}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6.$$

One can verify that

$$p_3 = 0.0176904039; p_4 = 0.0009686197; p_5 = 0.0000184499; p_6 = 0.0000000715,$$

and hence the probability of wining is equal to

$$(42) \quad P = p_3 + p_4 + p_5 + p_6 = 0.018637545$$

and the probability of losing is

$$(43) \quad Q = 1 - P = 0.981,$$

From (42) and (43) it follows that

$$(44) \quad E T = \frac{1}{P} \approx \frac{1000}{19} \approx 53,$$

$$(45) \quad E S_T = P + \sum_{t=2}^{\infty} \frac{g^{t-2}}{(g-1)^{t-1}} P(1-P)^{t-1} =$$

$$(46) \quad = P \left( 1 + \frac{1-P}{g-1} \sum_{t=1}^{\infty} \left[ \frac{g(1-P)}{g-1} \right]^{t-2} \right).$$

This series is divergent, since its general term is greater than 1, as it was in the case of the Genoese lottery  $\frac{15 \cdot 17}{14 \cdot 18} > 1$ , i.e., the mathematical expectation of expenses is infinite, i.e., the “duration of the game” is finite, but one needs to have infinite capital to win. This is the paradox.



## ACKNOWLEDGEMENT

The author would like to thank J. Coleman, R. Erdahl, T. Smith, C. Blyth, W. Woodside, M. Maes and K. Oskolkov for helpful discussions and encouragement during the writing this paper, and Queen's STATLAB (Terry Smith, Director) for financial support over the winter 1991-1992.

## REFERENCES

- [1] **Becker, R.A., J.M. Chambers, and A.R. Wilks** (1983). "The New S Language". *Wadsworth & Brooks/Cole* Advanced Books & Software. Computer Science Series.
- [2] **Faddeev, D.K., Nikulin, M.S. and Sokolovsky, I.F.** (1989). "The elements of higher mathematics for high-school". Mir, Moscow (translation from Russian).
- [3] **Kotz S. and Strout, D.F.** (1983). "Educated Guessing". *Marcel Dekker*, N.Y.
- [4] **Savage, I.R.** (1968). "Statistics = Uncertainty and Behavior". *Houghton Mifflin*, Boston.

## NOTE

This is a version of lecture given by L. Bol'shev, in 1974, in Moscow and by me in the former Leningrad, in 1974-1976. This text was prepared by me in Russian in 1978 to the memory of L. N. Bolshev, who died in september of 1978. The translation in English was done in Kingston in 1991.



## SOLUCIONS ALS PROBLEMES PROPOSATS AL VOLUM 15. N° 3

### PROBLEMA N° 42

Sea  $X_n$  una variable aleatoria con distribución de Poisson de parámetro  $\lambda = n\alpha$ . Entonces

$$P(X_n \leq [n\alpha]) = \sum_{k=0}^{[n\alpha]} e^{-n\alpha} \frac{(n\alpha)^k}{k!}$$

que es también igual a

$$P\left(\frac{X_n - n\alpha}{\sqrt{n\alpha}} \leq \frac{[n\alpha] - n\alpha}{\sqrt{n\alpha}}\right)$$

Como  $X_n$  se puede entender como la suma de  $n$  variables Poisson de parámetro  $\alpha$  independientes, por el Teorema Central del Límite, se cumple la convergencia en ley

$$Y_n = \frac{X_n - n\alpha}{\sqrt{n\alpha}} \xrightarrow{\mathcal{L}} N(0, 1)$$

es decir,  $Y_n$  está asintóticamente distribuida según la normal tipificada.

Es obvio que

$$|[n\alpha] - n\alpha| \leq 1$$

luego

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{[n\alpha] - n\alpha}{\sqrt{n\alpha}} = 0$$

Así pues

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(X_n \leq [n\alpha]) = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-n\alpha} \sum_{k=0}^{[n\alpha]} \frac{(n\alpha)^k}{k!} = P(Y \leq 0) = 1/2$$

donde  $Y$  es la distribución  $N(0, 1)$ , que deja probabilidad  $1/2$  a la izquierda del cero.

C.M. Cuadras  
Universitat de Barcelona

**PROBLEMA N° 43**

1) El cociente de las densidades es

$$(1) \frac{f_m(x)}{f_n(x)} = \left( \frac{n-2}{m-2} \right)^{1/2} \frac{\Gamma(n/2) \Gamma[(m+1)/2]}{\Gamma(m/2) \Gamma[(n+1)/2]} \cdot \frac{[1+x^2/(m-2)]^{-(m+1)/2}}{[1+x^2/(n-2)]^{-(n+1)/2}}$$

cuyo mínimo es también el mínimo de la función

$$g(x) = (m+1) \log [1+x^2/(m-2)] - (n+1) \log [1+x^2/(n-2)]$$

Igualando la derivada a cero

$$g'(x) = (m+1) \frac{2x/(m-2)}{1+x^2/(m-2)} - (n+1) \frac{2x/(n-2)}{1+x^2/(n-2)} = 0$$

se anula para el valor  $x = 0$ , que corresponde a un máximo. Suponiendo  $x \neq 0$ , eliminando el término  $2x$  y operando

$$\begin{aligned} \frac{m+1}{m-2} \frac{1}{1+x^2/(m-2)} &= \frac{n+1}{n-2} \frac{1}{1+x^2/(n-2)} \\ \frac{m+1}{m-2} \left( 1 + \frac{x^2}{(n-2)} \right) &= \left( \frac{n+1}{n-2} \right) \left( 1 + \frac{x^2}{(m-2)} \right) \\ \frac{(m+1)(n-2)}{(m-2)(n-2)} + \frac{(m-1)x^2}{(m-2)(n-2)} &= \frac{(n+1)(m-2)}{(n-2)(m-2)} + \frac{(n+1)x^2}{(n-2)(m-2)} \\ (m-1)x^2 - (n-1)x^2 &= (n+1)(m-2) - (m+1)(n-2) \\ (m-n)x^2 &= 3(m-n) \\ x &= \pm\sqrt{3} \end{aligned}$$

que corresponde a un mínimo. Finalmente, como  $x^2 = 3$  y

$$1 + \frac{3}{(m-2)} = \frac{m+1}{m-2} \quad 1 + \frac{3}{(n-2)} = \frac{n+1}{n-2}$$

sustituyendo en (1) obtenemos el mínimo de  $f_m(x)/f_n(x)$ , es decir,

$$\begin{aligned} \rho(m, n) &= \left( \frac{n-2}{m-2} \right)^{1/2} \frac{\Gamma(n/2) \Gamma[(m+1)/2]}{\Gamma(m/2) \Gamma[(n+1)/2]} \left( \frac{m-2}{m+1} \right)^{(m+1)/2} \\ &\quad \cdot \left( \frac{n+1}{n-2} \right)^{(n+1)/2} \end{aligned}$$

2) Si  $F_m$  es la función de distribución de  $X$  y  $F_n$  es la de  $Y$ , entonces

$$U = F_m(X) \quad V = F_n(Y)$$

siguen la distribución uniforme en  $(0,1)$ . Luego podemos establecer la igualdad

$$F_m(X) = F_n(Y)$$

es decir

$$(2) \quad Y = F_n^{-1}(F_m(X))$$

donde  $F_n^{-1}$  es la función inversa. Sea  $H^+(x, y)$  la distribución conjunta de  $(X, Y)$  ligados funcionalmente a través de (2). Como  $X, Y$  tienen media 0 y varianza 1, la correlación es

$$\rho(X, Y) = \int xy dH^+(x, y)$$

pero al verificarse (2), podemos poner  $y$  como función de  $x$

$$\rho(X, Y) = \int x F_n^{-1}(F_m(x)) dF_m(x)$$

pues además  $dH^+(x, y) = dF_m(x)$ . Estableciendo el cambio

$$u = F_m(x) \quad du = dF_m(x) \quad x = F_m^{-1}(u)$$

obtenemos

$$(3) \quad \rho^+(m, n) = \rho(X, Y) = \int_0^1 F_m^{-1}(u) F_n^{-1}(u) du$$

que por lo tanto se puede interpretar como un coeficiente de correlación entre  $X$  e  $Y$ , estando ambas variables ligadas por la relación funcional (2).

3) Sea  $H^+(x, y)$  la función de distribución bivalente de  $X, Y$  sujetos a la relación funcional (2). Entonces

$$\begin{aligned} H^+(x, y) &= P(X \leq x, Y \leq y) = P(X \leq x, F_n^{-1}(F_m(X)) \leq y) = \\ &= P(X \leq x, X \leq F_m^{-1}(F_n(y))) \\ &= \begin{cases} P(X \leq x) = F_m(x) & \text{si } x < F_m^{-1}(F_n(y)) \\ P(X \leq F_m^{-1}(F_n(y))) = F_m(F_m^{-1}(F_n(y))) & \\ = F_n(y) & \text{si } x > F_m^{-1}(F_n(y)) \end{cases} \end{aligned}$$

es decir, encontramos que la distribución es

$$H^+(x, y) = \min\{F_m(x), F_n(y)\}$$

Como para dos sucesos cualquiera se verifica

$$P(A \cap B) \leq \min\{P(A), P(B)\}$$

deducimos que cualquier otra posible función de distribución bivalente  $H(x, y)$  para  $X, Y$  verifica

$$H(x, y) \leq H^+(x, y)$$

Luego, como resultado ya demostrado por W. Hoeffding, se puede ver que

$$(4) \quad \int xy dH(x, y) \leq \rho^+(m, n) = \int xy dH^+(x, y)$$

es decir, (3) es la expresión del máximo coeficiente de correlación posible entre  $X$  e  $Y$ .

Consideremos ahora la siguiente función de distribución definida por la mixtura

$$(5) \quad H_\rho(x, y) = \rho F_n(\min\{x, y\}) + (1 - \rho)F_n(y) \cdot G(x)$$

siendo  $0 \leq \rho < 1$ , y suponiendo además que

$$(6) \quad G(x) = \frac{F_m(x) - \rho F_n(x)}{1 - \rho}$$

es una función de distribución univariante.

En otras palabras,  $H_\rho$  es  $F_n(\min\{x, y\})$  con probabilidad  $\rho$  ó  $F_n(y) \cdot G(x)$  con probabilidad  $(1 - \rho)$ .

Se cumple que

$$\begin{aligned} H_\rho(\infty, y) &= \rho F_n(y) + F_n(y) \cdot (1 - \rho) = F_n(y) \\ H_\rho(x, \infty) &= \rho F_n(x) + F_m(x) - \rho F_n(x) = F_m(x) \end{aligned}$$

luego las distribuciones marginales son  $F_m$  y  $F_n$ . Además

$$P(Y \leq x, Y \leq y) = F_n(\min\{x, y\})$$

es decir,  $F_n(\min\{x, y\})$  es la función de distribución de  $(Y, Y)$ . Por lo tanto el coeficiente de correlación es

$$\rho(x, y) = \int xy dH_\rho(x, y) = \rho \cdot 1 + (1 - \rho) \int y dF_n(y) \int x dG(x)$$

y como  $E(Y) = \int y dF_n(y) = 0$  obtenemos la correlación

$$\rho(X, Y) = \rho \leq \rho^+(m, n)$$

pues  $\rho^+(m, n)$  es la máxima correlación posible (ver (4)).

Busquemos el máximo valor para  $\rho$ . Deberá cumplirse que  $G(x)$  (ver (6)) sea una función de distribución, es decir,

$$G''(x) = \frac{f_m(x) - \rho f_n(x)}{1 - \rho} > 0 \quad \forall x$$

$$f_m(x) - \rho f_n(x) > 0 \quad \forall x$$

$$\frac{f_m(x)}{f_n(x)} > \rho \quad \forall x$$

Luego  $\rho$  debe cumplir

$$\rho(m, n) = \inf \left\{ \frac{f_m(x)}{f_n(x)} \right\} \geq \rho > 0$$

y como  $\rho$  es una correlación, tenemos que su máximo valor  $\rho(m, n)$  verificará

$$\rho(m, n) \leq \rho^+(m, n)$$

Finalmente, si  $m = n$  la relación (2) es  $X = Y$ , luego

$$\rho(m, n) = \rho^+(m, n) = 1.$$

Pero si  $m < n$ , como  $\rho(m, n) \neq \rho(n, m)$  y sin embargo  $\rho^+(m, n) = \rho^+(n, m)$  deducimos que

$$\rho(m, n) < \rho^+(m, n) < 1.$$

C.M. Cuadras  
Universitat de Barcelona





## NOVETATS DE SOFTWARE

La introducció de la nova secció de “NOVETATS DE SOFTWARE” a la revista QÜESTIÓ es fa amb la finalitat de promoure l’intercanvi d’informació relacionada amb programes d’ordinador disponibles, destinats a l’implementació de metodologia estadística, d’informàtica o d’investigació operativa.

A causa de l’important creixement que ha experimentat darrerament la utilització dels ordinadors a totes les àrees científiques i tècniques i, a les esmentades més amunt, en particular, hi ha un bon nombre d’investigadors que han desenvolupat un software propi, l’existència del qual és desconeguda, de vegades, per a molts lectors que el podrien aprofitar. Per això, creiem que és convenient i útil fer-lo conèixer mitjançant aquesta revista, amb el benentès que només actuaria com a mitjà de difusió.

Per tal d’uniformitzar la descripció del software, adjuntem una butlleta que ha de ser omplenada i tramesa a l’editorial de QÜESTIÓ.

Amb tota certesa, la vostra col·laboració serà d’utilitat per a molts lectors als qui facilitarà el treball i que, alhora, podran ajudar els autors dels programes suggerint-los possibles millores.



**Nom del programa:**

**Area/àrees d'aplicació (Estadística, Sistemes, etc.):**

**Descripció del software:**

- Llenguatge:
- Ordinador/s:
- Sistema operatiu:

**Està disponible en els suports següents:**

Floppy disk/diskette. Assenyaleu:

Mida:                      Densitat:              una                      dues cares

Cinta magnètica. Assenyaleu:

Mida                      Densitat                      Codi

**Distribuït per:**

**Configuració mínima de hardware requerida:**

**Requereix l'ensinistrament de l'usuari:**

**Documentació**

**Llistat, font disponible:**

**Grau de desenvolupament:**

**Es fa servir aquest software normalment?**

**En cas afirmatiu**

des de quan?

a quants llocs?

**L'autor d'aquest software està disponible per atendre les preguntes dels usuaris?**

**Descripció del que fa l'esmentat software:** (200 paraules aproximadament).

**Possibles usuaris:**

**Camps d'interès:**

**Nom de l'autor/s:**

**Institució:**

**Adreça:**

**Número de telèfon:**

## RESUMS EN ANGLÈS

**J.E. MARTÍNEZ FALERO, E. AYUGA TÉLLEZ, C. GONZÁLEZ GARCÍA**

**A comparative study of different kernel functions according to data type.**

This article contributes to the selection of the kernel function and the smoothing parameter which best adapt to the sample characteristics in small samples ( $n = 25$ ). For this purpose 200 samples were taken from 5 continuous distributions, practically all with support  $[0,1]$ , and grouped according to sample characteristics. In each group density functions were adjusted to 8 different kernels with smoothing parameters varying in width between 0.2 and 4.8; subsequently an optimum average window width was compared with the optimum window width for each sample obtained by minimizing the integrated, mean, squared error and by cross validation. The bias and efficiency of the statistical “window width corresponding to the optimum average error per group minus the optimum window width for each sample” and the analysis of the best fit for the estimated functions to the starting distributions allow us to determine the kernel function and window width best adapt to the sample characteristics.

**ELADIO BARRIO, CELIA BUADES and ANDRÉS MOYA**

**Statistical geometry in distance and sequence spaces: two applications.**

“Statistical geometry is a new approach that complements existing methods for comparing alternative phylogenies and for assessing the significance of the topological location of the branching points in a phylogeny, allowing to select the appropriate topology (i.e., tree, bundle or net).

In the present paper we show that, although statistical geometry helps to choose between phylogenetic topologies, it cannot decide between specific topological types. Two examples are examined: the mitochondrial DNA restriction analysis of the *Obscura* group of *Drosophila* as an example of tree-like topology,

and the evidence of horizontal gene transfer of the gene coding for isopenicillin N synthetase from *Streptomyces* to some fungi as an example of net”.

**ANTONIO MIÑARRO and JOSEP M. OLLER**

**Some remarks on the individuals-score distance and its applications to statistical inference.**

This paper is concerned with the study of some properties of the distance between statistical individuals based on representations on the dual tangent space of a parametric manifold representation of a statistical model. Explicit expressions for distances are obtained for well-known families of distributions. We have also considered applications of the distance to parameter estimation, testing statistical hypotheses and discriminant analysis.

**MIGUEL ÁNGEL LERMA USERO**

**Extension to the space of an application of complex integration for solving a topic on graphic computation.**

The residue theorem of Cauchy is useful as a basis for an algorithm which allows us to set the position of a point with respect to a simple closed curve. Extension of this method to the space encounters the difficulty that we cannot work with  $n$ -dimensional complex fields for  $n > 2$ . In this paper this difficulty is overcome by presenting the procedure in terms of differential geometry.

**S. LOZANO, J. LARRAÑETA and L. ONIEVA**

**Complementary heuristic to dual approaches to the capacitated lot-sizing problem.**

This paper reports on a primal heuristic to be appended to dual approaches to the Single Level Capacitated Lot-Sizing Problem (CLSP). Such approaches (subgradient, primal-dual, etc.) climb the Lagrangean function obtained through the relaxation of the capacity constraints. The aim of the proposed heuristic is to adjust those solutions in order to obtain feasibility with minor cost increments.

**MORALES, D., PARDO, L., SALICRÚ, M. and MENÉNDEZ, M.L.**

**Test of hypotheses on the  $(r, s)$ -divergence: applications to multinomial and multivariate normal distributions.**

In this work, asymptotic distributions of  $(r, s)$ -divergence statistics (Sharma and Mittal, 1975) between two probability density functions  $f_{\theta_1}$  and  $f_{\theta_2}$  are obtained, either when  $\theta_2$  is fixed and  $\theta_1$  unknown or when both parameters are unknown. The unknown parameters are estimated according with the maximum likelihood principle. As a particular case the asymptotic distributions in multinomial populations are obtained. To finish, these results are used to test statistical hypotheses in multivariate normal populations.

**PLAZA DELGADO, M. and MONTES SUAY, F.**

**A Test in Germ-Grain Models.**

A Montecarlo test based on the area, in a fixed interval, between the dilation and erosion curves is presented in this paper. As an application, the test is used to compare the Boolean model against its natural alternatives with hard-core or Poisson cluster as germ processes.

**M. PEPIÓ and C. POLO**

**Quantile Plots in the Analysis of Heteroscedastic Models.**

Recent developments in quality engineering methods have led to considerable interest in the analysis of variance, building a dispersion model, identifying important effects from replicated experiments and checking for significance by means of a half-normal plot. A methodology based on a chi-squared quantile plot is presented here for checking first the presence of heteroscedasticity, outliers and other data peculiarities, and after the estimation stage a new stepwise procedure tests for significant effects.

**H.I. CALVETE and P. MATEO**

**Circulations and maximum flow with parametric bounds.**

In this paper, we study the problem of obtaining circulations and maximum flow on networks with lower and upper bounds when these bounds are parametric linear functions. The existence of parametric circulations and feasible parametric flows are characterized.

We also provide necessary and sufficient conditions for the optimality of parametric flow. Finally, algorithms for their computation are proposed.





Butlleta de subscripció a la revista **Qüestió**

Nom i cognoms _____	
_____	
Empresa/Institució _____	
_____	
Adreça _____	
_____	
Codi postal _____	ciutat _____
Tel. _____	Fax _____
Data d'expedició _____	
Signatura:	DNI o NIF _____

Desitjo subscriure'm a **Qüestió** per a l'any 1992.  
El preu de la subscripció és de 2.000 PTA.

Forma de pagament

- ☐ Transferència al compte de la Caixa de Catalunya número 6985/77,  
Agència 100, Comte d'Urgell 162, 08036 Barcelona
- ☐ Domiciliació bancària
- ☐ Taló nominatiu a l'Institut d'Estadística de Catalunya
- ☐ En efectiu

Retornar aquesta butlleta (o una fotocòpia):

Secretaria de **Qüestió**:  
**Institut d'Estadística de Catalunya**  
Àrea R+D Estadístics  
Via Laietana, 58  
08003 Barcelona





Autorització de domiciliació bancària per al pagament de les subscripcions anuals de la revista **Qüestió**

El sotasignat \_\_\_\_\_  
autoritza el Banc/Caixa \_\_\_\_\_  
Agència núm. \_\_\_\_\_ adreça \_\_\_\_\_  
Codi postal \_\_\_\_\_ ciutat \_\_\_\_\_  
a abonar a la revista **Qüestió** amb càrrec al meu compte número \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_, les subscripcions a **Qüestió**.  
\_\_\_\_\_, a \_\_\_\_\_ d \_\_\_\_\_ de 19 \_\_\_\_\_  
  
(Signatura)

El sotasignat \_\_\_\_\_  
autoritza la revista **Qüestió** a carregar al meu compte número \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_, al Banc/Caixa \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
Agència núm. \_\_\_\_\_ adreça \_\_\_\_\_  
Codi postal \_\_\_\_\_ ciutat \_\_\_\_\_  
l'import de les tarifes vigents de les subscripcions a la revista **Qüestió**.  
\_\_\_\_\_, a \_\_\_\_\_ d \_\_\_\_\_ de 19 \_\_\_\_\_  
  
(Signatura)





Butlleta de subscripció a la revista **Qüestió**

Nom i cognoms _____	
_____	
Empresa/Institució _____	
_____	
Adreça _____	
_____	
Codi postal _____	ciutat _____
Tel. _____	Fax _____
Data d'expedició _____	
Signatura: _____	DNI o NIF _____

Desitjo subscriure'm a **Qüestió** per a l'any 1992.  
El preu de la subscripció és de 2.000 PTA.

Forma de pagament

- ☐ Transferència al compte de la Caixa de Catalunya número 6985/77,  
Agència 100, Comte d'Urgell 162, 08036 Barcelona
- ☐ Domiciliació bancària
- ☐ Taló nominatiu a l'Institut d'Estadística de Catalunya
- ☐ En efectiu

Retornar aquesta butlleta (o una fotocòpia):

Secretaria de **Qüestió**:  
**Institut d'Estadística de Catalunya**  
Àrea R+D Estadístics  
Via Laietana, 58  
08003 Barcelona





Autorització de domiciliació bancària per al pagament de les subscripcions anuals de la revista **Qüestió**

El sotasignat \_\_\_\_\_  
autoritza el Banc/Caixa \_\_\_\_\_  
Agència núm. \_\_\_\_\_ adreça \_\_\_\_\_  
Codi postal \_\_\_\_\_ ciutat \_\_\_\_\_  
a abonar a la revista **Qüestió** amb càrrec al meu compte número \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_, les subscripcions a **Qüestió**.  
\_\_\_\_\_, a \_\_\_\_\_ d \_\_\_\_\_ de 19 \_\_\_\_\_

(Signatura)

El sotasignat \_\_\_\_\_  
autoritza la revista **Qüestió** a carregar al meu compte número \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_, al Banc/Caixa \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
Agència núm. \_\_\_\_\_ adreça \_\_\_\_\_  
Codi postal \_\_\_\_\_ ciutat \_\_\_\_\_  
l'import de les tarifes vigents de les subscripcions a la revista **Qüestió**.  
\_\_\_\_\_, a \_\_\_\_\_ d \_\_\_\_\_ de 19 \_\_\_\_\_

(Signatura)



