Přenos nejistoty

Náhodná veličina y, která je funkcí náhodných proměnných x_i:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \qquad x_i \text{ se řídí rozděleními } p_i(x_i)$$

→ můžeme najít jejich střední hodnoty μ_i a disperze σ_i^2

$$x_i = \mu_i \pm \sigma_i$$

Jak se projeví nejistoty x_i na veličině y?

→ chceme získat odhad nejistoty veličiny y.

Funkci f lze rozvinout do Taylorovy řady v okolí bodu $\mu \equiv f(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$:

$$y = \boxed{f(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_{\mu_1,\dots,\mu_n} (x_i - \mu_i)} +$$

$$\cancel{+\frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right)_{\mu_1,\dots,\mu_n} (x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)} + \cdots$$

(nelineární členy zanedbáme)

Přenos nejistoty

$$y \cong f(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n) + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{\mu_1, \ldots, \mu_n} (x_i - \mu_i)$$

Očekávaná hodnota: $E[y] = E[f(x_1, x_2, \ldots, x_n)] \approx f(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n)$

Disperze: $\sigma_y^2 = V[y] = E[y^2] - (E[y])^2$

$$\sigma_y^2 \approx \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{\mu_1, \ldots, \mu_n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right)_{\mu_1, \ldots, \mu_n} \operatorname{cov}(x_i, x_j)$$

Jsou-li x_i nezávislé: $\boxed{\sigma_y^2 \approx \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2_{\mu_1, \ldots, \mu_n} \sigma_{x_i}^2}$

Shrnutí: zpracování výsledků měření veličiny $y = f(x_1, x_2, ..., x_k)$

1) Zpracování pro přímo měřené veličiny. Pro každou veličinu x_i:

a) výpočet aritm. průměru $\bar{x}_i$ a směrodatné odchylky s_{x_i}

$$s_{x_i}^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{q=1}^{n_i} \left(x_{i,q} - \bar{x}_i \right)^2$$

b) vyloučení hrubých chyb (>„3σ“)

c) výpočet odhadu standardní odchylky aritm. průměru $s_{\bar{x}_i}$

$$s_{\bar{x}_i} = \frac{s_{x_i}}{\sqrt{n_i}}$$

d) určení chyby měřidla Δx.

(Je-li $s_{x_i} >> \Delta x$, lze Δx zanedbat a obráceně.)

e) volba pravděpodobnosti P a určení korekce t_P (závisí na P a počtu měření n_i)

- např. $P \sim 68$ % ... standardní odchylka („σ“)

f) určení celkové střední chyby veličiny x_i: $u_{\bar{x}_i} = \sqrt{\left(t_P s_{\bar{x}_i} \right)^2 + \left(\Delta x \right)^2}$

g) zaokrouhlení a zápis $x_i = \bar{x}_i \pm u_{\bar{x}_i}$

2) Výsledek pro veličinu y:

a) výpočet střední hodnoty: $\bar{y} = f\left(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_k \right)$

b) výpočet celkové střední chyby:

$$u_y = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)^2_{x_1,\dots,x_k} u_{x_1}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2_{x_1,\dots,x_k} u_{x_2}^2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^2_{x_1,\dots,x_k} u_{x_k}^2}$$

c) zaokrouhlení a zápis výsledku: $y = \bar{y} \pm u_{\bar{y}}$ $(P \sim 68\ \%)$

Nejistota nepřímého měření

Příklad: měření el. odporu $R = U / I$

- proměnné x_i: U, I
  - měřením U jsme získali $\overline{U}$ a σ_U, z přesnosti přístroje: $u_{U,\,\mathrm{B}}$

    $\rightarrow\ u_U^2 = \left(\sigma_{\overline{U}}^*\right)^2 + u_{U,\mathrm{B}}^2$
  - měřením I jsme získali $\bar{I}$ a σ_I, z přesnosti přístroje: $u_{I,\,\mathrm{B}}$

    $\rightarrow\ u_I^2 = \left(\sigma_{\bar{I}}^*\right)^2 + u_{I,\mathrm{B}}^2$
- Očekávaná hodnota: $\overline{R} = \overline{U} / \bar{I}$
- Nejistota: $u_R = \sqrt{\left(\dfrac{\partial R}{\partial U}\right)_{\overline{U},\bar{I}}^2 u_U^2 + \left(\dfrac{\partial R}{\partial I}\right)_{\overline{U},\bar{I}}^2 u_I^2}$
- Výsledek: $R = \overline{R} \pm u_R$ $\quad(\Omega)$

Přenos nejistoty – typické případy

- **součet** náhodných proměnných $y = a + b$
  - *a, b* jsou nezávislé: $\langle y \rangle = \langle a \rangle + \langle b \rangle$
    $V(y) = V(a) + V(b)$
  - *a, b* nejsou nezávislé: $\langle y \rangle = \langle a \rangle + \langle b \rangle$
    $V(y) = V(a) + V(b) + 2\mathrm{Cov}(a, b)$
- *a*, *b* nezávislé – jak vypadá **relativní nejistota**?
  - **součin** / **podíl**:
    $y = ab$ $\quad \sigma_y^2 = b^2\sigma_a^2 + a^2\sigma_b^2$ $\quad \eta_y^2 = \eta_a^2 + \eta_b^2$
  - **mocnina**:
    $y = a^n$ $\quad \sigma_y^2 = (na^{n-1})^2\sigma_a^2$ $\quad \eta_y^2 = n^2\eta_a^2$

Interpolace funkčních závislostí

$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_k)$ ... teoretická závislost (fyzikální zákon)

- V experimentu měníme hodnotu jedné nebo několika veličin x_i a studujeme závislost veličiny y.
  - např. měníme $x_1 \equiv x$, ostatní x_i bereme jako parametry (α, β, γ, ...):

$$y = f(x \mid \alpha, \beta, \gamma, \ldots)$$

- Chceme posoudit platnost závislosti y na x_i z výsledků experimentu.
  → tj. chceme získat odhady parametrů $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \ldots$

- např. pro N hodnot $x_1, x_2, \ldots x_N$ jsme naměřili N hodnot $y_1, y_2, \ldots y_N$

Předpokládáme, že známe funkční závislost f a že přesnost nastavení hodnot veličiny x je řádově větší, než přesnost měření závisle proměnné y (která má obecně pro každý bod jinou dispersi).

Metoda nejmenších čtverců

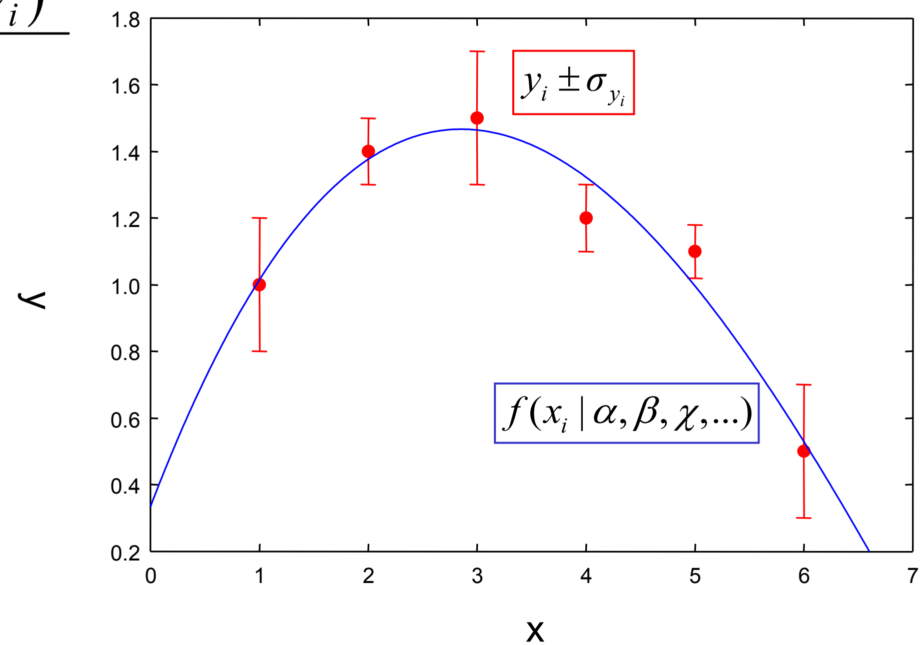
- Metoda početní interpolace.

- Používá se pro získání odhadů parametrů $\left(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \ldots\right)$:

1) Zkonstruujeme veličinu

$$\chi^2(\alpha,\beta,\gamma,\ldots) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(f(x_i\,|\,\alpha,\beta,\gamma,\ldots) - y_i\right)^2}{\sigma_{y_i}^2}$$

2) Hledáme minimum $\chi^2(\alpha,\beta,\gamma,\ldots)$.

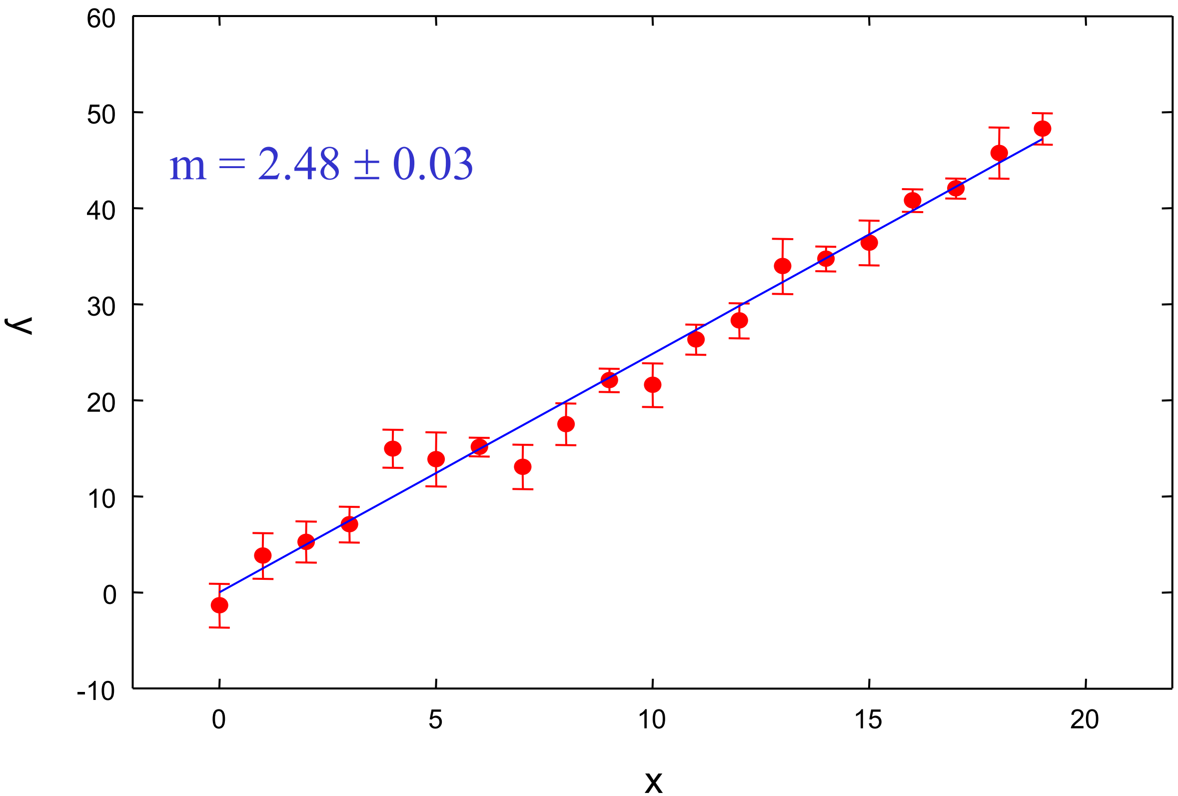


Metoda nejmenších čtverců – přímka procházející počátkem

- $y = mx$
- $\chi^2(m) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(mx_i - y_i)^2}{\sigma_{y_i}^2}$
- minimalizace χ^2:

$$\widetilde{m} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i x_i}{\sigma_{y_i}^2}}{\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_{y_i}^2}}$$

- disperze m: $\sigma_{\widetilde{m}}^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_{y_i}^2}}$
- $m = \widetilde{m} \pm \sigma_{\widetilde{m}}$
- problém: co když neznáme σ_{y_i}



Metoda nejmenších čtverců – přímka procházející počátkem

- Pokud jsou σ_{y_i} neznámé ale stejné, $\sigma_{y_i} = \sigma_y$

  … potom $\sigma_{\tilde{m}}^2 = \dfrac{\sigma_y^2}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2}$

  - Pro neznámou disperzi σ_y pak lze spočítat odhad: $\tilde{\sigma}_y^2 = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \tilde{m}x_i\right)^2$

    ozn. $R_1^2 \equiv \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \tilde{m}x_i\right)^2$ ... minimální suma čtverců odchylek

    - nevychýlený odhad: $\left(\tilde{\sigma}_y^*\right)^2 = \dfrac{R_1^2}{n-1}$

  - Odhad disperze *m* je tedy:

$$\left(\sigma_{\tilde{m}}^*\right)^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2}\frac{R_1^2}{n-1}$$

Obecná přímka, obecná lineární regrese

- obecná přímka: $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$

naměřené hodnoty: $[x_i, y_i]$ $i = 1, \dots, n$

nejistoty závislé veličiny y_i: $\varepsilon_i \in N(0, \sigma)$

- minimalizace χ^2: $\dfrac{\partial \chi^2}{\partial \beta_1} = 0$ $\dfrac{\partial \chi^2}{\partial \beta_0} = 0$

vede na soustavu lineárních rovnic:

$$\beta_0 \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\varepsilon_i^2} + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{\varepsilon_i^2} + \sum_{i=1}^{n} \frac{\varepsilon_i x_i}{\varepsilon_i^2} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i y_i}{\varepsilon_i^2}$$

$$\beta_0 \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\varepsilon_i^2} + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\varepsilon_i^2} + \sum_{i=1}^{n} \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_i^2} = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i}{\varepsilon_i^2}$$

Jak jsou parametry β_0 a β_1 (ne)závislé?
$\rightarrow \mathrm{Cov}(\beta_0, \beta_1)$

- obecná funkční závislost: $y = y(x, \beta_1, \dots, \beta_m)$ $\leftarrow$ lineární v parametrech β_i tj.

$$y = \sum_{k=1}^{m} \beta_k f_k(x)$$

$$\begin{matrix} \beta_1 \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i) f_1(x_i) & + \dots + & \beta_m \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i) f_1(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i) y_i \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_1 \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i) f_m(x_i) & + \dots + & \beta_m \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i) f_m(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i) y_i \end{matrix}$$

Maticové vyjádření

$$y = \sum_{k=1}^{m} \beta_k \, f_k(x)$$

Naměřené hodnoty: $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ $\quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$

$$\boxed{\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A\beta}}$$

Hledané parametry: $\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix}$

Matice plánu (konstrukční matice, design matrix):

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & \cdots & f_m(x_n) \end{pmatrix}$$

← matice $m \times n$, $m \leq n$

$\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{A\beta} - \boldsymbol{y} \|^2 = 0$ → řešení pro parametry: $\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A})^{-\mathbf{1}} \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{y} = \boldsymbol{H y}$

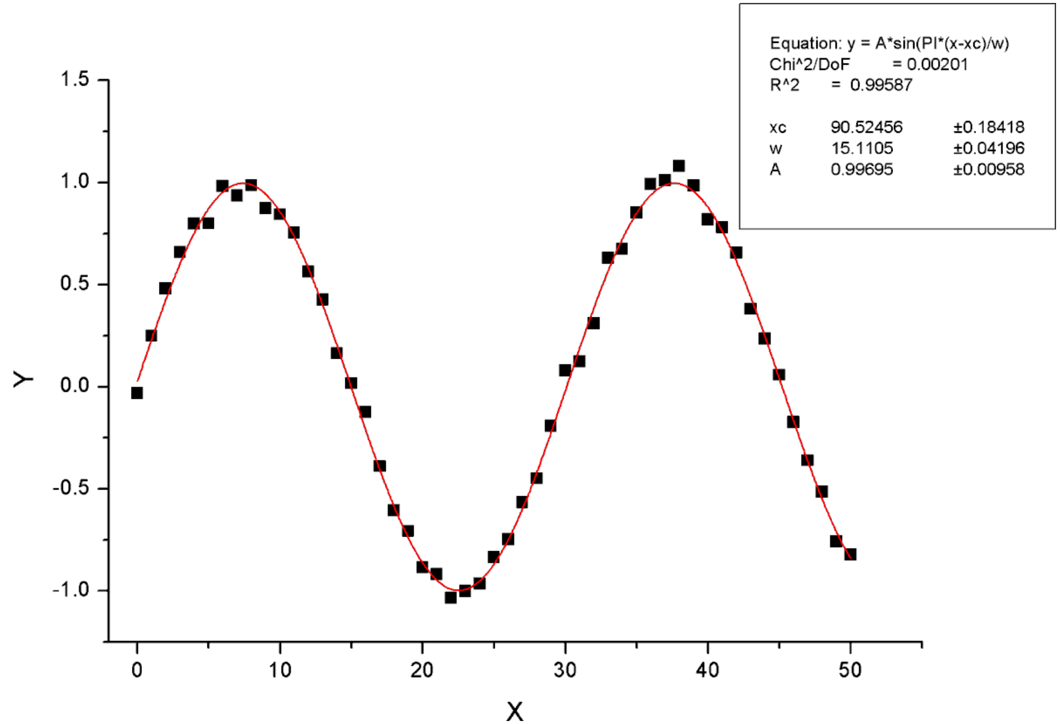
Jak jsou parametry (ne)závislé? → kovarianční matice: $U_{ij} = \mathrm{Cov}(\beta_i, \beta_j)$ $\quad \boldsymbol{U} = \boldsymbol{H V H}^T$

$\mathrm{Cov}(\beta_0, \beta_1)$ $\qquad V_{ij} = \mathrm{Cov}(y_i, y_j)$

Fitování

- Konstrukce křivky (funkce), která co nejlépe odpovídá naměřeným hodnotám.
  - může podléhat dodatečným podmínkám
- Lineární vs. nelineární regrese

  metoda největšího spádu
  Gaussova-Newtonova metoda
  algoritmus Levenberg–Marquardt
  simplex



- Interpolace a vyhlazování (spline)
- Regresní analýza a extrapolace

- Softwarové nástroje
  - Excel, Matlab, Origin, ...
  - gnuplot, Python, R, ...