Metoda nejmenších čtverců - linearizace

- modelová funkce: $\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}))^2}{\sigma_i^2}$$

- parametry: $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_m$

- nelineární model:

$$\lambda(x|\boldsymbol{\theta}) = \nu_0 \exp(-\frac{Q}{kT}) \qquad \boldsymbol{\theta} = (\nu_0, Q)$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial Q} = 0 \qquad \frac{\partial \chi^2}{\partial \nu_0} = 0$$

soustava nelineárních rovnic

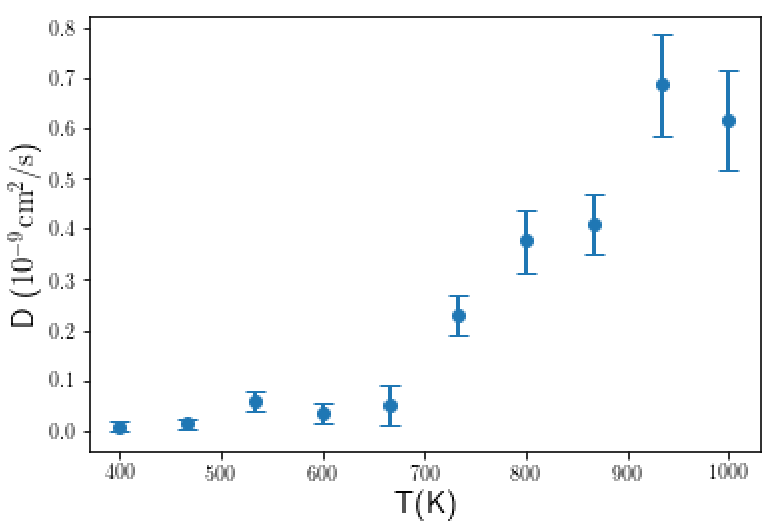
$\longrightarrow$

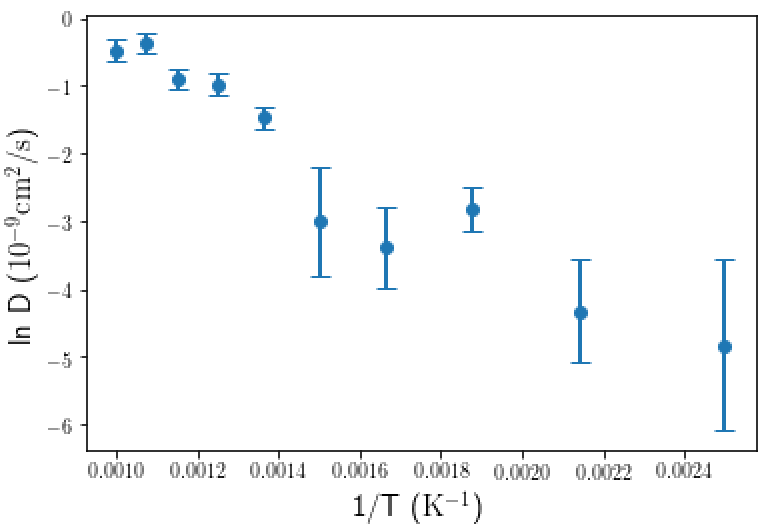
- lineární model:

$$\ln\lambda = -\frac{Q}{kT} + \ln\nu_0 = A\frac{1}{T} + B$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial A} = 0 \qquad \frac{\partial \chi^2}{\partial B} = 0$$

soustava lineárních rovnic





Metoda nejmenších čtverců - linearizace

- modelová funkce: $\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})$
- parametry: $\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_m$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{[\ln y_i - \ln\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})]^2}{\frac{\sigma_i^2}{y_i^2}}$$

- nelineární model:

$$\lambda(x|\boldsymbol{\theta}) = \nu_0 \exp(-\frac{Q}{kT}) \qquad \boldsymbol{\theta} = (\nu_0, Q)$$

$$\frac{\partial\chi^2}{\partial Q} = 0 \qquad \frac{\partial\chi^2}{\partial\nu_0} = 0$$

soustava nelineárních rovnic

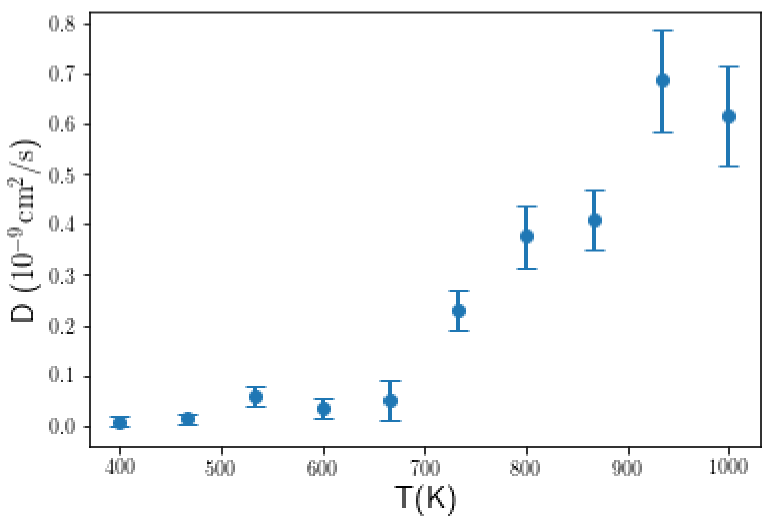
$\longrightarrow$

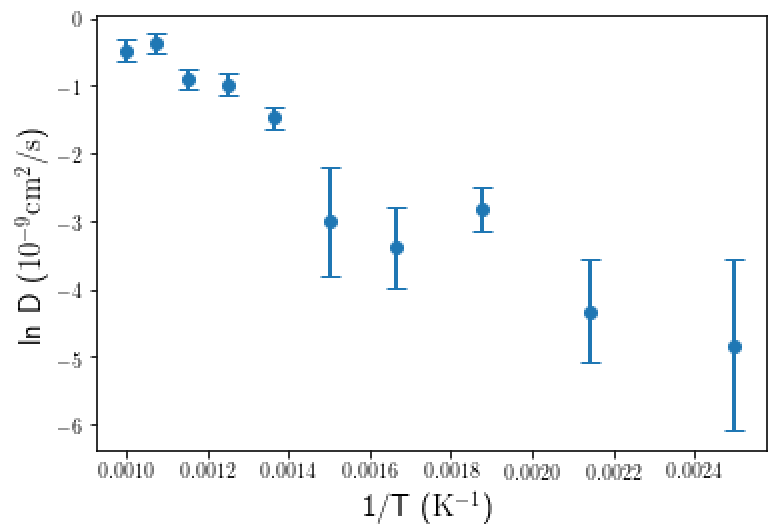
- lineární model:

$$\ln\lambda = -\frac{Q}{kT} + \ln\nu_0 = A\frac{1}{T} + B$$

je nutné transformovat také chyby

$$z_i = \ln y_i \qquad \sigma_{z_i} = \frac{1}{y_i}\sigma_i$$





Metoda nejmenších čtverců - linearizace

- modelová funkce: $\lambda(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})$
- parametry: $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_m$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{[\ln y_i - \ln\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})]^2}{\frac{\sigma_i^2}{y_i^2}}$$

- nelineární model:

$$\lambda(x|\boldsymbol{\theta}) = \nu_0 \exp(-\frac{Q}{kT}) \qquad \boldsymbol{\theta} = (\nu_0, Q)$$

$$\frac{\partial\chi^2}{\partial Q} = 0 \qquad \frac{\partial\chi^2}{\partial\nu_0} = 0$$

soustava nelineárních rovnic

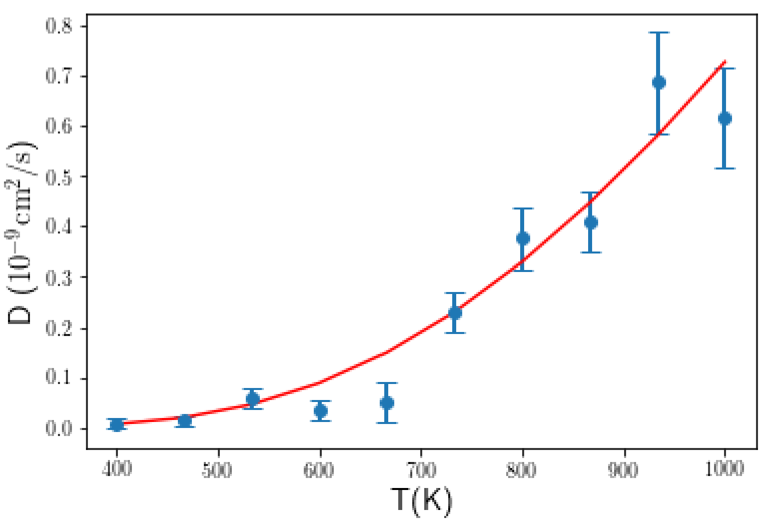
$\longrightarrow$

- lineární model:

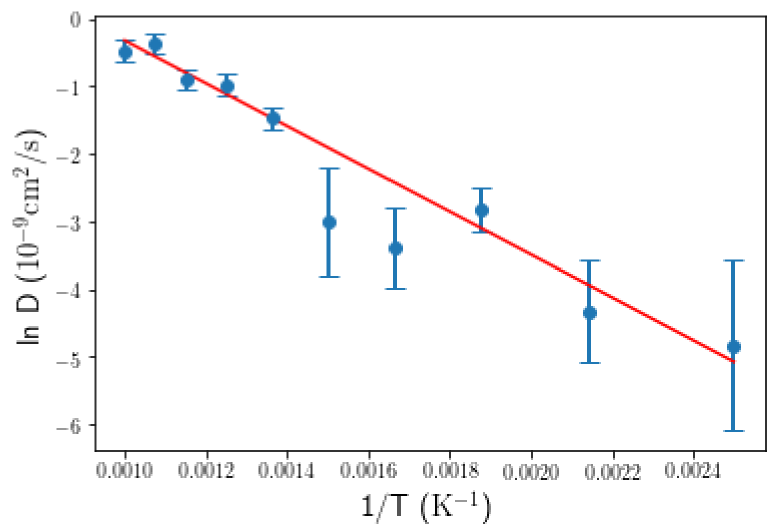
$$\ln\lambda = -\frac{Q}{kT} + \ln\nu_0 = A\frac{1}{T} + B$$

je nutné transformovat chyby

$$z_i = \ln y_i \qquad \sigma_{z_i} = \frac{1}{y_i}\sigma_i$$



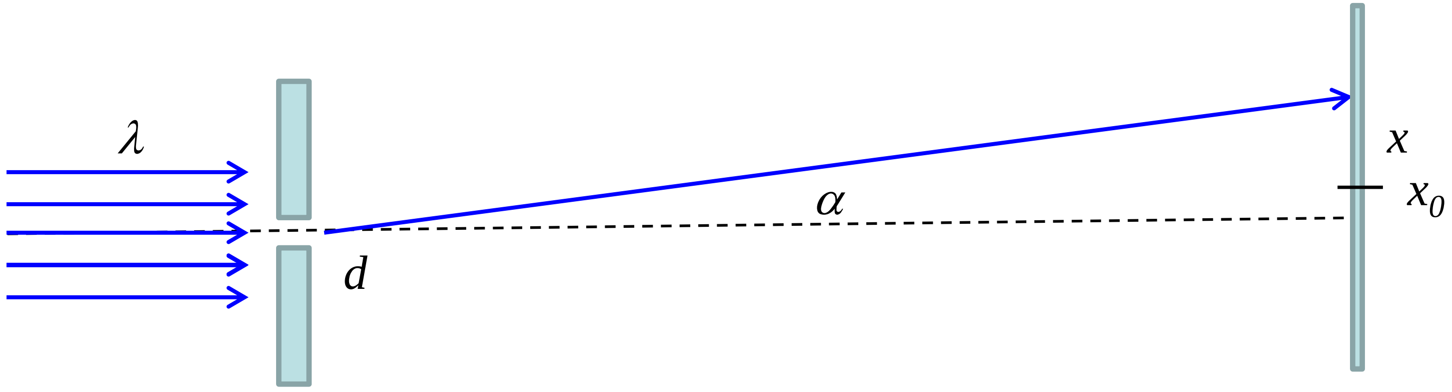
`Arrhenius.py`

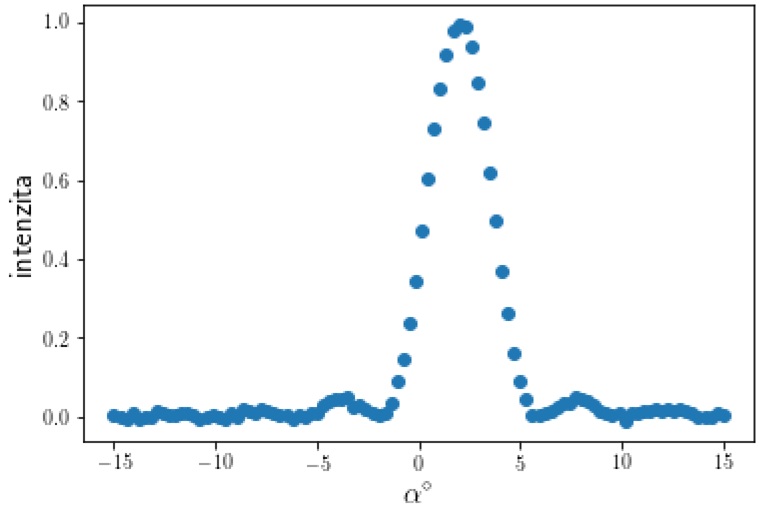


Python: funkce `np.polyfit`

Metoda nejmenších čtverců – nelineární fit

- difrakce na štěrbině





Metoda nejmenších čtverců – nelineární fit

- difrakce na štěrbině
- modelová funkce: $\lambda(\alpha|d,\alpha_0) = \left[\mathrm{sinc}\left(\frac{\pi d}{\lambda}\sin(\alpha-\alpha_0)\right)\right]^2$

šířka štěrbiny

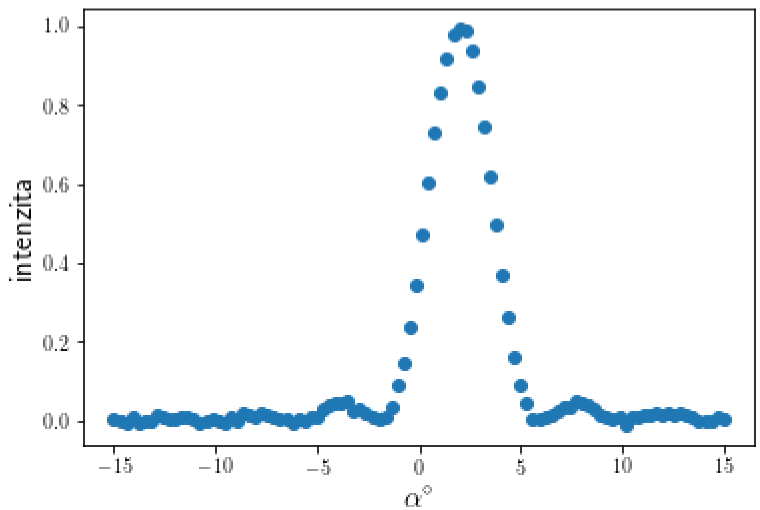
$\mathrm{sinc}\,(x) = \frac{\sin x}{x}$

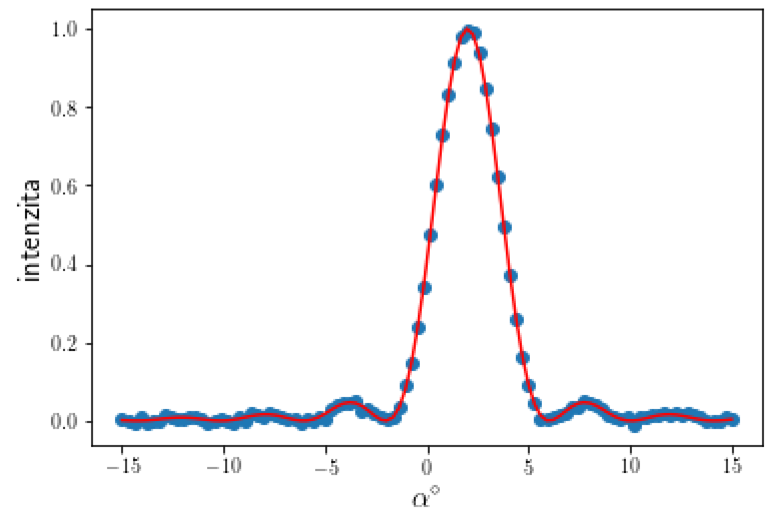
poloha hlavního maxima

$$\chi^2(d,\alpha_0|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(\alpha_i|d,\alpha_0)\right]^2}{\sigma_i^2}$$

d = (2.499 ± 0.004) μm

α_0 = (1.999 ± 0.003)°





Python: funkce `np.curve_fit`

`sterbina.py`

Metoda nejmenších čtverců – nelineární fit

- difrakce na dvojštěrbině

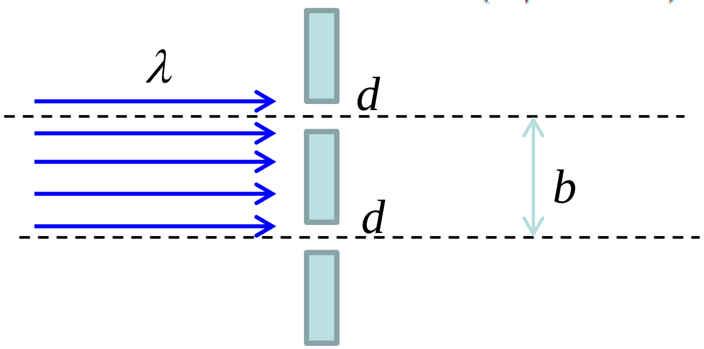
šířka štěrbin

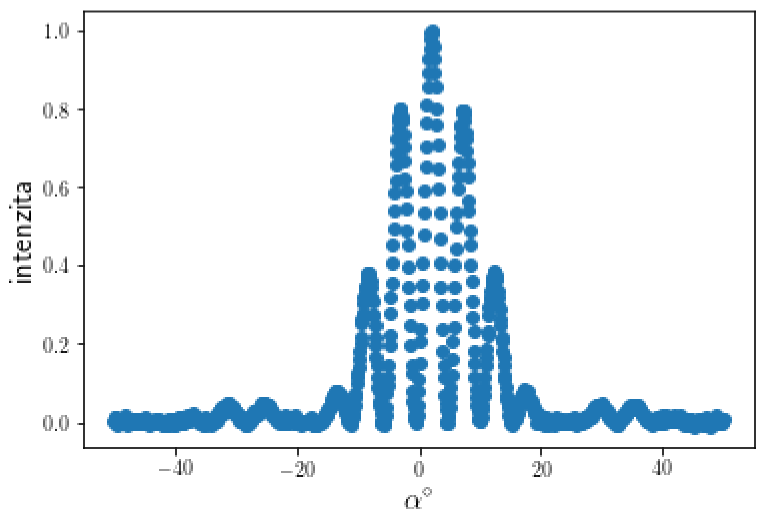
vzdálenost štěrbin

- modelová funkce: $\lambda(\alpha|d,b,\alpha_0) = \left[\mathrm{sinc}\left(\frac{\pi d}{\lambda}\sin(\alpha-\alpha_0)\right)\right]^2 \left[\cos\left(\frac{\pi b}{\lambda}\sin(\alpha-\alpha_0)\right)\right]^2$

$$\mathrm{sinc}\,(x) = \frac{\sin x}{x}$$

poloha hlavního maxima





Metoda nejmenších čtverců – nelineární fit

- difrakce na dvojštěrbině
- modelová funkce: $\lambda(\alpha|d,b,\alpha_0) = \left[\mathrm{sinc}\left(\frac{\pi d}{\lambda}\sin(\alpha-\alpha_0)\right)\right]^2 \left[\cos\left(\frac{\pi b}{\lambda}\sin(\alpha-\alpha_0)\right)\right]^2$

šířka štěrbin

vzdálenost štěrbin

$\mathrm{sinc}\,(x) = \frac{\sin x}{x}$

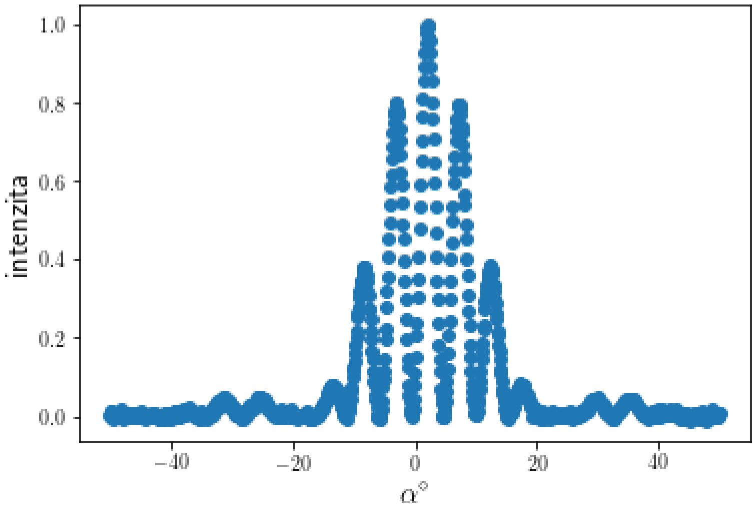
poloha hlavního maxima

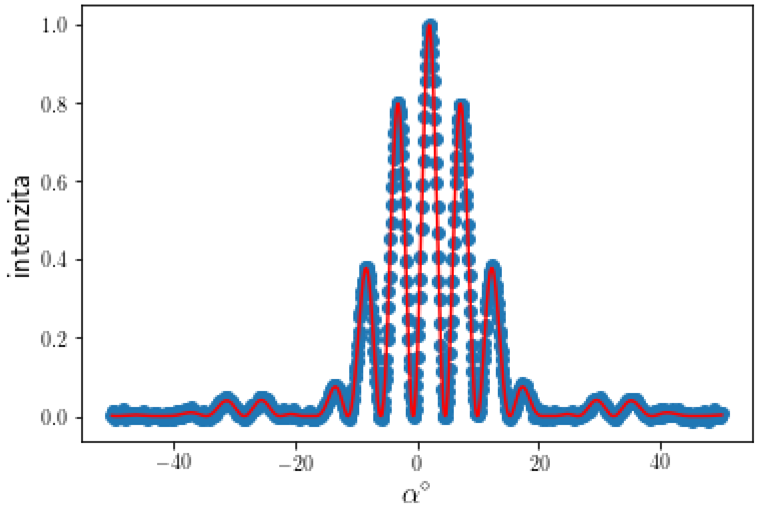
$$\chi^2(d,b,\alpha_0|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{[y_i - \lambda(\alpha_i|d,b,\alpha_0)]^2}{\sigma_i^2}$$

d = (0.4998 ± 0.0004) μm

b = (5.999 ± 0.001) μm

α_0 = (2.001 ± 0.001)°

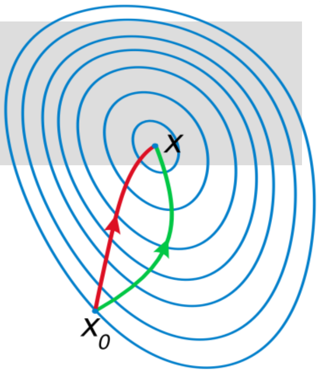




Python: funkce `np.curve_fit`

`dvojsterbina.py`

Newton – Raphsonův algoritmus



• iterativní metoda jak najít minimum χ^2

1. zvol počáteční odhad parametrů $\boldsymbol{\theta}_0 = (\theta_{1_0}, \theta_{2_0}, \ldots \theta_{m_0})$

2. Spočítej totální diferenciál χ^2 v bodě $\boldsymbol{\theta_0}$ $A_i = \nabla\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y})_i = \left.\frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_i}\right|_{\boldsymbol{\theta}_0}$ vektor ($m \times 1$)

a Hesseovu matici χ^2 v bodě $\boldsymbol{\theta_0}$ $H_{i,j} = \nabla^2\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y})_{i,j} = \left.\frac{\partial^2\chi^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\right|_{\boldsymbol{\theta}_0}$ (matice $m \times m$)

3. Spočítej upřesněný odhad $\boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{\theta}_0 - H^{-1}A$

inverzní matice k Hesseově matici v bodě $\boldsymbol{\theta_0}$

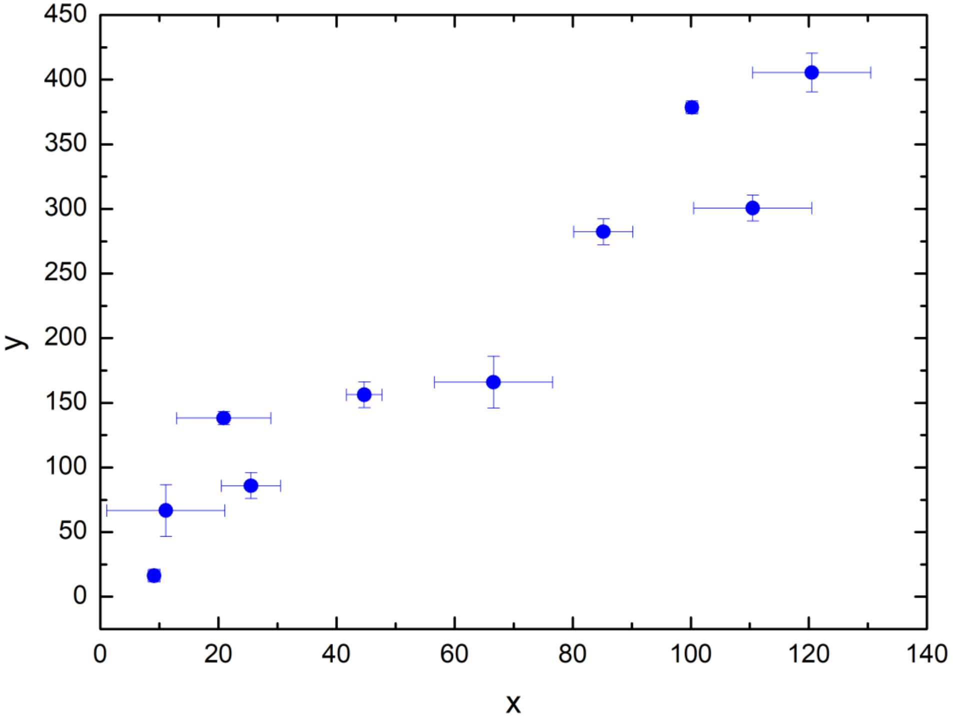
totální diferenciál v bodě $\boldsymbol{\theta_0}$

polož $\boldsymbol{\theta}_0 = \boldsymbol{\theta}_1$

opakuj dokud $\nabla\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \left.\frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_1}\right|_{\boldsymbol{\theta}_0} = 0$

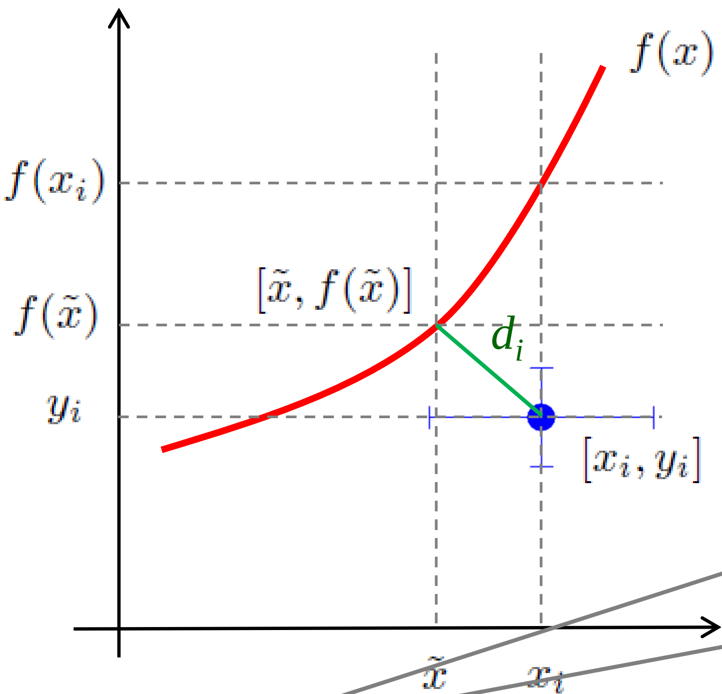
Metoda nejmenších čtverců – chyby obou proměnných

- jak x, tak y jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby x, σ_y – chyby y



Metoda nejmenších čtverců – chyby obou proměnných

- jak x, tak y jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby x, σ_y – chyby y



- d_i - vzdálenost bodu $[x_i, y_i]$ od modelové funkce

$$d_i^2 = (x_i - \tilde{x})^2 + (y_i - f(\tilde{x}))^2$$

- „vážená“ vzdálenost bodu $[x_i, y_i]$ od modelové funkce

$$d_i^2 = \frac{1}{\sigma_{xi}^2}(x_i - \tilde{x})^2 + \frac{1}{\sigma_{yi}^2}(y_i - f(\tilde{x}))^2$$

- Taylorův rozvoj modelové funkce $f(x) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i)$

$$d_i^2 = \frac{1}{\sigma_{xi}^2}(x_i - \tilde{x})^2 + \frac{1}{\sigma_{yi}^2}(y_i - f(x_i) - f'(x_i)(\tilde{x} - x_i))^2$$

- zjistíme pro jaké $\tilde{x}$ je „vážená“ vzdálenost minimální

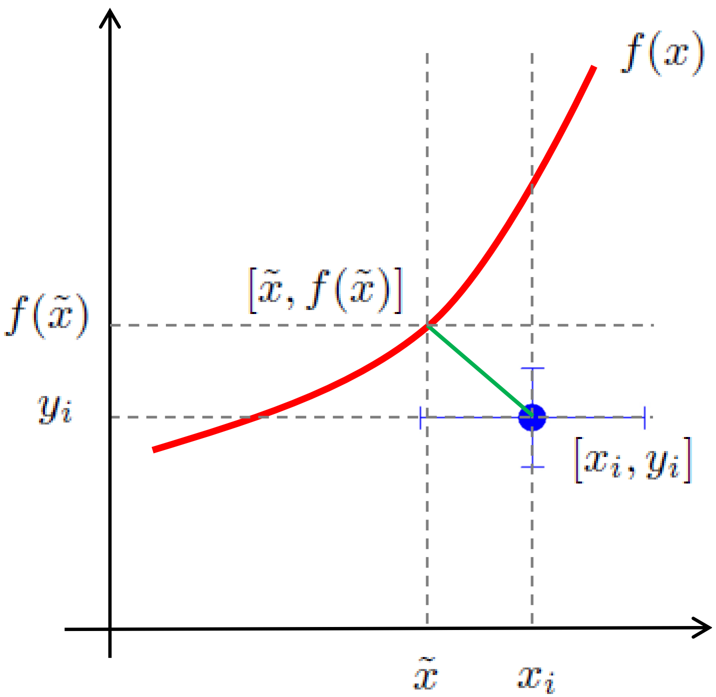
$$\frac{\partial d_i^2}{\partial \tilde{x}} = -2\frac{1}{\sigma_{xi}^2}(x_i - \tilde{x}) - 2\frac{1}{\sigma_{yi}^2}(y_i - f(x_i) - f'(x_i)(\tilde{x} - x_i))f'(x_i) = 0$$

$$(x_i - \tilde{x}) = \frac{-\frac{1}{\sigma_{yi}^2}(y_i - f(x_i))\,f'(x_i)}{\frac{1}{\sigma_{xi}^2} + \frac{1}{\sigma_{yi}^2}f'^2(x_i)}$$

dosadíme do d_i^2

Metoda nejmenších čtverců – chyby obou proměnných

- jak x, tak y jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby x, σ_y – chyby y



- d_i - vzdálenost bodu $[x_i, y_i]$ od modelové funkce

$$d_i^2 = (x_i - \tilde{x})^2 + (y_i - f(\tilde{x}))^2$$

- „vážená“ vzdálenost bodu $[x_i, y_i]$ od modelové funkce

$$d_i^2 = \frac{1}{\sigma_{x\,i}^2}(x_i - \tilde{x})^2 + \frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}(y_i - f(\tilde{x}))^2$$

- Taylorův rozvoj modelové funkce $\quad f(x) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i)$

$$d_i^2 = \frac{1}{\sigma_{x\,i}^2}(x_i - \tilde{x})^2 + \frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}(y_i - f(x_i) - f'(x_i)(\tilde{x} - x_i))^2$$

- zjistíme pro jaké $\tilde{x}$ je „vážená“ vzdálenost minimální

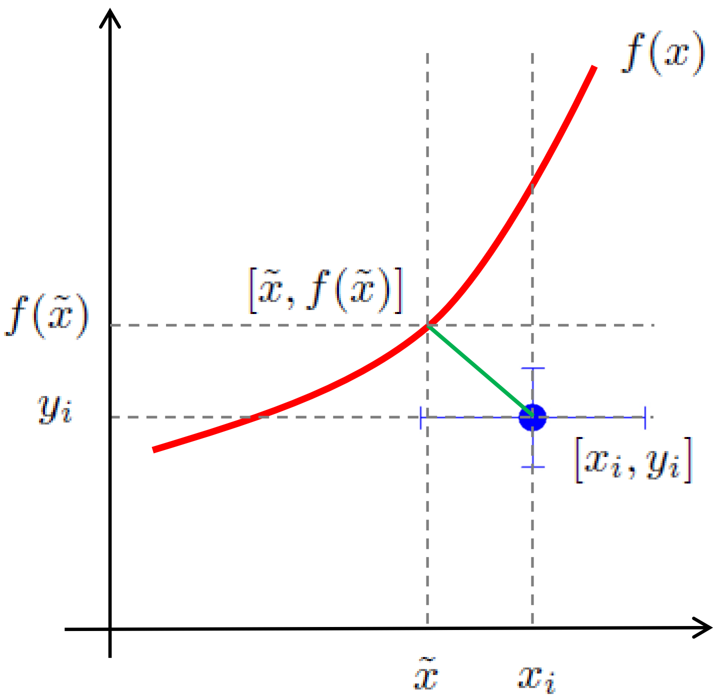
$$\frac{\partial d_i^2}{\partial \tilde{x}} = -2\frac{1}{\sigma_{x\,i}^2}(x_i - \tilde{x}) - 2\frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}(y_i - f(x_i) - f'(x_i)(\tilde{x} - x_i))f'(x_i) = 0$$

$$(x_i - \tilde{x}) = \frac{-\frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}(y_i - f(x_i))\,f'(x_i)}{\frac{1}{\sigma_{x\,i}^2} + \frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}f'^2(x_i)} \longrightarrow d_i^2 = \frac{\frac{1}{\sigma_{x\,i}^2}\frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}(y_i - f(x_i))^2}{\frac{1}{\sigma_{x\,i}^2} + \frac{1}{\sigma_{y\,i}^2}f'^2(x_i)} = \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_{y\,i}^2 + \sigma_{x\,i}^2 f'^2(x_i)}$$

dosadíme do d_i^2

Metoda nejmenších čtverců – chyby obou proměnných

- jak x, tak y jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby x, σ_y – chyby y



- „vážená“ vzdálenost bodu $[x_i, y_i]$ od modelové funkce

$$d_i^2 = \frac{\left(y_i - f(x_i)\right)^2}{\sigma_{y_i}^2 + \sigma_{x_i}^2 f'^2(x_i)}$$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} d_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(y_i - f(x_i)\right)^2}{\sigma_{y_i}^2 + \sigma_{x_i}^2 f'^2(x_i)}$$

- minimalizace χ^2

$y = f(x) \qquad x \longrightarrow x + dx$

- Taylorův rozvoj

$$f(x + dx) = f(x) + f'(x)dx = y + f'(x)dx$$

- celková chyba $\sigma^2 = \sigma_y^2 + f'(x)^2 \sigma_x^2$

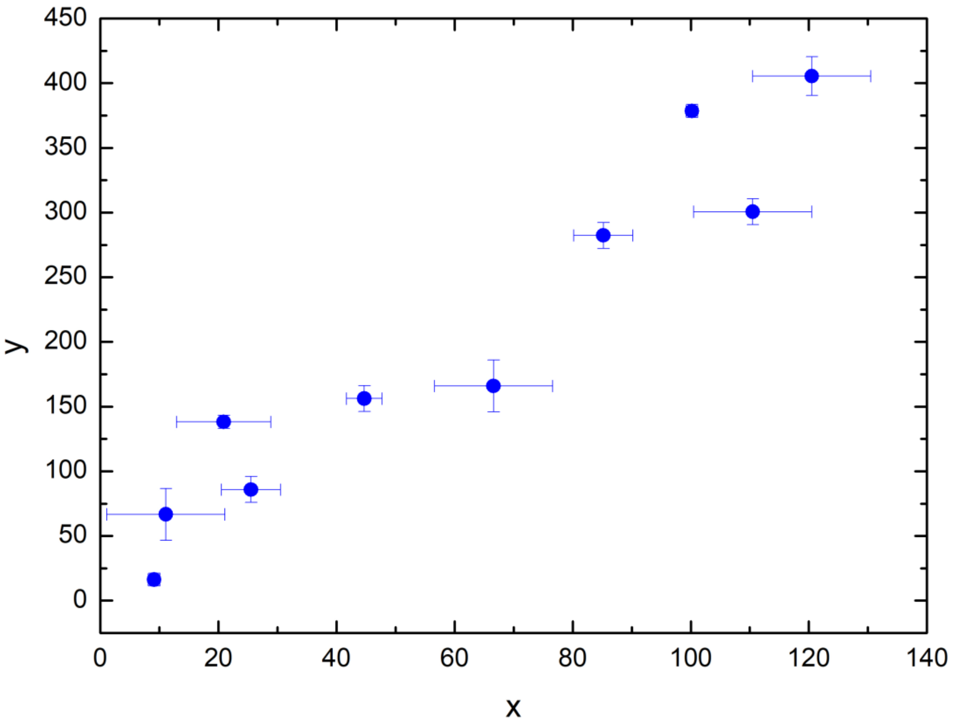
Lineární regrese – chyby obou proměnných

- jak *x*, tak *y* jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby *x*, σ_y – chyby *y*
- modelová funkce $f(x|a,b) = ax + b$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_{y_i}^2 + \sigma_{x\,i}^2 f'^2(x_i)}$$

$$f(x_i|a,b) = ax_i + b \qquad f'(x_i) = a$$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - ax_i - b)^2}{\sigma_{y_i}^2 + a^2\sigma_{x\,i}^2}$$



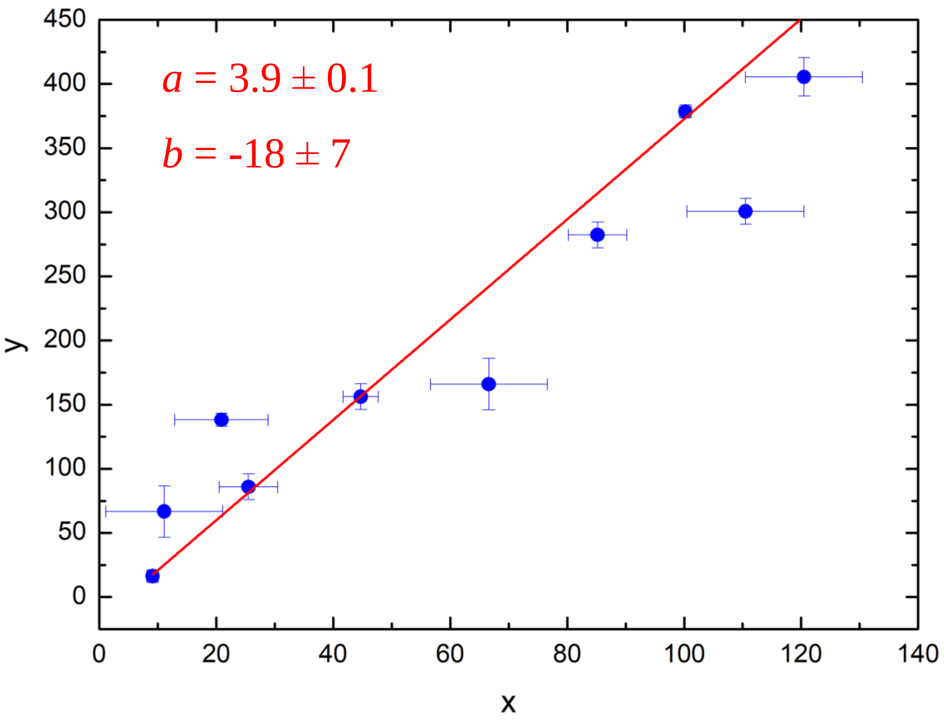
Lineární regrese – chyby obou proměnných

- jak *x*, tak *y* jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby *x*, σ_y – chyby *y*
- modelová funkce $f(x|a,b) = ax + b$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_{y_i}^2 + \sigma_{x\,i}^2 f'^2(x_i)}$$

$$f(x_i|a,b) = ax_i + b \qquad f'(x_i) = a$$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - ax_i - b)^2}{\sigma_{y_i}^2 + a^2\sigma_{x\,i}^2}$$



Lineární regrese – chyby obou proměnných

- jak *x*, tak *y* jsou náhodné proměnné
- σ_x - chyby *x*, σ_y – chyby *y*
- modelová funkce $f(x|a,b) = ax + b$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_{y_i}^2 + \sigma_{xi}^2 f'^2(x_i)}$$

$$f(x_i|a,b) = ax_i + b \qquad f'(x_i) = a$$

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - ax_i - b)^2}{\sigma_{y_i}^2 + a^2\sigma_{xi}^2}$$