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).

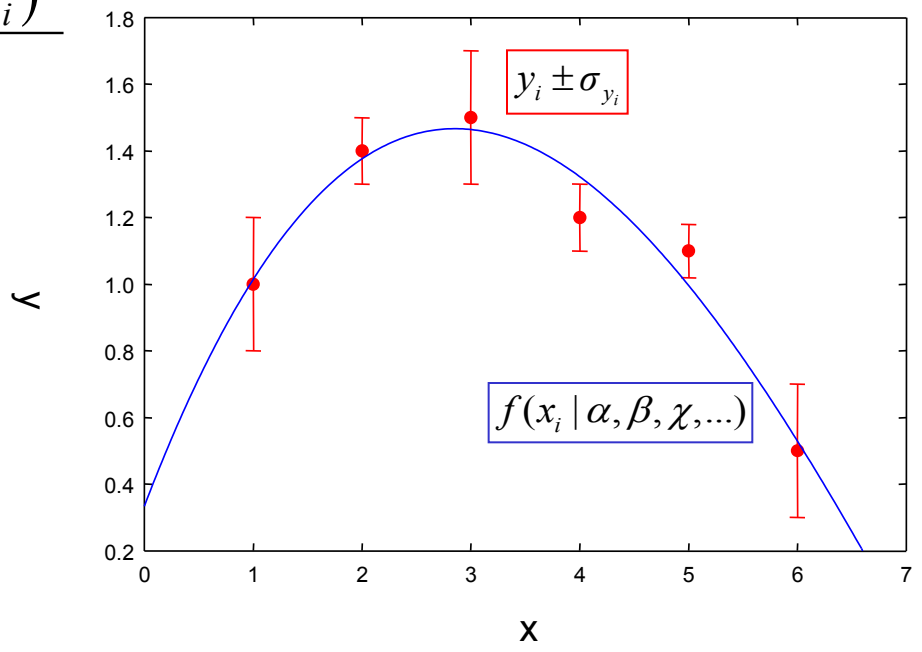
Metoda nejmenších čtverců

- Metoda početní interpolace.
- Používá se pro získání odhadů parametrů $(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \ldots)$:

  1) Zkonstruujeme veličinu

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

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

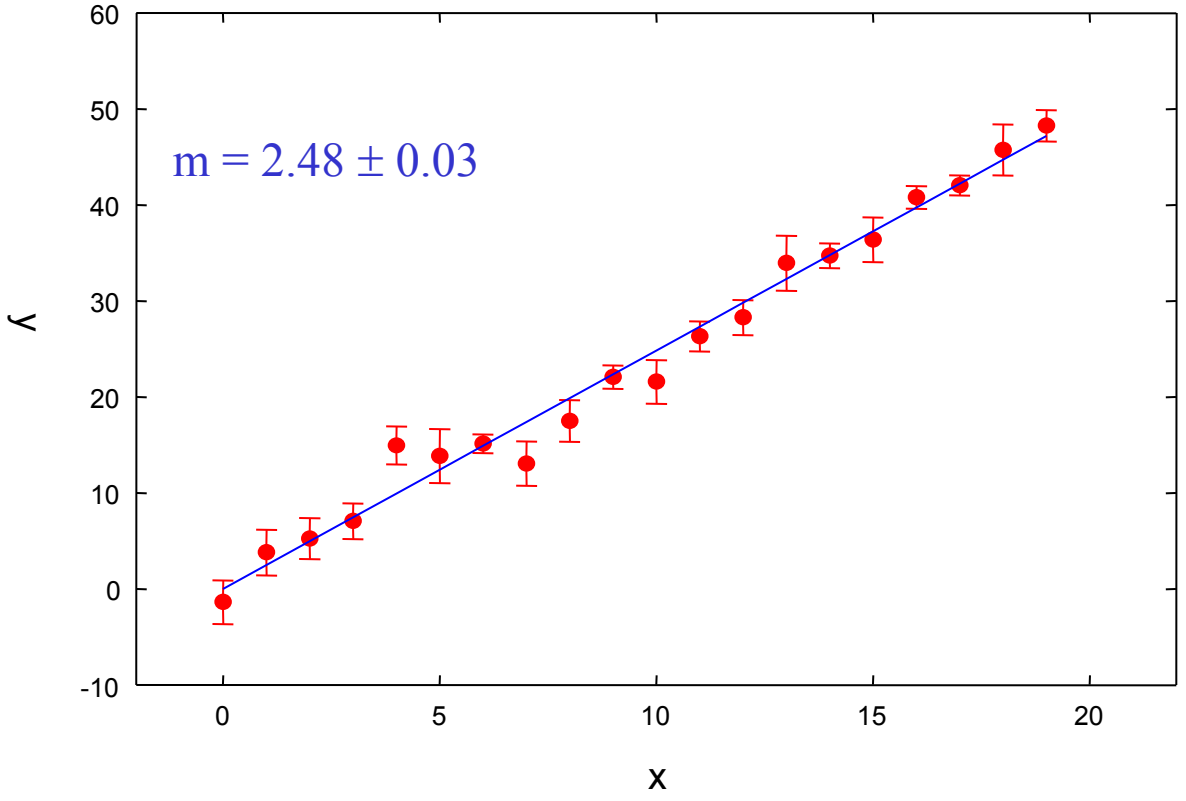


Metoda nejmenších čtverců – přímka procházející počátkem

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

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

- disperze m: $\sigma_{\tilde{m}}^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_{y_i}^2}}$
- $m = \tilde{m} \pm \sigma_{\tilde{m}}$
- 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 $\sigma^2_{\tilde{m}} = \dfrac{\sigma_y^2}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2}$

  - 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: $[x_i, y_i] \quad i = 1, \dots, n$

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

• minimalizace χ^2: $\frac{\partial \chi^2}{\partial \beta_1} = 0 \quad \frac{\partial \chi^2}{\partial \beta_0} = 0$

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?
→ $\mathrm{Cov}(\beta_0, \beta_1)$

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

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

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

Maticové vyjádření

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

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

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

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

Matice plánu (konstrukční matice, design matrix):

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & \cdots & f_m(x_n) \end{pmatrix} \quad \leftarrow \text{matice } m \times n,\ m \leq n$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}} \|\boldsymbol{A\beta - y}\|^2 = 0 \quad \rightarrow \text{řešení pro parametry: } \boldsymbol{\beta = (A^T A)^{-1} A^T y = Hy}$$

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

→ kovarianční matice: $U_{ij} = \mathrm{Cov}(\beta_i, \beta_j)$, $V_{ij} = \mathrm{Cov}(y_i, y_j)$

$$\boldsymbol{U = HVH^T}$$

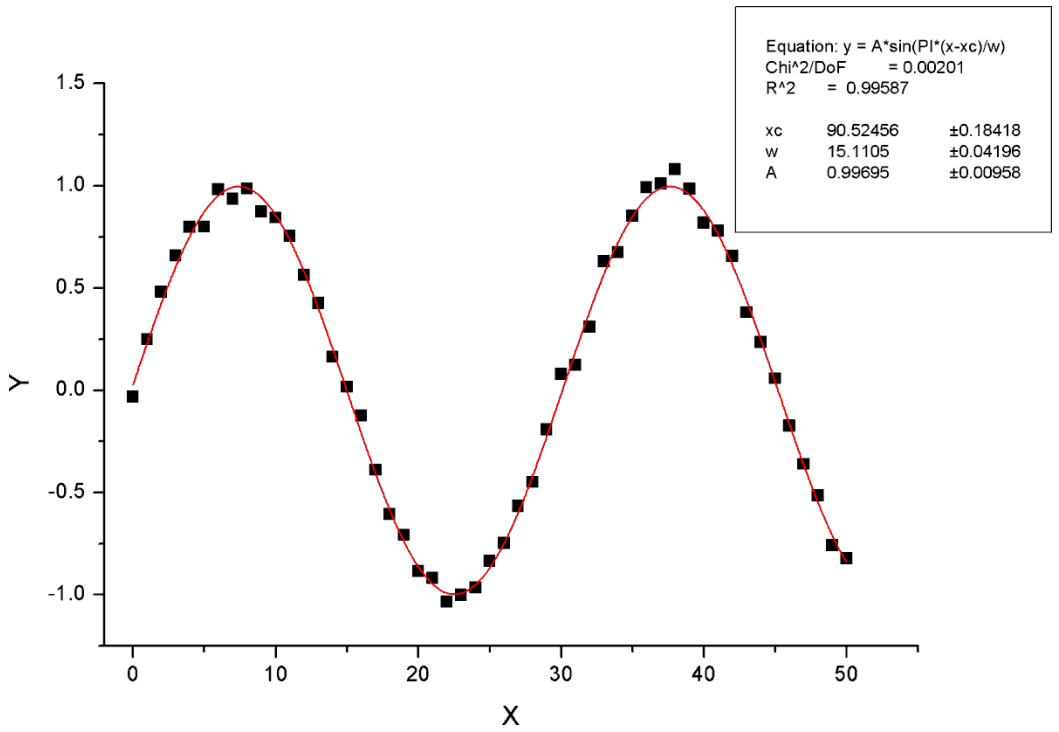
Fitování

- 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, ...



Testování hypotéz

Příklad:
Z 30 hodů mincí padl 19x orel a 11x panna. Je mince **poctivá**? ($\alpha = 5\ \%$)

Testování hypotéz

Příklad:
Z 30 hodů mincí padl 19x orel a 11x panna. Je mince **poctivá**? (α = 5 %)

nulová hypotéza H_0: mince je poctivá (výsledky se řídí binom. rozdělením s p=½)
alternativní hypotéza H_1: mince není poctivá (nemá binomické rozdělení s p=½)

- spočítáme p-hodnotu: pravděpodobnost, že poctivá mince dá pozorovaný výsledek

$$\sum_{k=19}^{30} B\left(N = 30, k, p = \tfrac{1}{2}\right) = 0{,}100244...$$

- p-hodnota je v našem případě pravděpodobnost, že: padne 19x a více orel, nebo padne 19x a více panna

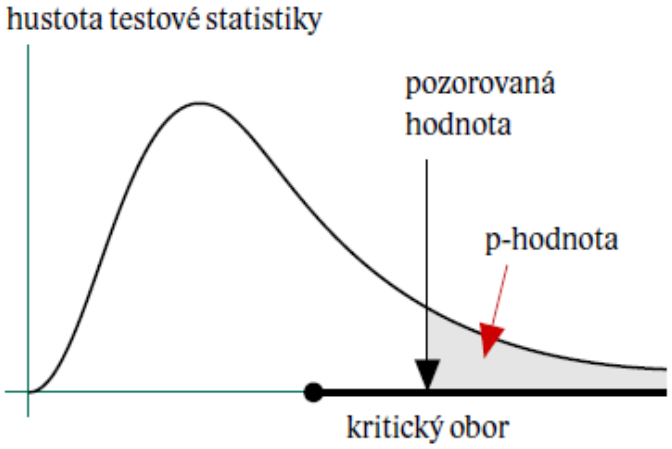
p-hodnota = 2x 0,100244 ~ 0,2

- p-hodnota je větší než hladina významnosti 5%, **hypotézu** tedy **nezamítneme**.

např. pro 21x orel a 9x panna už by p-hodnota byla 0,043 a H_0 bychom zamítli.

Testování hypotéz - pojmy

- **Statistická hypotéza** – testovatelné tvrzení (např. rozdělení zkoumané veličiny, parametry, ...)
- **Test hypotézy** - pravidlo, pomocí kterého hypotézu **zamítneme** nebo **nezamítneme**.
  - obvykle stavíme proti sobě: *nulová hypotéza* H_0 vs. *alternativní hypotéza* H_1
- Chyba: - pokud je platná hypotéza zamítnuta (chyba 1. druhu) α
  - pokud neplatná hypotéza zamítnuta není (chyba 2. druhu) β
  - pravděpodobnost výskytu chyb určuje kvalitu našeho testu.
- **Hladina významnosti** α: pravděpodobnost chyby 1. druhu nepřekročí hodnotu α
- **Síla testu**: $1 - \beta$
- Testovací kritérium - testovací statistika



p-hodnota: jak často nastává situace svědčící proti testované hypotéze.

hypotézu H_0 zamítáme na hladině pravděpodobnosti α, pokud je p-hodnota $< \alpha$

(kritický obor - množina hodnot, pro které test hypotézu zamítá)

χ^2-test

• užitečný při fitování

$x_1, x_2, \dots, xn$

$y_1, y_2, \dots, yn$

$y = f(x|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k)$

testovací statistika:

$$X^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{\left(y_i - f(x_i|\alpha_1, \dots, \alpha_k)\right)^2}{\sigma_i^2}$$

$$f(x) = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} x^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

srovnáváme s χ^2 rozdělením s $n - k$ stupni volnosti:

Pokud $X^2 > \chi^2_{1-\alpha}(n-k)$, hypotézu (fit) zamítneme
(na hladině významnosti α)

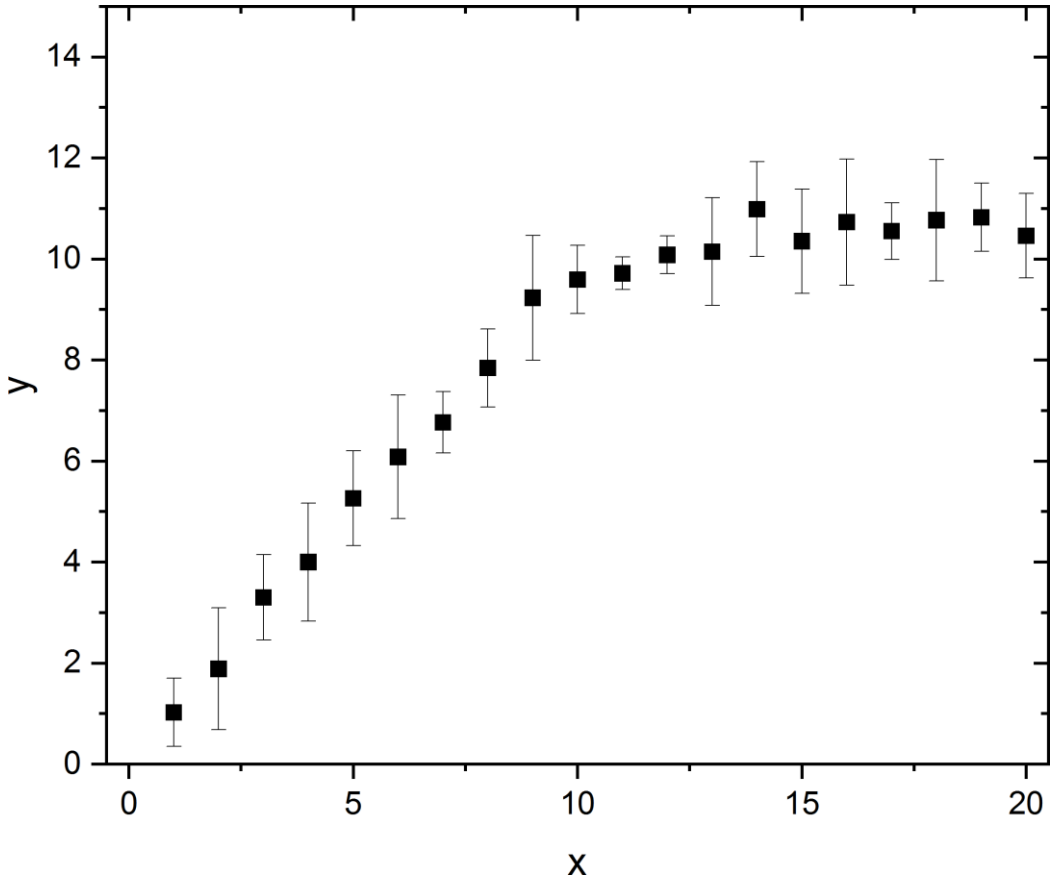
χ^2-test

χ^2 rozdělení s $n - k$ stupni volnosti:

α	0.9	0.7	0.5	0.3	0.2	0.1	**0.05**	**0.02**	**0.01**	**0.001**
n-k										
1	0.02	0.15	0.45	1.07	1.64	2.71	3.84	5.41	6.63	10.83
2	0.21	0.71	1.39	2.41	3.22	4.61	5.99	7.82	9.21	13.82
3	0.58	1.42	2.37	3.66	4.64	6.25	7.81	9.84	11.34	16.27
4	1.06	2.19	3.36	4.88	5.99	7.78	9.49	11.67	13.28	18.47
5	1.61	3.00	4.35	6.06	7.29	9.24	11.07	13.39	15.09	20.52
6	2.20	3.83	5.35	7.23	8.56	10.64	12.59	15.03	16.81	22.46
7	2.83	4.67	6.35	8.38	9.80	12.02	14.07	16.62	18.48	24.32
8	3.49	5.53	7.34	9.52	11.03	13.36	15.51	18.17	20.09	26.12
9	4.17	6.39	8.34	10.66	12.24	14.68	16.92	19.68	21.67	27.88
10	4.87	7.27	9.34	11.78	13.44	15.99	18.31	21.16	23.21	29.59
12	6.30	9.03	11.34	14.01	15.81	18.55	21.03	24.05	26.22	32.91
15	8.55	11.72	14.34	17.32	19.31	22.31	25.00	28.26	30.58	37.70
20	12.44	16.27	19.34	22.77	25.04	28.41	31.41	35.02	37.57	45.31
30	20.60	25.51	29.34	33.53	36.25	40.26	43.77	47.96	50.89	59.70
50	37.69	44.31	49.33	54.72	58.16	63.17	67.50	72.61	76.15	86.66
100	82.36	92.13	99.33	106.91	111.67	118.50	124.34	131.14	135.81	149.45

χ^2-test kvality fitu

n = 20



χ^2-test kvality fitu

n = 20 k = 1, n-k = 19

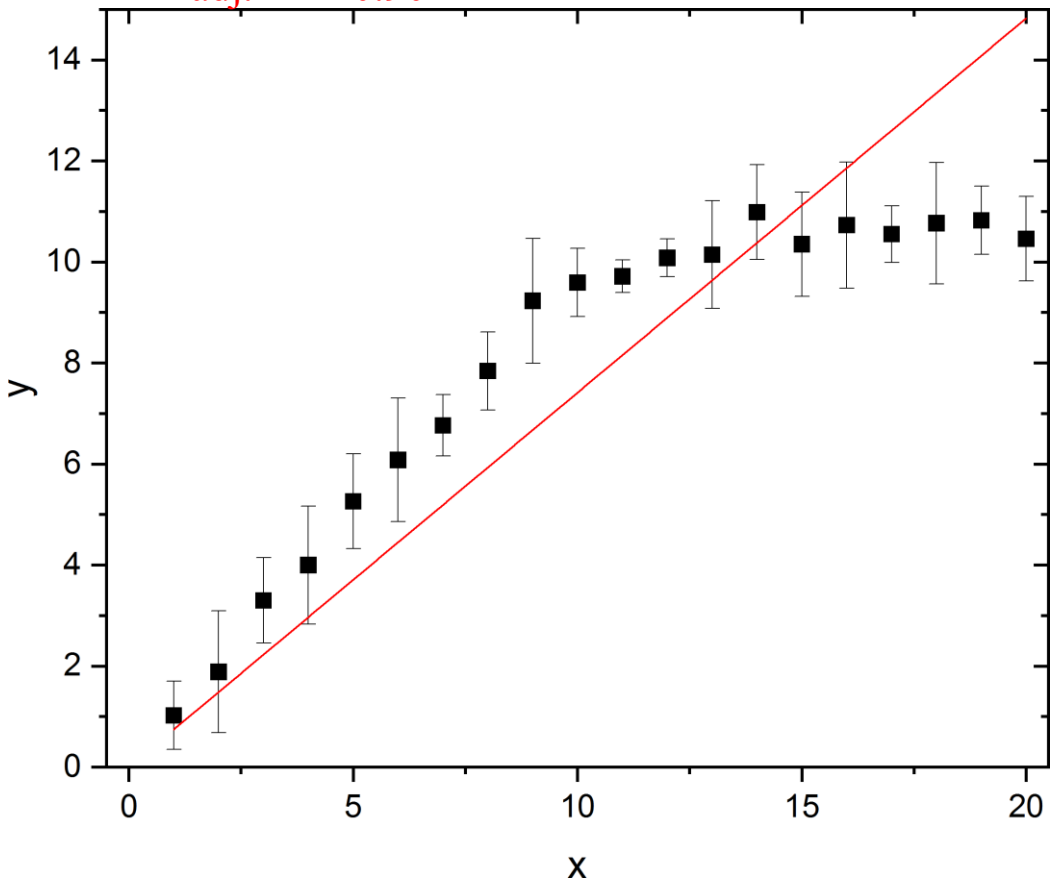
$\chi^2 = 138.77$

$\chi^2 / (n-k) = 7.304$

$R = 0.9797$

$R^2 = 0.9599$

adj. $R^2 = 0.9024$

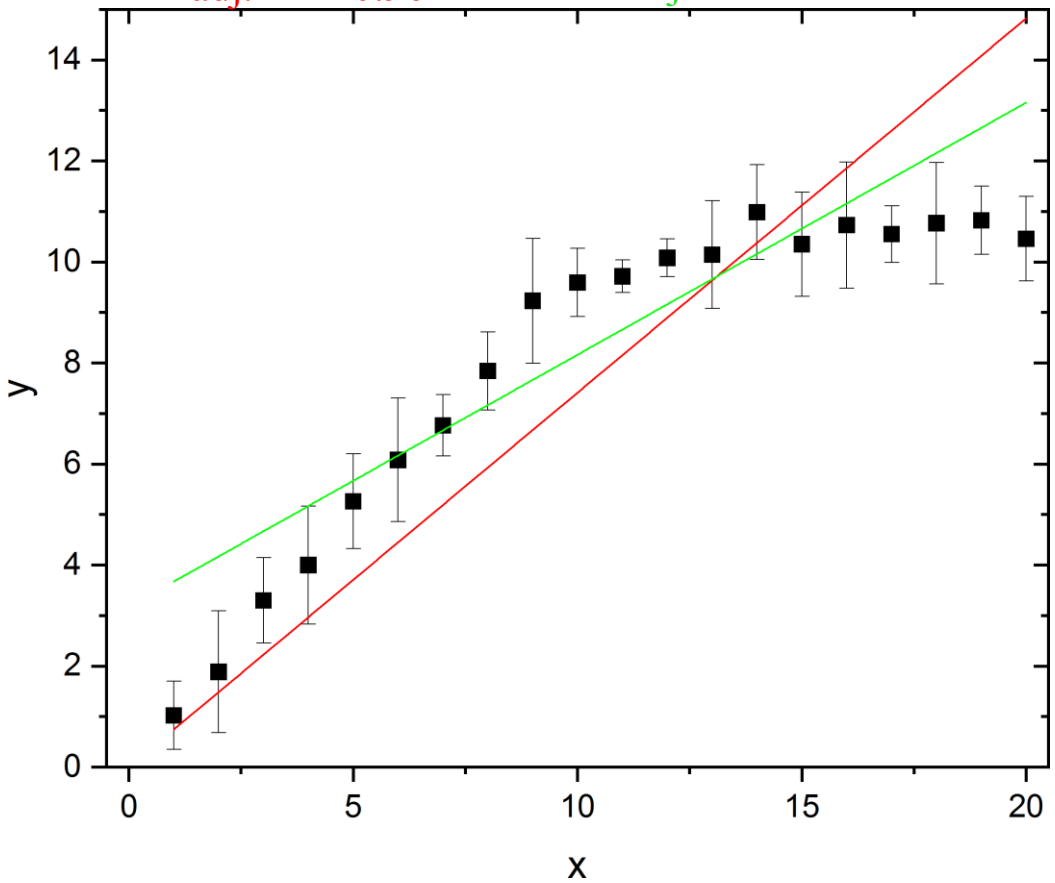


χ^2-test kvality fitu

n = 20

k = 1, n-k = 19
χ^2 = 138.77
χ^2 / (n-k) = 7.304
R = 0.9797
R^2 = 0.9599
adj. R^2 = 0.9024

k = 2, n-k = 18
χ^2 = 70.431
χ^2 / (n-k) = 3.913
R = 0.88078
R^2 = 0.77577
adj. R^2 = 0.76332



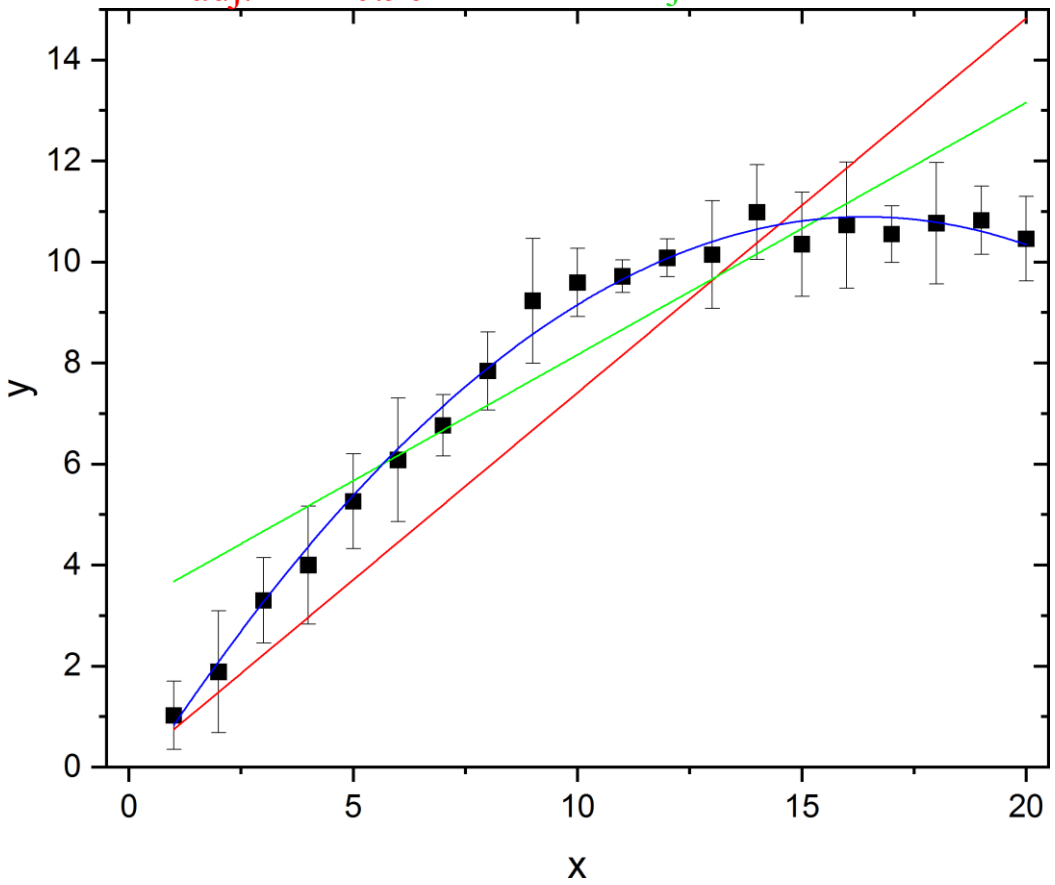
χ^2-test kvality fitu

n = 20

k = 1, n-k = 19
χ^2 = 138.77
χ^2 / (n-k) = 7.304
R = 0.9797
R^2 = 0.9599
adj. R^2 = 0.9024

k = 2, n-k = 18
χ^2 = 70.431
χ^2 / (n-k) = 3.913
R = 0.88078
R^2 = 0.77577
adj. R^2 = 0.76332

k = 3, n-k = 17
χ^2 = 2.2635
χ^2 / (n-k) = 0.1331
R = 0.9964
R^2 = 0.9928
adj. R^2 = 0.9920



χ^2-test kvality fitu

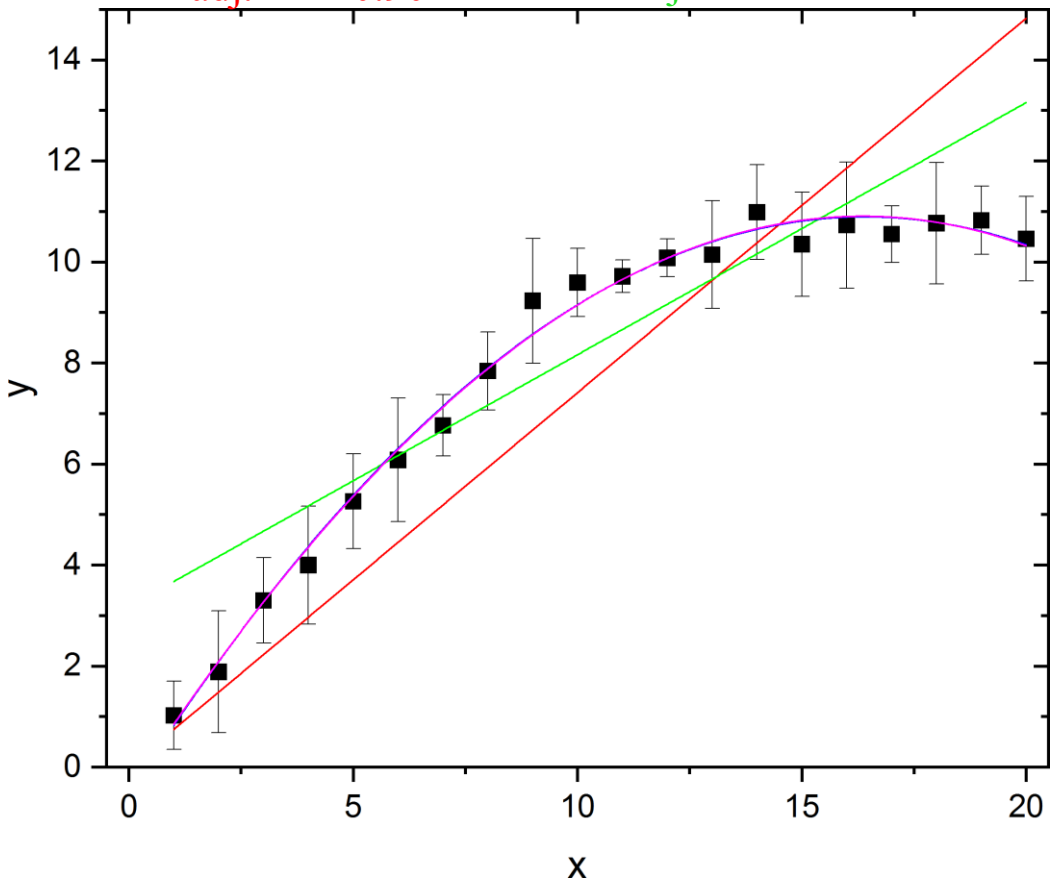
n = 20

k = 1, n-k = 19
χ^2 = 138.77
χ^2 / (n-k) = 7.304
R = 0.9797
R^2 = 0.9599
adj. R^2 = 0.9024

k = 2, n-k = 18
χ^2 = 70.431
χ^2 / (n-k) = 3.913
R = 0.88078
R^2 = 0.77577
adj. R^2 = 0.76332

k = 3, n-k = 17
χ^2 = 2.2635
χ^2 / (n-k) = 0.1331
R = 0.9964
R^2 = 0.9928
adj. R^2 = 0.9920

k = 4, n-k = 13
χ^2 = 2.25921
χ^2 / (n-k) = 0.12561
R = 0.9964
R^2 = 0.9928
adj. R^2 = 0.9915



χ^2-test kvality fitu

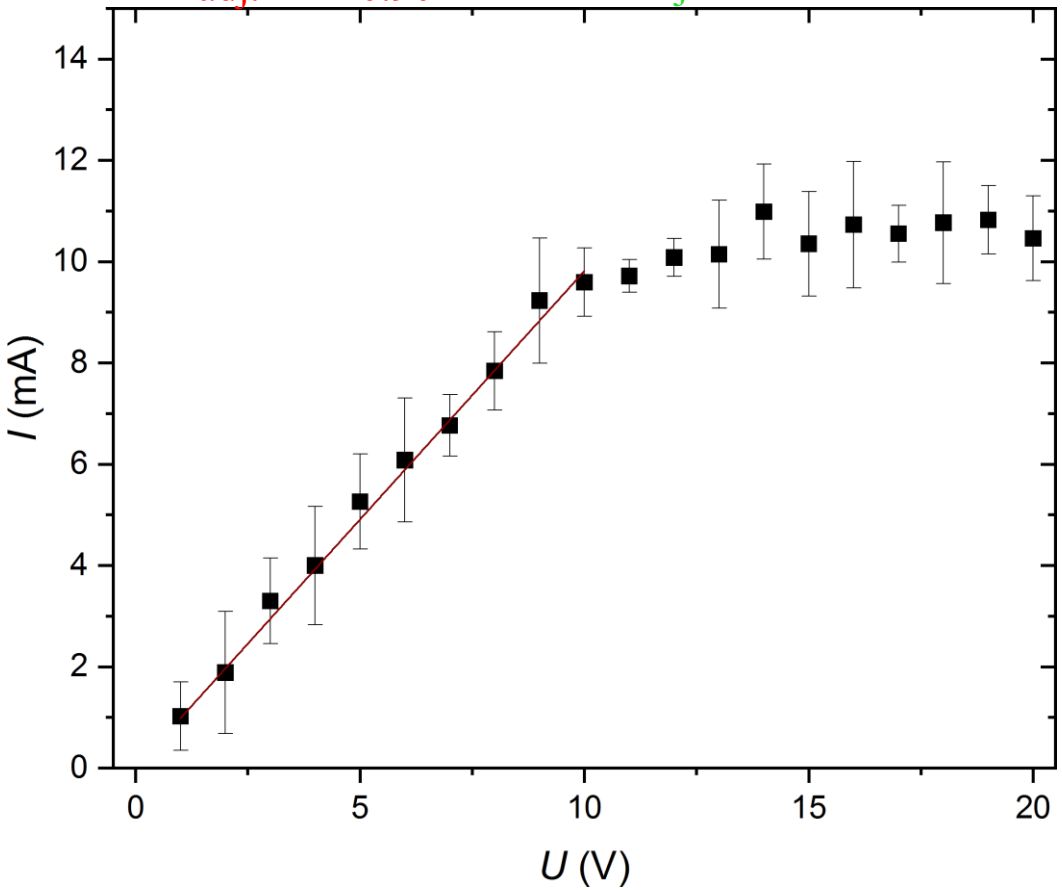
n = 20

k = 1, n-k = 19
χ^2 = 138.77
χ^2 / (n-k) = 7.304
R = 0.9797
R^2 = 0.9599
adj. R^2 = 0.9024

k = 2, n-k = 18
χ^2 = 70.431
χ^2 / (n-k) = 3.913
R = 0.88078
R^2 = 0.77577
adj. R^2 = 0.76332

k = 3, n-k = 17
χ^2 = 2.2635
χ^2 / (n-k) = 0.1331
R = 0.9964
R^2 = 0.9928
adj. R^2 = 0.9920

k = 4, n-k = 13
χ^2 = 2.25921
χ^2 / (n-k) = 0.12561
R = 0.9964
R^2 = 0.9928
adj. R^2 = 0.9915



n = 10
k = 1, n-k = 9
χ^2 = 0.59918
χ^2 / (n-k) = 0.06658
R = 0.9995
R^2 = 0.9990
adj. R^2 = 0.9988

Residuální analýza, …

Z-test

Pro případy, kdy **známe parametry** μ, σ veličiny x
nebo máme **dostatečný vzorek** ($n \gtrsim 50$)

Testujeme vůči normálnímu rozdělení:

• H_0: $\bar{x} = \mu_0$ (zamítáme, když by $\bar{x} - \mu_0$ bylo příliš velké)

standardizované skóre $z = \frac{\bar{x}-\mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}$ srovnáváme s $N(0,1)$:

$$p = \int_{-\infty}^{-z} e^{-\frac{x^2}{2}}\, dx + \int_{z}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}}\, dx$$

Pro naši minci: $z = \frac{19-Np}{\sqrt{Np(1-p)}} = \frac{19-15}{\sqrt{7.5}} \doteq 1.46$

p-hodnota: 0.144 vs. $\alpha = 0.05$

t-test

Pro případy, kdy **neznáme parametry** μ, σ veličiny x
a máme **malý vzorek** $(n \lesssim 50)$

$$f(t) \equiv \frac{x}{y} = \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(1 - \frac{t^2}{n}\right)^{-\frac{n-1}{2}}$$

Testujeme vůči Studentovu t-rozdělení s $n - 2$ stupni volnosti:

• H_0: $\bar{x} = \mu_0$ (zamítáme, když by $\bar{x} - \mu_0$ bylo příliš velké)

testovací statistika: $t = \frac{\bar{x} - \mu_0}{\frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}}}$ $\hat{\sigma}$ je odhad σ ze vzorku x_n

Také se používá pro testování dvou nezávislých vzorků x_n, y_n:

$$t = \frac{\bar{x} - \bar{y} - d}{\sqrt{\frac{s_x^2}{n_x} + \frac{s_y^2}{n_y}}}$$

Další testování - Benfordův zákon, ...

- Jaké jsou četnosti prvních číslic v datech? → Benfordův zákon

- Jak správně falšovat volby?