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, ...):

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

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

- 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).

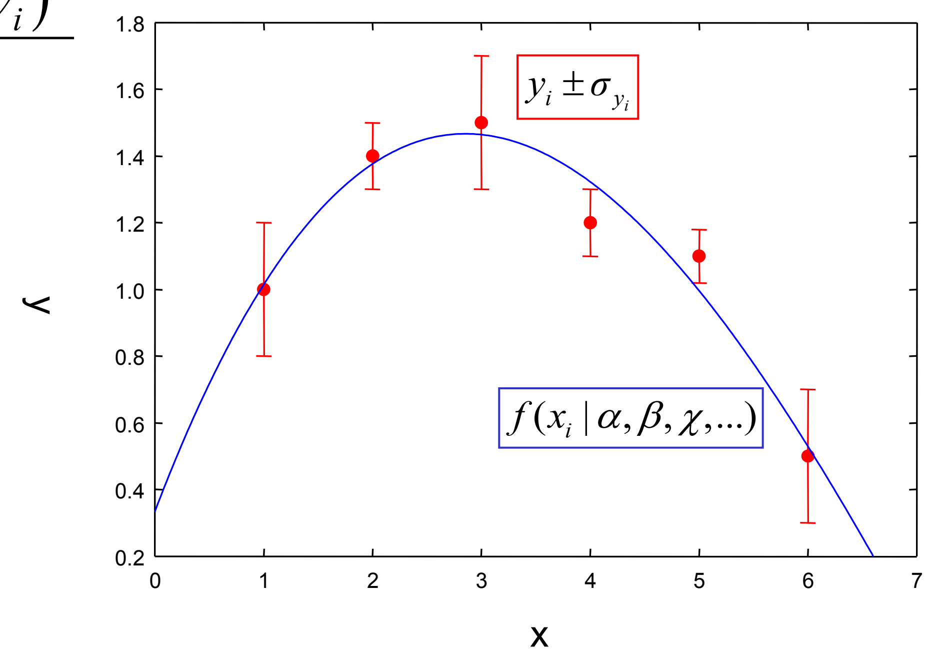
Metoda nejmenších čtverců

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

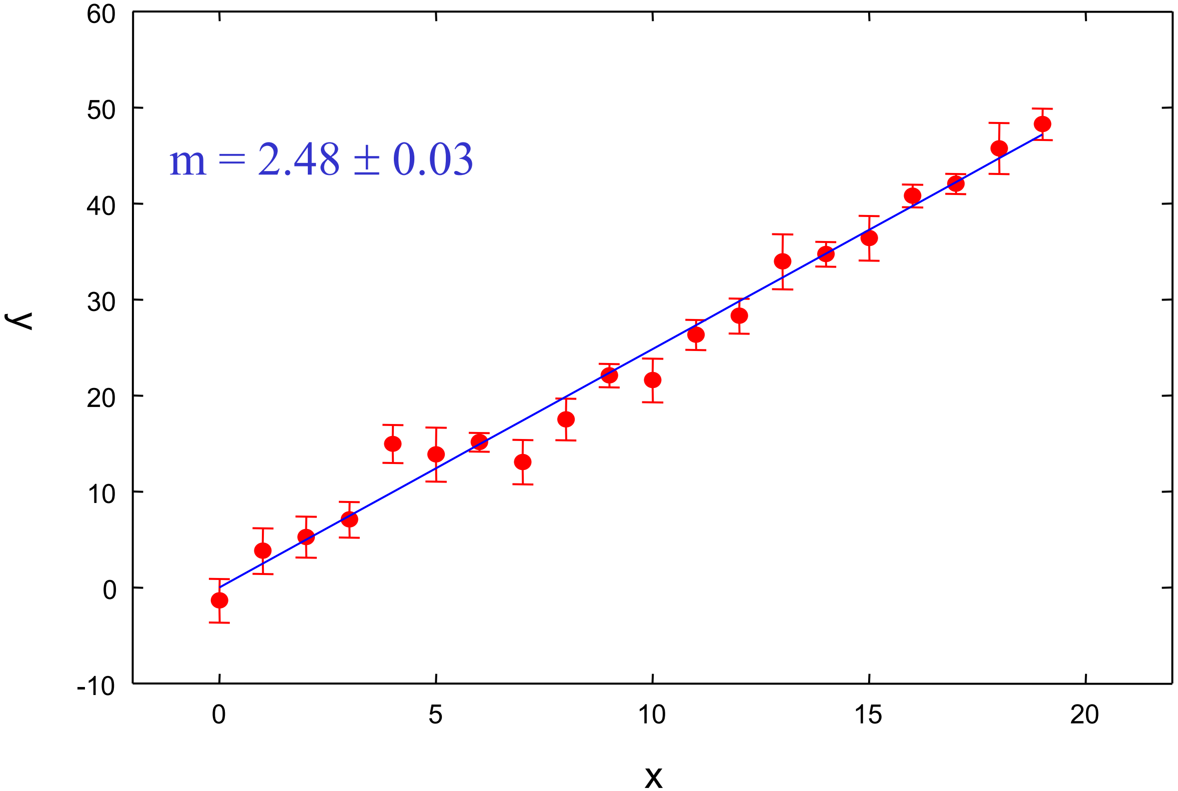


Metoda nejmenších čtverců – přímka procházející počátkem

- $y = mx$
- $\chi^2(m) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(mx_i - y_i)^2}{\sigma_{y_i}^2}$
- 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 $\sigma_{\tilde{m}}^2 = \dfrac{\sigma_y^2}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2}$

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

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

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

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?
$\rightarrow$ Cov(β_0, β_1)

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

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

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

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):

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

$\leftarrow$ matice $m \times n$, $m \leq n$

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

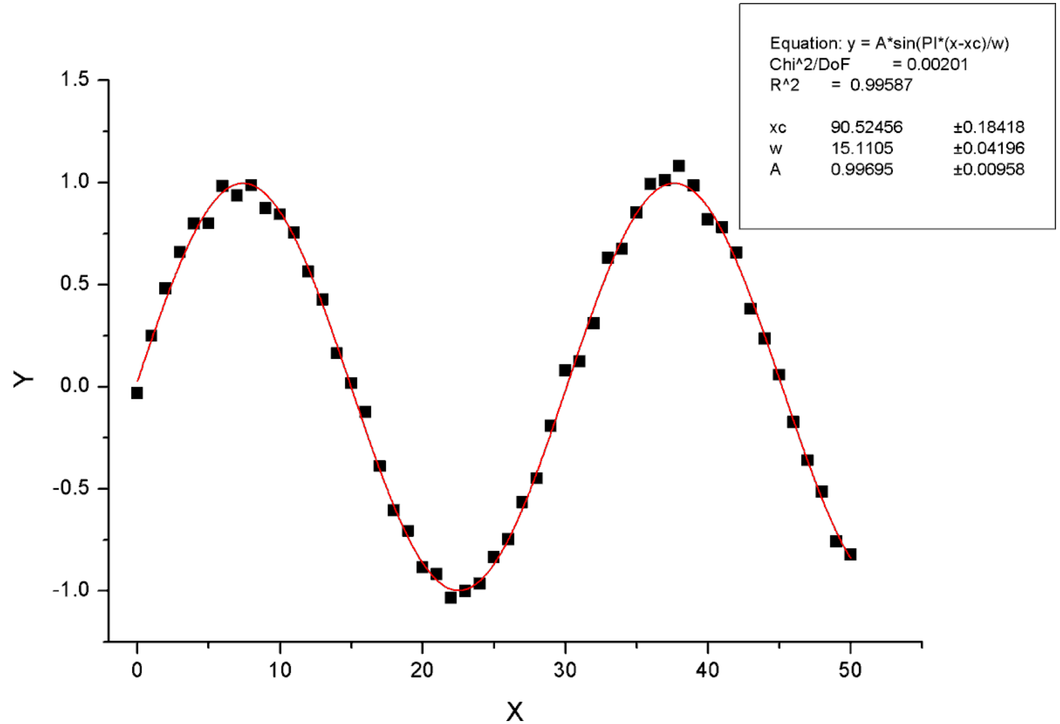
Jak jsou parametry (ne)závislé? $\rightarrow$ kovarianční matice: $U_{ij} = \mathrm{Cov}(\beta_i, \beta_j)$, $V_{ij} = \mathrm{Cov}(y_i, y_j)$ $\quad \boldsymbol{U} = \boldsymbol{HVH}^T$

$\mathrm{Cov}(\beta_0, \beta_1)$

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, ...