

Komputerowa Analiza Danych Doświadczalnych

Prowadząca:
dr inż. Hanna Zbroszczyk

e-mail: *gos@if.pw.edu.pl*

tel: +48 22 234 58 51

konsultacje: poniedziałek: 10-11, piątek: 11-12

www: <http://www.if.pw.edu.pl/~gos/students/kadd>

Politechnika Warszawska
Wydział Fizyki
Pok. 117b (wejście przez 115)

**METODA
NAJMNIEJSZYCH
KWADRATÓW**

METODA NAJMNIEJSZYCH KWADRATÓW

- Zaproponowana przez Legendre'a i Gauss'a.
- Założenie:

Wynik pomiaru y_j to suma wielkości x (nieznanej) i niepewności pomiarowej ϵ_j .

$$y_j = x + \epsilon_j$$

Wartości ϵ_j są dobierane tak, aby **suma kwadratów** niepewności była jak **najmniejsza**.

$$\sum_j \epsilon_j^2 = \sum_j (x - y_j)^2 = \min$$

1) Pomiarы bezpośrednie o równej i różnej dokładności

1) Równa dokładność.

- **n pomiarów** nieznaney wielkości x .
- wyniki pomiarów obarczone są **niepewnościami pomiarowymi** ϵ_j . (opisanymi rozkładem normalnym)

$$y_j = x + \epsilon_j \quad E(\epsilon_j) = 0 \quad E(\epsilon_j^2) = \sigma^2$$

- **Prawdopodobieństwo** uzyskania wartości y_j jako wyniku pojedynczego pomiaru (wewnątrz przedziału dy)

$$f_j dy = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_j - x)^2}{2\sigma^2}\right) dy$$

- Logarytmiczna **funkcja wiarygodności**:

$$l = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^n (y_j - x)^2 + const$$

- Warunek największej wiarygodności: **$l = \max$** , tożsamy z:

- **Warunek najmniejszych kwadratów**

$$M = \sum_{j=1}^n (y_j - x)^2 = \sum_{j=1}^n \epsilon_j^2 = \min$$

- **Estymatory**:

$$\tilde{x} = \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j \quad \sigma^2(\bar{y}) = \frac{\sigma^2}{n} \quad \Delta \tilde{x} = \frac{\Delta y}{\sqrt{n}}$$

2) Pomiarы bezpośrednie o równej i różnej dokładności

2) Różna dokładność.

- **n** pomiarów nieznaney wielkości x .

- Wyniki pomiarów obarczone są **niepewnościami** ϵ_j (opisane rozkładem normalnym)

$$y_j = x + \epsilon_j \quad E(\epsilon_j) = 0 \quad E(\epsilon_j^2) = \sigma_j^2 = \frac{1}{g_j}$$

- **Metoda największej wiarygodności:**

$$M = \sum_{j=1}^n \frac{(y_j - x)^2}{\sigma_j^2} = \sum_{j=1}^n g_j^2 (y_j - x)^2 = \sum_{j=1}^n g_j^2 \epsilon_j^2 = \min$$

- **Estymatory:**

$$\tilde{x} = \frac{\sum_{j=1}^n g_j y_j}{\sum_{j=1}^n g_j}$$

Średnia ważona poszczególnych pomiarów (wyniki o dużej wariancji nie wpływają na wynik)

$$\sigma^2(\tilde{x}) = \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{\sigma_j^2} \right)^{-1} = \left(\sum_{j=1}^n g_j \right)^{-1}$$

Estymator wariancji

$$\tilde{\epsilon}_j = y_j - \tilde{x}$$

Najlepszy estymator niepewności pomiarowej

Pomiary bezpośrednie o równej i różnej dokładności

- Wielkość ta ma **rozkład normalny** z wartością średnią =0 oraz wariancją σ_j^2
- Wielkości $\tilde{\epsilon}_j/\sigma_j$ pochodzą ze standardowego rozkładu Gaussa.
- **Suma kwadratów:**

$$M = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\tilde{\epsilon}_j}{\sigma_j} \right)^2 = \sum_{j=1}^n \frac{(y_j - x)^2}{\sigma_j^2} = \sum_{j=1}^n g_j^2 (y_j - x)^2$$

ma rozkład χ^2 o n-1 stopniach swobody.

Średnia ważona z pomiarów o różnej dokładności – przykład.

M = 7.2. Poziom istotności 5%. n=3 stopnie swobody. $\chi_{0.95}^2 = 7.82$

j	y_j	σ_j	$g_j = 1/\sigma_j^2$	$y_j g_j$	$y_j - \tilde{x}$	$(y_j - \tilde{x})^2 g_j$
1	498.1	0.4	6.3	3038.0	0.2	0.3
2	497.4	0.33	10	4974.4	-0.46	2.1
3	498.9	0.5	4	1995.6	1.0	4.0
4	497.4	0.5	4	1989.8	-0.46	0.8
Σ			24.3	11997.8		7.2

$$\tilde{x} = \sum y_j g_j / \sum g_j = 497.9 \quad \Delta \tilde{x} = \left(\sum g_j \right)^{-1/2}$$

Najlepsza wartość masy K_0 : $m_{K_0} = (497.9 \pm 0.2) \text{ MeV}$

Pomiary bezpośrednie o równej i różnej dokładności

Co można zrobić, kiedy test χ^2 daje odpowiedź **negatywną**?

- 1) Odrzucić hipotezę i zaniechać dalszych badań
- 2) W praktyce to wyście niezadowalające.. (aby poczekać do pobrania nowej próby).

Trzeba przyrzeć się punktom pomiarowym (jeśli np. ewidentnie punkt lub dwa odbiegają od wyników pozostałych pomiarów (bo np. są obarczone dodatkową niepewnością systematyczną), to taka niepewność pomiarowa należy zwiększyć poprzez tzw. czynnik skalujący): $\sqrt{M/(n-1)}$

$$\sigma_j' = \sigma_j \sqrt{\frac{M}{n-1}}$$

Po przeskalowaniu wartość średniej nie ulegnie zmianie, lecz wartość wariancji tak.

$$\sigma_j'^2 = \frac{M}{n-1} \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{\sigma_j^2} \right)^{-1}$$

$$M' = \frac{n-1}{M} \sum_{j=1}^n \frac{(y_j - x)^2}{\sigma_j^2} = \frac{n-1}{M} M = n-1$$

M' jest równe wartości oczekiwanej χ^2 o $n-1$ topniach swobody.

Procedurę taką należy stosować z dużą dozą ostrożności!

2a) Pomiar pośrednie, przypadek liniowy

- **Ogólny przypadek** kilku (r) nieznanymi wielkośći (x_i ; $i=1, 2, \dots, r$),
- Wielkości te **nie podlegają** bezpośrednim pomiarom.
- Mierzone są ich **liniowe funkcje**: $\eta_j = p_{j0} + p_{j1}x_1 + p_{j2}x_2 + \dots + p_{jr}x_r$

$$f_j = \eta_j + a_{j0} + a_{j1}x_1 + a_{j2}x_2 + \dots + a_{jr}x_r = 0$$

- Zdefiniujemy wektor w postaci **kolumny**:

$$\mathbf{a}_j = \begin{pmatrix} a_{j1} \\ a_{j2} \\ \dots \\ a_{jr} \end{pmatrix} \quad f_j = \eta_j + a_{j0} + \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n$$

- Definiując kolejne **wielkości**:

$$\boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} \eta_{j1} \\ \eta_{j2} \\ \dots \\ \eta_{jr} \end{pmatrix} \quad \mathbf{a}_0 = \begin{pmatrix} a_{10} \\ a_{20} \\ \dots \\ a_{n0} \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1r} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nr} \end{pmatrix}$$

Pomiary pośrednie, przypadek liniowy

- Układ równań:

$$\mathbf{f} = \boldsymbol{\eta} + \mathbf{a}_0 + A \mathbf{x} = 0 \quad (*)$$

- Każdy pomiar obarczony jest **niepewnością** ϵ_i o rozkładzie normalnym, wynik pomiaru:

$$y_i = \eta_i + \epsilon_i \quad E(\epsilon_i) = 0 \quad E(\epsilon_i^2) = \sigma_i^2 = 1/g_i$$

- Zmienne są **niezależne**, wariancje przedstawiamy w postaci **diagonalnej macierzy**:

$$G_y = G_\epsilon = C_y^{-1} = C_\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & g_n \end{pmatrix}$$

- Po wprowadzeniu n-wymiarowego **wektora niepewności i pomiarów**:

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

- Uwzględniając (*): $\mathbf{y} - \boldsymbol{\epsilon} + \mathbf{a}_0 + A \mathbf{x} = 0$

- Układ ten należy rozwiązać ze względu na \mathbf{x} stosując metodę największej wiarygodności (...):

$$M = \boldsymbol{\eta}^T G_y \boldsymbol{\eta} = \min$$

$$M = (\mathbf{y} + \mathbf{a}_0 + A \mathbf{x})^T G_y (\mathbf{y} + \mathbf{a}_0 + A \mathbf{x}) = \min$$

Pomiary pośrednie, przypadek liniowy

- Kiedy: $\mathbf{c} = \mathbf{y} + \mathbf{a}_0$
 $M = (\mathbf{c} + \mathbf{A} \mathbf{x})^T G_y (\mathbf{c} + \mathbf{A} \mathbf{x}) = \min$

- Można dowieść, że:
 $G_y = H^T H$

- Dla pomiarów nieskorelowanych (częsty przypadek):

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sigma_n} \end{pmatrix}$$

- Wprowadzając oznaczenia: $\mathbf{c}' = H \mathbf{c}$ oraz $\mathbf{A}' = H \mathbf{A}$

$$M = (\mathbf{A}' \mathbf{x} + \mathbf{c}')^2 = \min$$

- Po rozwiązaniu: $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^{+'} \mathbf{c}'$

$\mathbf{A}^{+'}$ To macierz pseudo-odwrotną do macierzy \mathbf{A} .

Pomiary pośrednie, przypadek liniowy

Często w obliczeniach analitycznych korzystamy z wyrażenia **równoznacznego**:

$$\tilde{x} = -(A'^T A')^{-1} A'^T c'$$

Tożsamego z wyrażeniem:

$$\tilde{x} = -(A^T G_y A)^{-1} A^T G_y c$$

Dla pomiarów bezpośrednich o różnej dokładności x ma tylko 1 element, a_0 znika, macierz A

Redukuje się do wektora o n składowym równych -1, otrzymujemy wówczas:

$$c' = \begin{pmatrix} \frac{y_1}{\sigma_1} \\ \frac{y_2}{\sigma_2} \\ \dots \\ \frac{y_n}{\sigma_n} \end{pmatrix} \quad A' = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_1} \\ -\frac{1}{\sigma_2} \\ \dots \\ -\frac{1}{\sigma_n} \end{pmatrix} \quad A'^T A = \sum_{j=1}^n \frac{y_j}{\sigma_j^2}$$

Pomiary pośrednie, przypadek liniowy

- **Macierz kowariancji** dla najlepszego estymatora:

$$G_{\tilde{x}}^{-1} = (A^T G_y A)^{-1} = (A'^T A')^{-1}$$

- Pierwiastki kwadratowe z elementów diagonalnych to **niepewności pomiarowe**.

- **Estymator niepewności pomiarowych:**

$$\tilde{\epsilon} = A \tilde{x} + c = -A (A^T G_y A)^{-1} A^T G_y c + c$$

- **Wektor pomiarów poprawionych:**

$$\tilde{\eta} = y - \tilde{\epsilon} = y + A (A^T G_y A)^{-1} A^T G_y c - c$$

$$\tilde{\eta} = A (A^T G_y A)^{-1} A^T G_y c - a_0$$

Dopasowanie prostej - przykład

- Dopasowanie prostej do zbioru pomiarów y_j ,

odpowiadające różnym wartościom t_j – czyli zmiennej kontrolowanej.

- Zakładamy, że wartości zmiennej kontrolowanej są dokładnie znane (tzn. z zaniedbywalnymi niepewnościami).

$$\eta_j = y_j - \epsilon_j = x_1 + x_2 t_j$$

- Jeśli te wartości są także obarczone niepewnościami → przypadek nieliniowy.

$$\boldsymbol{\eta} - \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \mathbf{t} = \mathbf{0}$$

- Szukane parametry:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

- Pomiary:

j	0	1	2	3
t_j	0.0	1.0	2.0	3.0
y_j	1.4	1.5	3.7	4.1
σ_j	0.5	0.2	1.0	0.5

Dopasowanie prostej - przykład

Po obliczeniach dostajemy $\mathbf{a}_0 = 0$.

$$A = - \begin{pmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ 1 & t_3 \\ 1 & t_4 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{y} = \mathbf{c} = - \begin{pmatrix} 1.4 \\ 1.5 \\ 3.7 \\ 4.1 \end{pmatrix}$$

$$G_y = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad H = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A' = - \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 5 & 5 \\ 1 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix} \quad \mathbf{c}' = - \begin{pmatrix} 2.8 \\ 7.5 \\ 3.7 \\ 8.2 \end{pmatrix} \quad A'^T \mathbf{c}' = - \begin{pmatrix} 62.2 \\ 94.1 \end{pmatrix}$$

Dopasowanie prostej - przykład

Następnie:

$$(A'^T A')^{-1} = - \begin{pmatrix} 34 & 39 \\ 39 & 65 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{689} \begin{pmatrix} 65 & -39 \\ -39 & 34 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.0943 & -0.0556 \\ -0.0556 & 0.0493 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0.0943 & -0.0556 \\ -0.0556 & 0.0493 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 63.2 \\ 94.1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.636 \\ 1.066 \end{pmatrix}$$

$$C_{\tilde{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} 0.0943 & -0.0556 \\ -0.0556 & 0.0493 \end{pmatrix} \quad \Delta \tilde{x}_1 = 0.307 \quad \Delta \tilde{x}_2 = 0.222$$

$$\tilde{\boldsymbol{\eta}} = -A \tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0.636 \\ 1.702 \\ 2.768 \\ 3.834 \end{pmatrix}$$

Wartość minimum funkcji:

$$M = \left(\sum_{j=1}^n \frac{y_j - \tilde{\eta}_j}{\sigma_j} \right)^2 = 4.507$$

N= 4 pomiary, 2 parametry, co daje
n-2 = r =2 stopnie swobody.
Zakładając poziom istotności 5% z tabel X²:
X²_{0.95} = 5.99.

Nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy.

Dopasowanie wielomianu

W przypadku wielomianu w zmiennej t_j stopnia r (dla $r=2$ przypadek został właśnie omówiony):

$$\eta_j = h_j = x_1 + x_2 t_j + x_3 t_j^2 + \dots + x_r t_j^{r-1}$$

$$\mathbf{a}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \dots & t_1^{r-1} \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \dots & t_2^{r-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & t_n & t_n^2 & \dots & t_n^{r-1} \end{pmatrix}$$

Pomiary:

Wyniki:

j	t_j	y_j
1	-0.9	81
2	-0.7	50
3	-0.5	35
4	-0.3	27
5	-0.1	26
6	0.1	60
7	0.3	106
8	0.5	189
9	0.7	318
10	0.9	520

r	$\sim x_1$	$\sim x_2$	$\sim x_3$	$\sim x_4$	$\sim x_5$	$\sim x_6$	f	M
1	57.85						9	833.55
2	82.66	99.10					8	585.45
3	47.27	185.96	273.61				7	36.41
4	37.94	126.55	312.02	137.59			6	2.85
5	39.62	119.10	276.49	151.91	52.60		5	1.68
6	39.88	121.39	273.19	136.58	56.90	16.72	4	1.66

Niepewności to pierwiastki kwadratowe z liczby obserwacji.

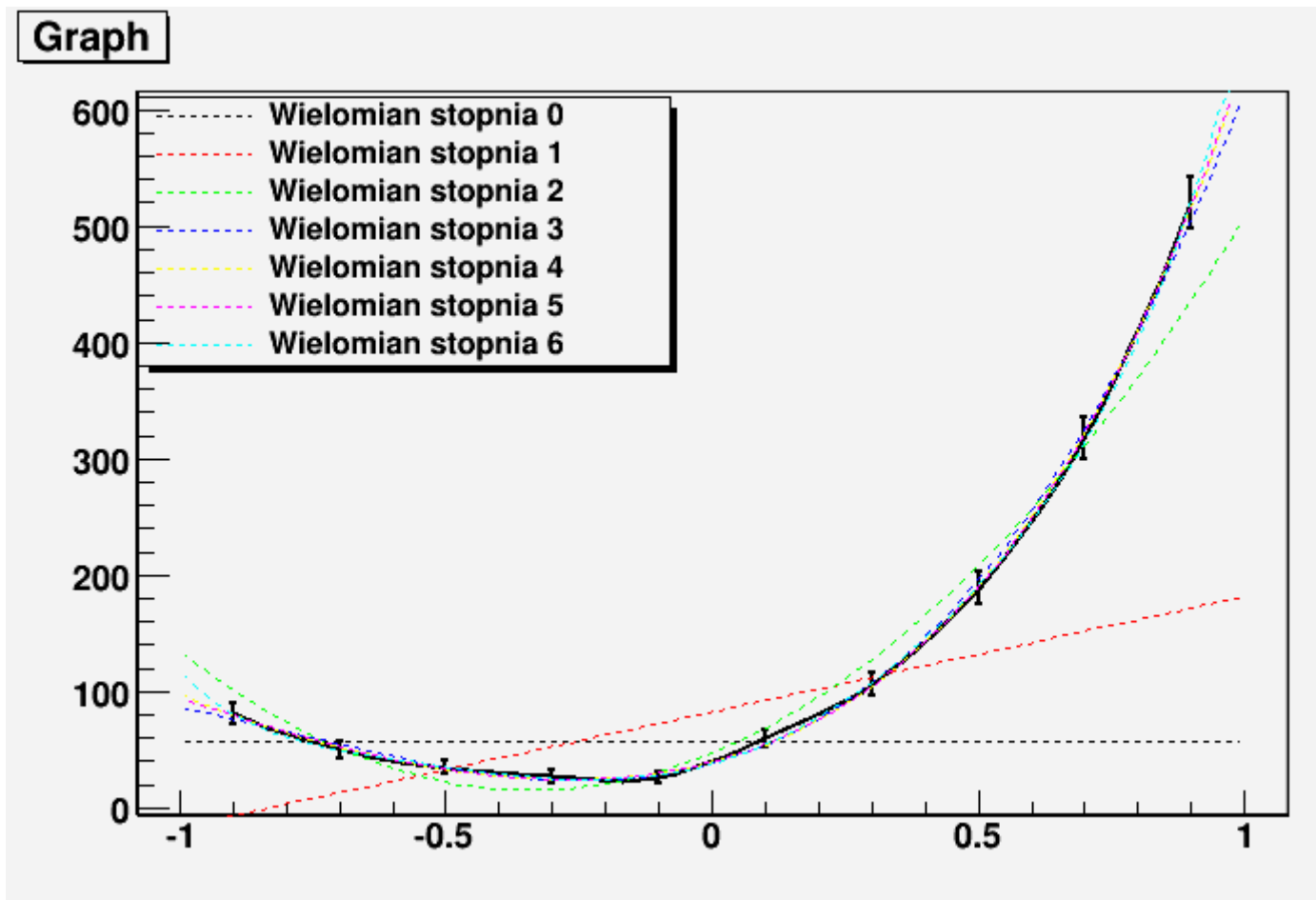
Dopasowanie wielomianu

Dwie pierwsze hipotezy nie są zgodne z danymi doświadczalnymi.

Hipoteza zakładająca $r = 3$ (wielomian drugiego stopnia) prowadzi do jakościowo zgodnych wyników.

Hipotezy z $r = 4, 5, 6$ prowadzą do wyników zgodnych z doświadczeniem.

Test X^2 na poziomie istotności 0.05 nie daje podstaw do odrzucenia hipotezy.



2b) Pomiar pośrednie – przypadek nieliniowy

- Do tej pory związek pomiędzy wektorem $\boldsymbol{\eta}$ zbudowanym z n prawdziwych wielkości mierzonych \mathbf{y} oraz wektorem zbudowanym z r nieznanymi parametrami był liniowy.

- Często jednak jest tak, że związek ten opisuje funkcja: $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{h}(\mathbf{x})$

$$f_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = \eta_j - h_j(\mathbf{x}) = 0$$

$$f_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = 0$$

- Jeśli powyższą funkcję rozwiniemy w szereg Taylora (i uwzględnimy jedynie człony liniowe rozwinięcia, to przypadek nieliniowy sprowadzi się do liniowego. Rozwinięcia dokonujemy w okolicy punktu:

$$\mathbf{x}_0 = (x_{10}, x_{20}, \dots, x_{r0})$$

$$f_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = f_j(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}) + \left(\frac{\partial f_j}{\partial x_1} \right)_{\mathbf{x}_0} (x_1 - x_{10}) + \dots + \left(\frac{\partial f_j}{\partial x_r} \right)_{\mathbf{x}_0} (x_r - x_{r0})$$

- Wprowadzając definicje:

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} x_1 - x_{10} \\ x_2 - x_{20} \\ \dots \\ x_r - x_{r0} \end{pmatrix} \quad a_{jl} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial x_l} \right)_{\mathbf{x}_0} = - \left(\frac{\partial h_j}{\partial x_l} \right)_{\mathbf{x}_0} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1r} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nr} \end{pmatrix}$$

2b) Pomiar pośrednie – przypadek nieliniowy

$$c_j = f_j(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}) = y_j - h_j(\mathbf{x}_0)$$
$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix}$$

Korzystając z: $\mathbf{y} = \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\epsilon}$

$$f_j(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\eta}) = f_j(\mathbf{x}_0, \mathbf{y} - \boldsymbol{\epsilon}) = f_j(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}) - \boldsymbol{\epsilon}$$

Stąd z: $f_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = 0$ otrzymujemy: $\mathbf{f} = A\boldsymbol{\xi} + \mathbf{c} - \boldsymbol{\epsilon} = 0$ $\boldsymbol{\epsilon} = A\boldsymbol{\xi} + \mathbf{c}$

Warunek metody najmniejszych kwadratów:

$$M = (A\boldsymbol{\xi} + \mathbf{c})^T G_y (A\boldsymbol{\xi} + \mathbf{c}) = \min$$

Rozumując podobnie, jak w przypadkach liniowych dochodzimy do:

Następnie zgodnie ze wzorem poniższym znajdujemy lepsze przybliżenie: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \tilde{\boldsymbol{\xi}}$

$$\tilde{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} x_1 - x_{10} \\ x_2 - x_{20} \\ \dots \\ x_r - x_{r0} \end{pmatrix}$$

2b) Pomiar pośrednie – przypadek nieliniowy

- Powtarzamy całą procedurę wyznaczając **nowe wartości macierzy A oraz c w punkcie x_1** .
- Otrzymujemy wektor x_2 .
- Proces iteracji powtarzamy tak długo, aż otrzymana wartość minimum funkcji M jest niewiele mniejsza od wartości minimum otrzymanego w poprzednim kroku iteracyjnym.
- Nie ma gwarancji, że opisana procedura jest zbieżna.
- Jeśli rozwiązanie: $\tilde{x} = x_n = x_{n-1} + \tilde{\xi}$ zostało otrzymane po n krokach iteracyjnych, można je zapisać w postaci funkcji liniowej.
- Macierze kowariancji można wyznaczyć korzystając z prawa propagacji błędów.

Przy rozważaniu omawianych zagadnień pojawiają się zasadniczo **2 problemy**:

- 1) **Różniczkowanie numeryczne** (macierzy A) pociąga za sobą zmniejszenie dokładności wykonywanych operacji oraz wydłużenie czasu obliczeń.
- 2) Minimalizowana funkcja M nie jest **prostą formą kwadratową** nieznanymi parametrów.
 - Położenia minimum nie zawsze daje się wyznaczyć w jednym kroku.
 - Zbieżność procedury iteracyjnej zależy od tego, czy odpowiadająca wartość x_0 pierwszemu przybliżeniu leży w obszarze, w którym forma kwadratowa przybliży funkcję M dokładnie.

2b) Pomiarы pośrednie – przypadek nieliniowy

W celu zapewnienia zbieżności procedury mamy **2 metody**:

- a) zmniejszająca krok iteracyjny (prostsza i szybsza)
- b) procedura Marquardta (o zwiększonym obszarze zbieżności) – zalecana w przypadkach Wątpliwych.

Bogaty opis tych metod wraz z przykładami zawiera podręcznik Siegmunda Brandta - „Analiza danych”.

Własności metody najmniejszych kwadratów. Test X^2 .

- Do teraz rozważana była MNK jako zastosowanie MNW do problemów **liniowych lub linearyzowanych**
- **Minimalizacja funkcji wiarygodności** doprowadziła do MNK.
- Do zbudowania funkcji wiarygodności trzeba **założyć**, że znamy gęstość prawdopodobieństwa rozkładu błędów pomiarowych i że jest ona opisana rozkładem normalnym.
- **Twierdzenie Gaussa-Markowa** mówi, że nawet przy braku takich założeń MNK daje dobre wyniki.

Własności wyników uzyskanych poprzez metodę największej wiarygodności:

1) Rozwiązanie \tilde{x} jest asymptotycznie nieobciążone, czyli: $E(\tilde{x}_i) = x_i \quad i = 1, 2, \dots, r$

2) Jest ono estymatorem o minimalnej wariancji: $\sigma^2(\tilde{x}_i) = E\{(\tilde{x}_i - x_i)^2\} = \min$

3) Wielkość: $M = \epsilon^T G_y \epsilon$ ma rozkład X^2 o liczbie stopni swobody $n-r$

(wielkość M staje się sumą kwadratów: $M = \sum_{j=1}^n \epsilon_j^2 / \sigma_j^2$)

Własności metody najmniejszych kwadratów. Test X^2 .

W przypadku, kiedy rozkład niepewności nie jest znany, rozwiązanie uzyskane MNK ma własności:

- 1) Rozwiązanie jest **nieobciążone**
 - 2) Spośród wszystkich rozwiązań \mathbf{x}^* , które są nieobciążonymi estymatorami wektora \mathbf{x} oraz liniowymi kombinacjami pomiarów \mathbf{y} , rozwiązanie uzyskane MNK ma najmniejszą wariancję (to jest właśnie twierdzenie **Gaussa-Markowa**)
 - 3) Wielkość: $M = \epsilon^T G_y \epsilon$ ma rozkład X^2 o liczbie stopni swobody $n-r$.
Wartość oczekiwana wielkości M wynosi $E(M) = n-r$
- Wielkość M często nazywana jest X^2 , mimo, że nie zawsze ma rozkład X^2 .
 - Wielkość M oraz macierze $C_{\tilde{x}}$ to dobry sprawdzian jakości dopasowania uzyskanego MNK.
 - Jeśli wartość M jest dużo większa niż NDF, to nie należy bezkrytycznie akceptować uzyskanego wyniku.
 - $f = n-r$, zwana liczbą stopni swobody (NDF) oraz liczbą więzów dopasowania.

Własności metody najmniejszych kwadratów. Test X^2 .

Jeśli wiadomo, że niepewności mają rozkład normalny, to dopasowanie MNK łączymy z testem X^2 .

Odrzucamy wynik dopasowania, kiedy: $M = \epsilon^T G_y \epsilon > X_{1-\alpha}^2(n-r)$

Kiedy M przekroczy wartość X^2 zależną od poziomu istotności oraz NDF, należy szukać przyczyn:

- 1) Założona postać zależności $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = 0$ mierzonych wielkości od nieznanymi parametrów nie może być stosowana. Założona funkcja jest zła lub kilka parametrów mają złe wartości.
- 2) Funkcja powyższa jest poprawna, ale rozwinięcie w szereg Taylora z jednym tylko wyrazem nie pozwala odtworzyć funkcji f wystarczająco dobrze.
- 3) Pierwsze przybliżenie \mathbf{x}_0 jest zbyt dalekie od pierwszego rozwiązania.
- 4) Macierz kowariancji wielkości mierzalnych C_y jest oparta na zbyt grubych przybliżeniach.

KONIEC WYKŁADU 10