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; środa: 11-12

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

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

METODA NAJMNIEJSZYCH KWADRATÓW – KONT.

Obszary ufności i błędy niesymetryczne w przypadku nln.

$$\phi(\boldsymbol{x}) = k \exp\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})^T B(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})\} = k \exp\{-\frac{1}{2} g(\boldsymbol{x})\} \qquad g(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})^T B(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})$$

g = 1 = const → elipsa kowariancji.

g = const → obszary elipsoidalne o stałym prawdopodobieństwie W

x ma rozkład normalny → g(**x**) ma rozkład χ^2 o n stopniach swobody.

Prawdopodobieństwo wystąpienia wartości **x** wewnątrz **elipsoidy g = const**:

$$W = \int_0^g f(X^2; n)\, d X^2 = P\left(\frac{n}{2}, \frac{g}{2}\right)$$

P to niepełna funkcja Gamma.

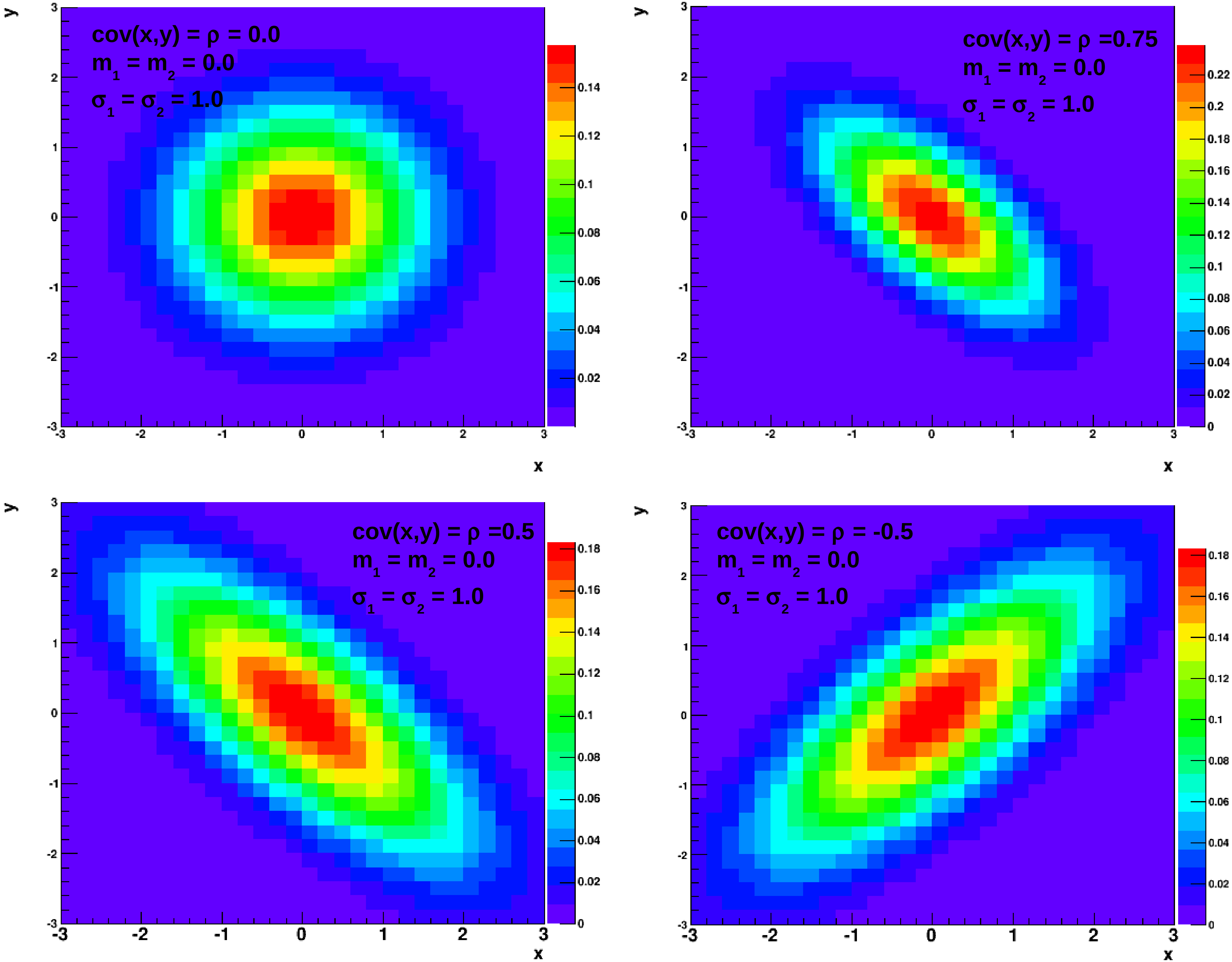
Dla elipsoidy kowariancji:

$$W_n = P\left(\frac{n}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Dla małych n:

$W_1 = 0.68269$; $W_2 = 0.39347$; $W_3 = 0.19875$;

$W_4 = 0.09020$; $W_5 = 0.03734$; $W_6 = 0.01439$;


cov(x,y) = ρ = 0.0
m1 = m2 = 0.0
σ1 = σ2 = 1.0
cov(x,y) = ρ =0.75
m1 = m2 = 0.0
σ1 = σ2 = 1.0
cov(x,y) = ρ =0.5
m1 = m2 = 0.0
σ1 = σ2 = 1.0
cov(x,y) = ρ = -0.5
m1 = m2 = 0.0
σ1 = σ2 = 1.0
x
y

Obszary ufności i błędy niesymetryczne w przypadku nln.

Wyznaczenie obszarów **o tym samym prawdopodobieństwie** (dla różnych n):

- ustalamy wartość W
- obliczamy odpowiadającą mu wartość g. (g to kwantylem z prawdopodobieństwem w rozkładzie X^2 o n stopniach swobody).

$$g = X^2_W(n)$$

Elipsoida ufności; odpowiada wartości g, takiej, że zawiera wektor x z prawdopodobieństwem W

(Jeśli W= 0.95, to **x** leży wewnątrz elipsoidy ufności na 95%)

- Związek między elipsoidą ufności i funkcją M: $M = (\boldsymbol{c} + A\boldsymbol{x})^T G_y (\boldsymbol{c} + A\boldsymbol{x}) = min$
- Różnica między funkcją M w punkcie **x** oraz w punkcie ~**x**:

$$M(\boldsymbol{x}) - M(\tilde{\boldsymbol{x}}) = (\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}})^T A^T G_y (\boldsymbol{x} + \tilde{\boldsymbol{x}}) = min$$

Ponieważ: $A^T G_y A = G_{\tilde{x}} = B$

- Można dowieść, że $M(\boldsymbol{x}) - M(\tilde{\boldsymbol{x}}) = g(\boldsymbol{x})$

Obszary ufności i błędy niesymetryczne w przypadku nln.

- **Elipsa kowariancji -** hiperpowierzchnia w przestrzeni r-wymiarowej opisanej zmiennymi: $x_1, x_2, ..., x_r$.

- Odpowiadają **stałej** wartości funkcji M = M(x) = M(~x) +1.

- **Elipsoida ufności -** hiperpowierzchnia, gdzie M = M(x) = M(~x) +g (odpowiada prawdop. W).

- **G -** kwantyl rozkładu X^2 o f = n-1 stopniach swobody.

- Te rozważania pozostają słuszne, kiedy stosujemy **MNK** do przypadków **nieliniowych**.

  Przybliżenie lepsze, gdy odstępstwo parametrów nieznanych od wyrażenia

$$f_j(\mathbf{x},\eta)=f_j(x_{0,}\eta)+\left(\frac{\partial f_j}{\partial x_1}\right)_{x_0}(x_1-x_{10})+\ldots+\left(\frac{\partial f_j}{\partial x_r}\right)_{x_0}(x_r-x_{r0})$$

  spowodowane nieliniowością są małe (kiedy np. pochodne mają stałe wartości, kiedy zmiany nieznanych parametrów są małe).

- **Błędy** są **małe** → interpretacja elipsoidy kowariancji bez zmian.

  (szukane są kontury przedziałów ufności, gdzie z prawdopodobieństwem W znajduje się prawdziwa wartość **x**).

Obszary ufności i błędy niesymetryczne w przypadku nln.

- Wyznaczany jest **1 parametr** x → krzywa M = M(x) to odcinek na osi *x*.

- Wyznaczane są **2 parametry**: x_1, x_2 granicą obszaru ufności jest krzywa opisana wzorem:

$$M(x) = M(\tilde{x}) + g$$

- **Więcej parametrów** → możliwe jest wyznaczenie cięć obszarów ufności przechodzących przez punkt

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = (\tilde{x}_{1,} \tilde{x}_{2,} \dots , \tilde{x}_r)$$

Dowolnej parze zmiennych $(x_{1,} x_{2,} \dots , x_r)$

Procedura do wykreślenia obszarów ufności jest opisana w podręczniku Brandt'a.

Rozpatrzony został także przypadek błędów niesymetrycznych wraz z niesymetrycznymi

Granicami obszaru ufności.

POMIARY ZALEŻNE

Pomiary zależne

- Nie zakładamy **niezależności** pomiarów – mogą być związane pewną liczbą więzów.

- **Przykład**: bezpośredni pomiar trzech kątów trójkąta.

- **Równanie więzów**: suma kątów wynosi 180 st.

- **Zadanie**: wyznaczenie estymatorów ~η wielkości η.

$$y_j = \eta_j + \epsilon_j \qquad j = 1, 2, \ldots, n$$

- **Błędy** mają rozkład **normalny** o wartości średniej równej zeru:

$$E(\epsilon_j) = 0 \qquad E(\epsilon_j^2) = \sigma_j^2$$

- **Równania więzów**:

$$f_k(\eta) = 0 \qquad k = 1, 2, \ldots, q$$

- Przypadek **liniowych** więzów:

$$b_{10} + b_{11}\eta_1 + b_{12}\eta_2 + \ldots + b_{1\mathrm{n}}\eta_n = 0$$

$$b_{20} + b_{21}\eta_1 + b_{22}\eta_2 + \ldots + b_{2\mathrm{n}}\eta_n = 0$$

$$b_{q0} + b_{q1}\eta_1 + b_{q2}\eta_2 + \ldots + b_{qn}\eta_n = 0$$

- W notacji **macierzowej**:

$$B\boldsymbol{\eta}\, \boldsymbol{b_0} = 0$$

Pomiary zależne – metoda elementów

- Wychodzimy z **równania**: $B\boldsymbol{\eta}\,\boldsymbol{b_0}=0$
- Eliminujemy q z n wielkości η. Pozostałe wielkości to **elementami**.

(można je dowolnie wybierać spośród pierwotnych pomiarów, mogą też stanowić ich kombinacje liniowe).

- Wektor η to liniowa kombinacja elementów:

$$\eta_j = f_{j0} + f_{j1}\alpha_1 + f_{j2}\alpha_2 + \ldots + f_{j,n-q}\alpha_{n-q} \qquad j=1,2,\ldots,n$$

$$\boldsymbol{\eta} = F\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{f_0}$$

- **Rozwiązanie**:

$$\tilde{\boldsymbol{\alpha}} = (F^T G_y F)^{-1} F^T G_y (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f_0})$$

- **Macierz kowariancji**:

$$G_{\tilde{\alpha}}^{-1} = (F^T G_y F)^{-1}$$

- **Wyniki poprawione**:

$$\tilde{\boldsymbol{\eta}} = F\tilde{\boldsymbol{\alpha}} + \boldsymbol{f_0} = F(F^T G_y F)^{-1} F^T G_y (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f_0}) + \boldsymbol{f_0}$$

- **Macierz kowariancji** wyznaczona na podstawie **prawa propagacji błędów**:

$$G_{\tilde{\eta}}^{-1} = F(F^T G_y F)^{-1} F^T = F G_{\tilde{\alpha}}^{-1} F^T$$

Równanie więzów dla kątów w trójkącie - 1

- W wyniku pomiarów **kątów trójkąta** otrzymano wyniki: 89 st, 31 st, 61 st.

$$\boldsymbol{y}=\begin{pmatrix}89\\31\\61\end{pmatrix}$$

- **Równanie więzów**: $\eta_1+\eta_2+\eta_3=180$

- Można je zapisać w **postaci**: $B\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{b_0}=0$ $\quad B=(1,1,1)$ $\quad \boldsymbol{b_0}=b_0=-180$

- Jako **elementy** wybierzemy: $\eta_{1,}\eta_2=\alpha_{1,}\alpha_2$ $\quad \eta_{3,}=180-\alpha_1-\alpha_2$

$$\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\\-1 & -1\end{pmatrix}\boldsymbol{\alpha}+\begin{pmatrix}0\\0\\180\end{pmatrix}$$

$$F=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\\-1 & -1\end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{f_0}=\begin{pmatrix}0\\0\\180\end{pmatrix}$$

Równanie więzów dla kątów w trójkącie - 2

- **Błąd pomiaru** wynosi 1st (założenie):

$$C_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I \qquad G_y = C_y^{-1} = I$$

- Dochodzimy do:

$$\tilde{\alpha} = \begin{pmatrix} 88\frac{1}{3} \\ 30\frac{1}{3} \end{pmatrix} \qquad \tilde{\eta} = \begin{pmatrix} 88\frac{1}{3} \\ 30\frac{1}{3} \\ 61\frac{1}{3} \end{pmatrix} \qquad G_{\tilde{\eta}}^{-1} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Wyniku takiego można było spodziewać się ze względu na równe wariancje.

Metoda mnożników Lagrange'a

Alternatywna metoda to metody elementów (obie dają identyczne wyniki, ale tu nie trzeba wybierać elementów).

- Liniowy **układ więzów**: $B\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{b_0}=0$
- **Wartość pomiarowa** to wartość prawdziwa oraz błąd pomiaru: $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\epsilon}$

$$B\,\boldsymbol{y}-B\boldsymbol{\epsilon}+\boldsymbol{b_0}=0$$

- Wprowadzamy **wektor**: $\boldsymbol{c}=B\,\boldsymbol{y}+\boldsymbol{b_0}$
- Dostajemy **równanie**: $\boldsymbol{c}-B\boldsymbol{\epsilon}=0$
- **Wektor mnożników Lagrange'a**:

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix}\mu_1\\ \mu_2\\ \dots\\ \mu_q\end{pmatrix}$$

- Rozszerzymy **funkcję pierwotną**: $M=\epsilon^T G_y\,\epsilon$ do: $L=\epsilon^T G_y\,\epsilon+2\mu^T(\boldsymbol{c}-B\boldsymbol{\epsilon})$
- L jest **funkcją Lagrange'a**.
- Warunek M = min z więzami: c-Bε = 0 jest spełniony, kiedy funkcja Lagrange'a znika:

$$dL=2\epsilon^T G_y\,d\epsilon+2\mu^T B\,d\epsilon=0$$

- Jest to równoważne:

$$\epsilon^T G_y-\mu^T B=0$$

Metoda mnożników Lagrange'a

- **Wzory końcowe**, przy oznaczeniu: $G_B = (B G_y^{-1} B^T)^{-1}$

$$\tilde{\mu} = G_B \boldsymbol{c}$$

$$\tilde{\epsilon} = G_y^{-1} B^T G_B \boldsymbol{c}$$

$$\tilde{\eta} = \boldsymbol{y} - G_y^{-1} B^T G_B \boldsymbol{c}$$

- **Macierze kowariancji**:

$$G_{\tilde{\mu}}^{-1} = G_B$$

$$G_{\tilde{\eta}} = G_y^{-1} - G_y^{-1} B^T G_B B G_y^{-1}$$

- **Zastosowanie do przykładu z trójkątem**:

$$c = 2 \qquad G_B = \frac{1}{3}$$

Macierze kowariancji: $G_{\tilde{\mu}}^{-1} = \frac{1}{3}$ $\quad G_{\tilde{\eta}}^{-1} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$

Metoda mnożników Lagrange'a – przypadek nieliniowy

- **Równania więzów**: $f_k(\eta)=0 \qquad k=1,2,\dots,q$

- Rozwijamy w **szereg Taylora** wokół punktu η_0, będącego pierwszym przybliżeniem η:

$$f_k(\eta)=f_k(\eta_0)+\left(\frac{\partial f_k}{\partial \eta_1}\right)_{\eta_0}(\eta_1-\eta_{10})-\dots+\left(\frac{\partial f_k}{\partial \eta_n}\right)_{\eta_0}(\eta_n-\eta_{n0}) \qquad (*)$$

- Wprowadzając **oznaczenia**:

$$b_{kl}=\left(\frac{\partial f_k}{\partial \eta_l}\right)_{\eta_0} \qquad c=f_k(\eta_0) \qquad \delta_k=(\eta_k-\eta_{k0})$$

$$B=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{q1} & b_{q2} & \dots & b_{qn} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{c}=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_q \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\delta}=\begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \dots \\ \delta_n \end{pmatrix}$$

- Równanie (*) w postaci macierzowej:

$$B\boldsymbol{\delta}+\boldsymbol{c}=0$$

Metoda mnożników Lagrange'a – przypadek nieliniowy

- Jako **pierwsze przybliżenie** mamy wartości z pomiarów: $\boldsymbol{\eta}_0 = \boldsymbol{y}$

$$\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_0 = \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{y} = -\boldsymbol{\epsilon}$$

- Można **dowieść**, że:

  - estymator „błędów pomiarowych”: $\tilde{\boldsymbol{\delta}} = -G_y^{-1} B^T (B G_y^{-1} B^T)^{-1} \boldsymbol{c}$

  - estymator wielkości poprawionych: $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{\eta}_s = \boldsymbol{\eta}_{s-1} + \tilde{\boldsymbol{\delta}}$

    (wynik każdego kroku to kolejne przybliżenie, po s iteracjach wynik jak wyżej)

  - macierz kowariancji: $G_{\tilde{\eta}}^{-1} = -G_y^{-1} - G_y B^T G_B B G_y^{-1}$

  - estymator błędów: $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{y} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}$

  - minimalizowana M: $\tilde{M} = \tilde{\epsilon}^T G_y \tilde{\epsilon}$

Przykładowe zadania na kolokwium z KADD (wykład):

1) Dana jest dystrybuanta zmiennej X:

x	(-inf, -2>	(-2, 1>	(1, 3>	(3, inf)
F(x)	0	0.2	0.8	1.0

Wyznacz funkcję prawdopodobieństwa.

2) Zmienna losowa X ma funkcję prawdopodobieństwa postaci:

x	-3	-1	3	5
p_i	0.1	0.2	0.5	0.2

Wyznaczyć funkcje prawdopodobieństwa zmienne U:
a) $U = 2X + 3$
b) $U = X^3$
c) $U = X^2 - 5$
Ponadto wyznaczyć wartości oczekiwane i wariancję.

3) Zmienna losowa ma rozkład prawdopodobieństwa:
$f(x) = c * \sin(x)$ x in $[0, \pi]$
a) Dobrać stałą c, aby f(x) była gęstością prawdopodobieństwa
b) Wyznaczyć funkcję dystrybuanty
c) Wyznaczyć wartość oczekiwaną, wariancję, odchylenie standardowe
d) Wyznaczyć medianą

4) Zaproponować metodą do generacji liczb z rozkładu potęgowego

5) Zaproponować metodę do generacji liczb z rozkładu sinusoidalnego

6) Dwuwymiarowa zmienna losowa (X,Y) ma rozkład gęstości: $f(x,y) = 1/(20\pi) * \exp(-0.5*(x^2/4 + y^2/25))$. Zbada c, czy zmienne X, Y są niezależne, Podać sposób na obliczenie (obliczyć): $P(-1<X<2, 0<Y<3)$

7) Dane są dwie próby:
A) 21, 19, 14, 27, 25, 23,22, 18, 21 (N = 9)
B) 16, 24,22, 21, 25, 21, 18 (N=7)

Czy przy poziomie istotności 5% wariancja próby (B) jest mniejsza niż próby (A)?

8) Zweryfikuj hipotezę, że 10 pomiarów zostało wylosowane z populacji o wartości średniej 25.6? Przyjmij, że poziom istotności wynosi 10%, załóż, że populacji ma rozkład normalny.
Pomiary: 22.03, 27.05, 27.5, 22.7, 25.3, 26.2, 27.9, 21.2, 23.3, 25.5.

PRZYPADEK OGÓLNY MNK

Przypadek ogólny MNK

Notacja: poszukiwane parametry to r-wymiarowy wektor **x**.

Wielkości mierzalne: n-wymiarowy wektor **η**.

Wielkości mierzone: n-wymiarowy wektor **y**.

Wyniki pomiarów różnią się od wielkości mierzonych o wielkości błędu ε (n-wymiarowy wektor).

Zakładamy, że błędy mają rozkład normalny z wartością oczekiwaną równą 0 oraz macierzą

Kowariancji $C_y = G_y^{-1}$.

Wektory **x** oraz **η** są ze sobą związane za pomocą m funkcji:

$$f_k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\eta})=f_k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}-\epsilon)=0 \qquad k=1,2,\ldots,m$$

Zakładamy, że znamy pierwsze przybliżenie wartości szukanych dla wektora **η**.

Są to wyniki pomiarów.

Zakładamy, że funkcje f_k są liniowe w otoczeniu (**x**, $\boldsymbol{\eta_0}$).

Rozwinięcie w szereg Taylora:

$$f_k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\eta})=f_k(x_{0,}\eta_0)+\left(\frac{\partial f_k}{\partial x_1}\right)_{x_{0,}\eta_0}(x_1-x_{10})+\ldots$$

$$\ldots+\left(\frac{\partial f_k}{\partial x_r}\right)_{x_{0,}\eta_0}(x_r-x_{r0})+\left(\frac{\partial f_k}{\partial \eta_1}\right)_{x_{0,}\eta_0}(\eta_1-\eta_{10})+\ldots+\left(\frac{\partial f_k}{\partial \eta_n}\right)_{x_{0,}\eta_0}(\eta_n-\eta_{n0})$$

Przypadek ogólny MNK

Wprowadzając oznaczenia:

$$a_{kl}=\left(\frac{\partial f_k}{\partial x_l}\right)_{x_{0,}\eta_0} \qquad b_{kl}=\left(\frac{\partial f_k}{\partial \eta_l}\right)_{x_{0,}\eta_0} \qquad c_k=f_k(x_{0,}\eta_0)$$

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1r} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{q1} & a_{q2} & \dots & a_{mr} \end{pmatrix} \qquad B=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{q1} & b_{q2} & \dots & b_{mn} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{c}=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_m \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x_0} \qquad \boldsymbol{\delta}=\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta_0}$$

Układ równań w postaci macierzowej:

$$A\boldsymbol{\xi}+B\boldsymbol{\delta}+\boldsymbol{c}=0$$

Przypadek ogólny MNK

Można dowieść, że:

$$\tilde{\xi} = -(A^T G_B A)^{-1} A^T G_B c$$

$$\tilde{\delta} = -G_y^{-1} B^T G_B (c - A(A^T G_B A)^{-1} A^T G_B c)$$

$$\tilde{\mu} = G_B A(c - A(A^T G_B A)^{-1} A^T G_B c)$$

$$\tilde{x} = x_0 + \tilde{\xi}$$

$$\tilde{\eta} = \eta_0 + \tilde{\delta}$$

$$G_{\tilde{x}}^{-1} = (A^T G_B A)^{-1}$$

$$G_{\tilde{\eta}}^{-1} = G_y^{-1} - G_y^{-1} B^T G_B G_Y^{-1} + G_y^{-1} B^T G_B A(A^T G_B A)^{-1} A^T G_B B G_y^{-1}$$

Można udowodnić, że przy spełnionym warunku dostatecznej liniowości:

$$M = (B\tilde{\epsilon})^T G_B (B\tilde{\epsilon})$$

Ma rozkład X_2 o NDF = m-r.

W przypadkach nieliniowych stosowana jest procedura iteracyjna przyjmująca jako wartości

Początkowe wartości z poprzedniego kroku iteracyjnego. Iteracja może być powtarzana aż

Do uzyskania satysfakcjonującego wyniku. Jest to kryterium bardzo trudne do określenia.