Paraméterek hibájának becslése II.
Az illeszkedés jósága

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2020. február 20.

A paraméterek hibájának becslése más módon

A paraméterek hibájának becslésére már láttuk, hogy a Hesse-mátrix használható (ha a modell analitikusan ismer).

Egy jellegében más módszer: nézzük az illesztett paraméterek stabilitását úgy, hogy új "mérési eredményeket" szimulálunk: Monte Carlo módszerek (bonyolult)

A paraméterek hibájának becslése más módon

A paraméterek hibájának becslésére már láttuk, hogy a Hesse-mátrix használható (ha a modell analitikusan ismer).

Egy jellegében más módszer: nézzük az illesztett paraméterek stabilitását úgy, hogy új "mérési eredményeket" szimulálunk: Monte Carlo módszerek (bonyolult)

Két egyszerűbb módszer:

- Jackknife módszer
- Bootstrapping

Jackknife[1] módszer

Tekintsük a mérési pontokat, de minden lépésben hagyjunk ki egyet az illesztésből

- hagyjuk ki az i. pontot
- illesszük a modellt $N-1$ pontra
- legyen az illesztett paraméterek vektora $\mathbf{a}_i$

Minden egyes mérési pontra megismételve összesen N különböző paramétervektort kapunk

- ezek átlaga lesz a becsült paramétervektor

$$\mathbf{a}_{\text{jack}} = \frac{1}{N}\sum_i \mathbf{a}_i$$

- ezek szórása az illesztett paraméterek standard hibája

$$\sigma^2_{\text{jack}} = \frac{N-1}{N}\sum_i (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_{\text{jack}})^2$$

[1] jackknife = bicska

Bootstrapping

Jelöljük az eredeti, N db adatot tartalmazó adathalmazt $\mathcal{D}_{(0)}$-val. Ennek segítségével új, szintetikus adathalmazokat generálunk: $\mathcal{D}^{(S)}, \mathcal{D}_2^{(S)}, \ldots$, melyek szintén N db adatot tartalmaznak ("S": synthetic).

Hogyan?

Bootstrapping

Jelöljük az eredeti, N db adatot tartalmazó adathalmazt $\mathcal{D}_{(0)}$-val. Ennek segítségével új, szintetikus adathalmazokat generálunk: $\mathcal{D}^{(S)}, \mathcal{D}_2^{(S)}, \ldots$, melyek szintén N db adatot tartalmaznak ("S": synthetic).

Hogyan?

- véletlenszerűen kiválasztunk N adatot $\mathcal{D}_{(0)}$-ból, úgy, hogy minden választás után "*visszahelyezzük*" a kiválasztott adatot $\mathcal{D}_{(0)}$-ba
- $\Rightarrow \mathcal{D}_1^{(S)}, \mathcal{D}_2^{(S)}, \ldots$-ben egyes adatok *kétszer* (esetleg többször is) szerepelhetnek
- minden $\mathcal{D}_i^{(S)}$ segítségével kiszámoljuk az $\mathbf{a}_i^{(s)}$ illesztett paramétervektort
- $\mathbf{a}_i^{(s)}$ segitségével kapunk egy eloszlást az illesztett paraméterekre
- ennek az eloszlásnak a segitségével számolhatunk pl átlagot és szórást a paraméterekre

Konfidencia tartomány

A bootstrapping-gal kapunk egy M-dimenziós eloszlást az $\mathbf{a}$ paramétervektorra

konfidencia tartomány: az a tartomány, amely adott valószínűséggel (pl 95%) tartalmazza a valódi paramétervektort

Konfidencia tartomány

A bootstrapping-gal kapunk egy M-dimenziós eloszlást az $\mathbf{a}$ paramétervektorra

konfidencia tartomány: az a tartomány, amely adott valószínűséggel (pl 95%) tartalmazza a valódi paramétervektort

Kétdimenziós példa: $\mathbf{a}_i^{(s)} = (a_{(i)0}^{(s)}, a_{(i)1}^{(s)})$

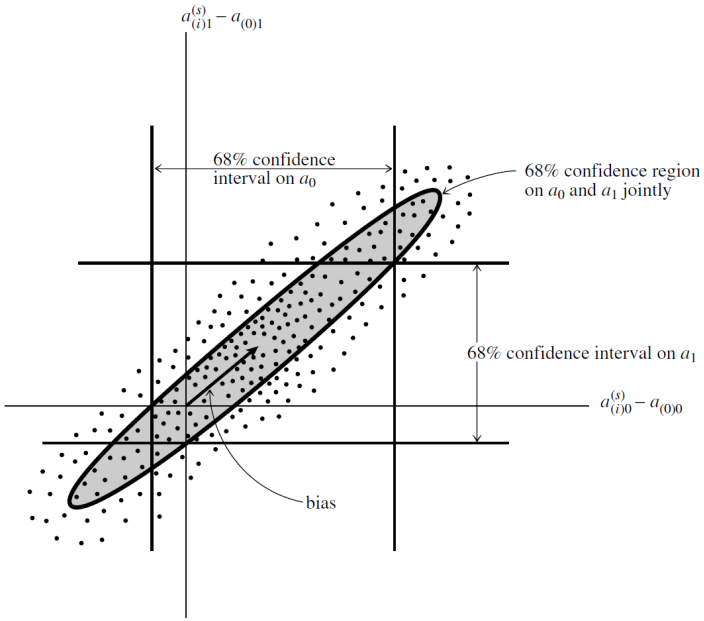

Figure: A szimulált paraméterértékek 68% van a függőleges illetve vízszintes vonalakkal jelzett intervallumban

További fontos kérdések

A paraméterek meghatározásával még nem ért véget a feladat:

- mekkora a meghatározott paraméterek hibája? ✓
- egyáltalán mennyire jó a modell? Hiába kicsi a meghatározott paraméterek hibája, ha rossz a modell, amit használunk

Mennyire illeszkedik jól a modell?

A χ^2 definíció szerint:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{[y_i - y(x_i|\mathbf{a})]^2}{\sigma_i^2}$$

Ha a mérést többször megismételnénk és mindig kiszámolnánk a χ^2-t, akkor a χ^2-ekre találnánk egy eloszlást

Mennyire illeszkedik jól a modell?

A χ^2 definíció szerint:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{[y_i - y(x_i|\mathbf{a})]^2}{\sigma_i^2}$$

Ha a mérést többször megismételnénk és mindig kiszámolnánk a χ^2-t, akkor a χ^2-ekre találnánk egy eloszlást

Bizonyítás nélkül: ha a modell lineárisan függ $a_0, a_1, \ldots a_M$-tól, akkor a különböző χ^2 értékek eloszlása az összeg minimuma körül $\nu = N - M$ szabadsági fokú χ^2 eloszlást követ. Itt N a mérési pontok, és M az illesztett paraméterek száma.

Mennyire illeszkedik jól a modell?

A χ^2 definíció szerint:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{[y_i - y(x_i|\mathbf{a})]^2}{\sigma_i^2}$$

Ha a mérést többször megismételnénk és mindig kiszámolnánk a χ^2-t, akkor a χ^2-ekre találnánk egy eloszlást

Bizonyítás nélkül: ha a modell lineárisan függ $a_0, a_1, \ldots a_M$-tól, akkor a különböző χ^2 értékek eloszlása az összeg minimuma körül $\nu = N - M$ szabadsági fokú χ^2 eloszlást követ. Itt N a mérési pontok, és M az illesztett paraméterek száma.

Figyelem: Ne keverjük össze a mérések és a modell segítségével számolt χ^2 összeget és a χ^2 eloszlást!

χ^2 eloszlás

Definíció: ha $\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_\nu$ valószínűségi változók standard normál eloszlással, akkor $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \cdots + \xi_\nu^2$ eloszlása ν szabadsági fokú χ^2 eloszlás

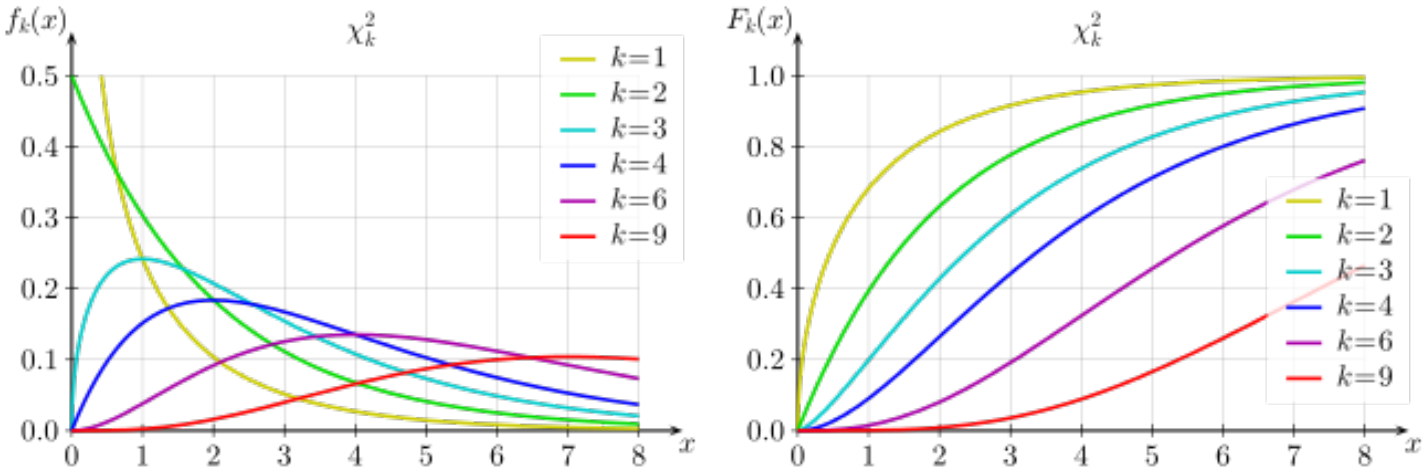

Figure: Különböző szabadsági fokú χ^2 sűrűség és eloszlás függvények

Mennyire illeszkedik jól a modell?

Megjegyzés: mivel az $a_0, a_1, \ldots a_M$ értékeket úgy határoztuk meg, hogy χ^2 összeg minimális legyen, ezért a fenti összegben nem minden tag független $\Rightarrow$ ezért van $\nu = N - M$ szabadsági fok

Mennyire illeszkedik jól a modell?

Megjegyzés: mivel az $a_0, a_1, \ldots a_M$ értékeket úgy határoztuk meg, hogy χ^2 összeg minimális legyen, ezért a fenti összegben nem minden tag független $\Rightarrow$ ezért van $\nu = N - M$ szabadsági fok

Mikor fogadhatjuk el a modellt?
Egyszerű szabály: normáljuk χ^2-et $\nu = N - M$-mel. A modell elfogadhatóan illeszkedik, ha $\frac{\chi^2}{\nu} \approx 1$

Mennyire illeszkedik jól a modell?

Megjegyzés: mivel az $a_0, a_1, \ldots a_M$ értékeket úgy határoztuk meg, hogy χ^2 összeg minimális legyen, ezért a fenti összegben nem minden tag független $\Rightarrow$ ezért van $\nu = N - M$ szabadsági fok

Mikor fogadhatjuk el a modellt?
Egyszerű szabály: normáljuk χ^2-et $\nu = N - M$-mel. A modell elfogadhatóan illeszkedik, ha $\frac{\chi^2}{\nu} \approx 1$

Pontosabban: χ^2 statisztikus átlaga ν, ekörül a szórása $\sqrt{2\nu}$.

Példa: parabola illesztése 5 pontra

Emlékeztető: feltételezve, hogy $\sigma_i = 0.1$, azt kaptuk, hogy

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1.049 \\ -0.020 \\ 0.986 \end{bmatrix}$$

Az illesztés jósága:

$$\begin{aligned} \chi^2 &= (\mathbf{Xa} - \mathbf{y}/\sigma_i)^2 \\ &= 4.11 \end{aligned}$$

$$\frac{\chi^2}{\nu} = \frac{4.11}{5-3} = 2.06$$

Ez még a szóráson belül van.