

Illesztett paraméterek hibája I

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2021. március 1.

Az illesztett paraméterek hibája

Az $y^{(i)}$ mérési pontokra illesztettünk egy $h(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ modellt. Mennyire tekinthetők az \mathbf{a} paraméterértékek pontosnak?

Két különböző dolgot vizsgálhatunk:

- **hibaterjedés:** a mérési hibából következően mekkora az illesztett paraméterek bizonytalansága
- **konfidencia intervallumok:** mennyire lehetünk biztosak abban, hogy a mérés alapján a “valódi” paramétereket sikerült megilleszteni?

Példa: hibaterjedés egyenes illesztés esetén

$a \cdot x + b$ egyenesillesztés esetén a $y^{(i)}$ mért értékek σ_i hibája hogyan befolyásolja a kapott a és b paramétereket?

A hibaterjedés törvénye szerint egy $f(y^{(i)})$ függvény értékének hibája:

$$\sigma_f^2 = \sum_i \sigma_i^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y^{(i)}} \right)^2$$

⇒ lásd [Statisztikus hiba, hibaterjedés](#) fóliák

Példa: hibaterjedés egyenes illesztés esetén

$a \cdot x + b$ egyenesillesztés esetén a $y^{(i)}$ mért értékek σ_i hibája hogyan befolyásolja a kapott a és b paramétereket?

A hibaterjedés törvénye szerint egy $f(y^{(i)})$ függvény értékének hibája:

$$\sigma_f^2 = \sum_i \sigma_i^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y^{(i)}} \right)^2$$

⇒ lásd [Statisztikus hiba, hibaterjedés](#) fóliák

Emlékeztető (lásd [Egyenesillesztés](#) fóliák): $\{(x^{(i)}, y^{(i)})\}$ adathalmaz mérési pont, mért érték adatpárokból, σ_i az $y^{(i)}$ hibája.

Jelölések:

$$S = \sum_i \frac{1}{\sigma_i^2} \quad S_x = \sum_i \frac{x^{(i)}}{\sigma_i^2} \quad S_y = \sum_i \frac{y^{(i)}}{\sigma_i^2}$$

$$S_{xx} = \sum_i \frac{(x^{(i)})^2}{\sigma_i^2} \quad S_{xy} = \sum_i \frac{x^{(i)} y^{(i)}}{\sigma_i^2} \quad \Delta = S \cdot S_{xx} - S_x^2$$

Hibaterjedés egyenes illesztés esetén

Ezeket felhasználva kifejezéseket kaptunk a -ra és b -re:

$$a = \frac{S_{xx} \cdot S_y - S_x \cdot S_{xy}}{\Delta} \quad b = \frac{S \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y}{\Delta}$$

Ezt felhasználva:

$$\frac{\partial a}{\partial y^{(i)}} = \frac{S_{xx} - S_x x^{(i)}}{\sigma_i^2 \Delta} \quad \frac{\partial b}{\partial y^{(i)}} = \frac{S x^{(i)} - S_x}{\sigma_i^2 \Delta}$$

a , b hibája és kovarianciája

$$\sigma_a^2 = \frac{S_{xx}}{\Delta} \quad \sigma_b^2 = \frac{S}{\Delta} \quad \text{Cov}(a, b) = -S_x / \Delta$$

Asszimptotikus hiba

- a hibaterjedés végigszámolása bonyolult esetben nem lehetséges
- ha a modell analitikus alakja ismert, egy egyszerű módszer adható a paraméterek bizonytalanságának becslésére

Tekintsük $\chi^2(\mathbf{a}; \mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ viselkedését a minimum körül:

- $\chi^2(\mathbf{a})$ az \mathbf{a}_0 minimum körül Taylor-sorba fejthető

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \chi_0^2 + \left. \frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} \right|_{\mathbf{a}_0} (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) + (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0)^T \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_k \partial a_l} \right|_{\mathbf{a}_0} (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) + \dots$$

- a minimumhelyen az első derivált definíció szerint 0
- a második derivált pozitív definit, az *irányonkénti* nagysága jellemzi, hogy “mennyire stabil” a minimum
- bízunk benne, hogy a magasabb rendű tagok kicsik

A Hesse-mátrix

Egy többváltozós függvény “görbületét” jellemzi a parciális második deriváltak segítségével.

$\chi^2(\mathbf{a})$ -re felírva:

$$2 \cdot \alpha_{kl} = \frac{\partial^2 \chi^2(\mathbf{a})}{\partial a_k \partial a_l}$$

Állítás:

- az α_{kl} mátrix **inverze** jellemzi az illesztett paraméterek standard hibáját
- az átlós elemekben σ_k^2 jelenik meg
- a nem diagonális elemekben a k . és l . paraméterek kovarianciája
- normál eloszlású mérési hibák és lineáris illesztés esetén ez egzaktul belátható
- egyéb esetben csak (jó) közelítés

A Hesse-mátrix általános lineáris függvényillesztés esetén

Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a mérés hibája állandó: $\sigma_i = \sigma$
 $\chi^2(\mathbf{a})$ és a szükséges deriváltak kifejezése a \mathbf{X} tervmátrix segítségével:

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \sum_i \left[\sum_j (X_{ij} a_j) - y^{(i)} / \sigma \right]^2$$

$$\frac{\partial \chi^2(\mathbf{a})}{\partial a_k} = 2 \cdot \sum_i \left[\sum_j X_{ik} X_{ij} a_j - X_{ik} y^{(i)} / \sigma \right]$$

$$\frac{\partial^2 \chi^2(\mathbf{a})}{\partial a_k \partial a_l} = 2 \cdot \sum_i [X_{ik} X_{il}]$$

A Hesse-mátrix általános lineáris függvényillesztés esetén

Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a mérés hibája állandó: $\sigma_i = \sigma$
 $\chi^2(\mathbf{a})$ és a szükséges deriváltak kifejezése a \mathbf{X} tervmátrix segítségével:

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \sum_i \left[\sum_j (X_{ij} a_j) - y^{(i)} / \sigma \right]^2$$

$$\frac{\partial \chi^2(\mathbf{a})}{\partial a_k} = 2 \cdot \sum_i \left[\sum_j X_{ik} X_{ij} a_j - X_{ik} y^{(i)} / \sigma \right]$$

$$\frac{\partial^2 \chi^2(\mathbf{a})}{\partial a_k \partial a_l} = 2 \cdot \sum_i [X_{ik} X_{il}]$$

A Hesse és a kovariancia mátrix

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \quad \mathbf{C} = \boldsymbol{\alpha}^{-1}$$

Példa: parabola illesztése 5 pontra

A mérési adatok

$$\begin{aligned}x^{(i)} &= \{ -2, -1, 0, 1, 2 \} \\y^{(i)} &= \{ 5.1, 1.9, 1.1, 2.1, 4.9 \}\end{aligned}$$

A mérési hiba az egyszerűség kedvéért $\sigma_i = \sigma = 0.1$

A modell: $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, azaz $f_1(x) = 1$, $f_2(x) = x$ és $f_3(x) = x^2$.

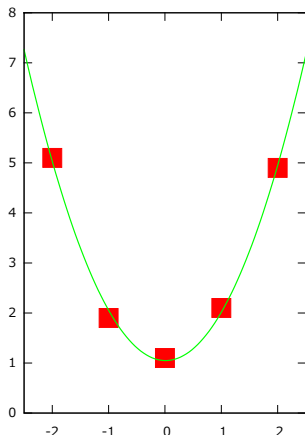
$$\mathbf{X} = 10 \begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = 10^2 \begin{bmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{bmatrix}$$

A függvényillesztés eredménye

Az $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ egyenletet \mathbf{a} -ra megoldva:

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



A konkrét példában

Az illesztett modell:

$$f(x) = 1.049 - 0.020x + 0.986x^2$$

A kovarianciamátrix:

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = 10^{-2} \begin{bmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{bmatrix}^{-1} = 10^{-2} \begin{bmatrix} 0.49 & 0 & -0.14 \\ 0 & 0.10 & 0 \\ -0.14 & 0 & 0.07 \end{bmatrix}$$

Vagyis az egyes paraméterek szórása és kovarianciája:

$$\sigma(a_0) = 0.070$$

$$\sigma(a_1) = 0.032$$

$$\sigma(a_2) = 0.027$$

$$\text{cov}(a_0, a_2) = -0.014$$

Feladat: számoljuk ki a Hesse mátrixot és az inverzét az egyenesillesztés esetére! Látunk-e különbséget a kapott hibában a hibaterjedés képletének felhasználásával kapott eredményhez képest?