Egyenesillesztés legkisebb négyzetek költségfüggvénnyel

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2023. március 2.

Egyenes illesztése

Egyváltozós adathalmaz

- $x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(i)}$ mérési pontok, ezeknek nincs hibájuk
- $y^{(1)}, y^{(2)}, ..., y^{(i)}$ mért értékek
- $\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i$ becsült hibák

Feladat: illesszünk a pontokra egyenest $\chi^2(\mathbf{a}; x^{(i)}, y^{(i)})$ költségfüggvény segítségével

- modell: $h(x; \mathbf{a}) = a + b \cdot x$
- a költségfüggvény:

$$\chi^2(\mathbf{a}; x^{(i)}, y^{(i)}) = \sum_i \left(\frac{y^{(i)} - a - bx^{(i)}}{\sigma_i} \right)^2$$

Milyen a és b mellett lesz χ^2 minimális?

Egyenes illesztése

A minimumhelyen a parciális deriváltak eltűnnek:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_i \frac{y^{(i)} - a - bx^{(i)}}{\sigma_i^2} \\ 0 &= \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_i \frac{x_i (y^{(i)} - a - bx^{(i)})}{\sigma_i^2} \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy ez egy lineáris egyenletrendszer a-ra és b-re!

Megjegyzések:

- biztos, hogy megtaláljuk a minimumhelyet, mert χ^2 kifejezése pozitív kvadratikus függvénye a, b-nek.

Egyenes illesztése

Jelölések:

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

$$S_{xx} = \sum_i \frac{(x^{(i)})^2}{\sigma_i^2} \qquad S_{xy} = \sum_i \frac{x^{(i)} y^{(i)}}{\sigma_i^2}$$

Egyenes illesztése

Jelölések:

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

$$S_{xx} = \sum_i \frac{(x^{(i)})^2}{\sigma_i^2} \qquad S_{xy} = \sum_i \frac{x^{(i)} y^{(i)}}{\sigma_i^2}$$

Az új jelölésekkel az egyenletrendszer a-ra és b-re:

$$\begin{aligned} Sa + S_x b &= S_y \\ S_x a + S_{xx} b &= S_{xy} \end{aligned}$$

Egyenes illesztése

Az egyenletrendszer determinánsa:

$$\Delta = S \cdot S_{xx} - S_x^2$$

Az egyenletrendszer megoldása:

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

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

Ezek az illesztett egyenes paraméterei.

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:

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

ahol σ_i az $y^{(i)}$ hibája

Hibaterjedés egyenes illesztés esetén

Az a, b paraméterekre kapott kifejezéseket felhasználva:

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

a, b hibája és kovarianciája

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