

DOPASOWANIE ZALEŻNOŚCI LINIOWEJ DO WYNIKÓW POMIARÓW

Jednym z istotnych zagadnień analizy danych pomiarowych jest dopasowanie zależności teoretycznej do wyników pomiarów. Dotyczy ono sytuacji, gdy dokonano serii pomiarów n par (x_i, y_i) wielkości x i y , które są ze sobą powiązane zależnością $y = f(x, a_0, a_1, \dots, a_m)$ gdzie $a_0, a_1, \dots, a_m$ to parametry tej zależności funkcyjnej. Na podstawie otrzymanych wyników chcemy teraz oszacować (estymować) wartości parametrów $a_0, a_1, \dots, a_m$ oraz niepewność tego oszacowania. Oczywiście oszacowanie dotyczy tylko parametrów zależności funkcyjnej - jej forma tzn. czy jest to zależność liniowa, wielomianowa czy też jeszcze inna jest przez badacza zakładana np. na podstawie teorii opisującej badane zjawisko.

Najprostszym, a jednocześnie najczęściej spotykanym przypadkiem takiego zagadnienia jest dopasowanie funkcji liniowej

$$y = a \cdot x + b$$

Założmy, że przeprowadzono n pomiarów par (x_i, y_i) gdzie $i = 1, \dots, n$ wielkości zależnych od siebie liniowo. Każdy z pomiarów y_i cechuje rozrzut opisany rozkładem normalnym o dyspersji σ_{y_i} , natomiast pomiary x_i można uznać za dokładne (błędy tych pomiarów są na tyle małe, że możemy je pominąć).

Naszym zadaniem jest znalezienie takich wartości parametrów a i b , aby otrzymana prosta najlepiej pasowała do wyników pomiarów. W tym celu posłużymy się metodą największej wiarygodności.

Rozkład prawdopodobieństwa y_i jest rozkładem Gaussa, zatem prawdopodobieństwo otrzymania w wyniku pomiaru wartości y_i opisuje wzór:

$$dp(y_i) = f(y_i, \sigma_{yi}) \cdot dy_i = \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_i - E(y_i))^2}{2\sigma_{yi}^2}\right) \cdot dy_i$$

Wartość oczekiwaną $E(y_i)$ można wyznaczyć na podstawie wartości x_i oraz zależności pomiędzy y oraz x . Otrzymamy zatem

$$E(y_i) = a \cdot x_i + b$$

a przedstawiony powyżej wzór przyjmie postać:

$$dp(y_i) = f(y_i, \sigma_{yi}, x_i) \cdot dy_i = \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{2\sigma_{yi}^2}\right) \cdot dy_i$$

Prawdopodobieństwo otrzymania serii par wartości $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ jest zatem równe:

$$dP(y_1, \dots, y_n, x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{2\sigma_{yi}^2}\right) \cdot dy_i$$

Oznacza to, że funkcja wiarygodności będzie miała postać:

$$f(y_1, \dots, y_n, \sigma_{y1}, \dots, \sigma_{yn}, x_1, \dots, x_n, a, b) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{2\sigma_{yi}^2}\right)$$

Proste przekształcenia prowadzą do nieco innej postaci funkcji wiarygodności:

$$\begin{aligned}
 f(y_1, \dots, y_n, \sigma_{y1}, \dots, \sigma_{yn}, x_1, \dots, x_n, a, b) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{2\sigma_{yi}^2}\right) = \\
 &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \prod_{i=1}^n \exp\left(-\frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{2\sigma_{yi}^2}\right) = \\
 &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_{yi} \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{\sigma_{yi}^2}\right)
 \end{aligned}$$

Oznacza to, iż poszukiwanie maksimum funkcji wiarygodności z uwagi na parametry a i b jest równoznaczne z poszukiwaniem minimum funkcji:

$$z(y_1, \dots, y_n, \sigma_{y1}, \dots, \sigma_{yn}, x_1, \dots, x_n, a, b) = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - a \cdot x_i - b)^2}{\sigma_{yi}^2}$$

Jak widać funkcja ta jest sumą kwadratów odległości pomiędzy wartościami y wyliczonymi za pomocą założonej postaci zależności $y = a \cdot x + b$, a wartościami y_i pochodzącymi z pomiarów ważonych odwrotnością kwadratu dyspersji σ_{yi} .

Dlatego też przedstawiana metoda nazywana jest także **metodą najmniejszych kwadratów**. Warto podkreślić, że funkcja z jest zmienną losową o rozkładzie χ^2 .

Wzory oszacowujące najlepiej dopasowane do serii wyników pomiarów wartości parametrów a i b znajdujemy zatem rozwiązując układ równań:

$$\frac{\partial z}{\partial a} = 0 \qquad \frac{\partial z}{\partial b} = 0$$

W kolejnych przekształceniach otrzymamy:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial z}{\partial a} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot 2(y_i - ax_i - b) \cdot (-x_i) \right) = -2 \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i y_i - a \cdot \frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i^2 - b \cdot \frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i \right) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial z}{\partial b} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot 2(y_i - ax_i - b) \cdot (-1) \right) = -2 \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot y_i - a \cdot \frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i - b \cdot \frac{1}{\sigma_{yi}^2} \right) = 0 \end{array} \right.$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i y_i \right) - a \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i^2 \right) - b \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i \right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot y_i \right) - a \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \cdot x_i \right) - b \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_{yi}^2} \right) = 0$$

Oznaczając

$$w_i = 1/\sigma_{yi}^2$$

możemy zapisać:

$$\left\{ \begin{array}{l} a \cdot \sum_{i=1}^n (w_i x_i^2) + b \cdot \sum_{i=1}^n (w_i x_i) = \sum_{i=1}^n (w_i x_i y_i) \\ a \cdot \sum_{i=1}^n (w_i x_i) + b \cdot \sum_{i=1}^n w_i = \sum_{i=1}^n (w_i y_i) \end{array} \right.$$

Wprowadźmy następujące oznaczenia dla sum występujących w równaniach:

$$S_{wxy} = \sum_{i=1}^n w_i x_i y_i \quad S_{wxx} = \sum_{i=1}^n w_i x_i^2 \quad S_{wx} = \sum_{i=1}^n w_i x_i \quad S_{wy} = \sum_{i=1}^n w_i y_i \quad S_w = \sum_{i=1}^n w_i$$

Równania przedstawione na poprzednim slajdzie można wówczas zapisać:

$$\begin{cases} a \cdot S_{wxx} + b \cdot S_{wx} = S_{wxy} \\ a \cdot S_{wx} + b \cdot S_w = S_{wy} \end{cases}$$

Rozwiązując powyższy układ otrzymamy następujące wzory na estymatory parametrów a i b :

$$a = \frac{S_{wxy}S_w - S_{wx}S_{wy}}{S_{wxx}S_w - S_{wx}^2}$$

$$b = \frac{S_{wxx}S_{wy} - S_{wxy}S_{wx}}{S_{wxx}S_w - S_{wx}^2}$$

Ponieważ estymatory a i b są funkcjami wyników pomiarów $y_1, \dots, y_n$ niepewność wyznaczenia tych estymatorów możemy wyznaczyć korzystając z prawa propagacji niepewności. Po odpowiednich obliczeniach otrzymamy:

$$u(a) = \sqrt{\frac{S_w}{S_{wxx}S_w - S_{wx}^2}}$$

$$u(b) = \sqrt{\frac{S_{wxx}}{S_{wxx}S_w - S_{wx}^2}}$$

W praktyce wyznaczone wzory możemy zastosować podstawiając znaną niepewność pomiarów $u(y_i)$ w miejsce dyspersji σ_{y_i} . W przypadku gdy nie znamy niepewności $u(y_i)$ przyjmujemy, że jest ona jednakowa dla wszystkich pomiarów y_i , a wówczas możemy podstawić $w_i = 1$, dla $i = 1, \dots, n$.

Metodą dopasowania zależności liniowej możemy wykorzystać również wówczas gdy zależność $y = f(x)$ nie jest co prawda liniowa, ale może zostać zlinearyzowana przez przekształcenie zmiennej niezależnej tzn. możemy określić nową wielkość x_N będącą funkcją wielkości x ($x_N = f_N(x)$) w taki sposób, że

$$y = a \cdot x_N + b$$

Przykładem może być zagadnienie wyznaczenia przyspieszenia ziemskiego za pomocą wahadła matematycznego poprzez pomiary okresu drgań dla różnych długości wahadła. Okres drgań T jest w tutaj nieliniową funkcją długości l wahadła:

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$$

Jeżeli jednak dokonamy podstawienia $x_N = (l)^{1/2}$ wówczas otrzymamy zależność liniową

$$T = a \cdot x_N \quad \text{gdzie : } a = \frac{2\pi}{\sqrt{g}}$$

Do zależności tej możemy za pomocą opisanej wcześniej metody dopasować prostą i tym samym oszacować wartość parametru a oraz na jego podstawie przyspieszenie ziemskie g . Trzeba wyraźnie zaznaczyć, że należy unikać dokonywania linearyzacji poprzez przekształcenie zmiennej zależnej y , gdyż rozkład przekształconej zmiennej nie jest już rozkładem normalnym.