PODSTAWY ANALIZY DANYCH POMIAROWYCH CZ. 5

Iteracyjna metoda najmniejszych kwadratów

Stosując metodę najmniejszych kwadratów do tej pory zakładaliśmy, że postać funkcji $f(x_i, a_1, \dots, a_k)$ opisującej model pozwala na analityczne zminimalizowanie funkcji χ^2 w celu wyznaczenia wartości parametrów modelu. W przypadku gdy postać funkcji modelu nie pozwala na analityczne wyprowadzenie parametrów $(a_1, \dots, a_k)$, jest on trudniejszy w oszacowaniu i często wymaga przybliżeń numerycznych. Wykorzystując różne algorytmy numeryczne np.: metodę Newtona, metodę największego spadku, algorytm Levenberga-Marquardta można startując z danego punktu początkowego (początkowego przybliżenia), poprzez kolejne, iteracyjnie uzyskiwane, przybliżenia uzyskać zbieżność do optymalnej estymaty parametrów $(a_1, \dots, a_k)$ według metody najmniejszych kwadratów. W dalszym ciągu zakładamy, że najlepszym dopasowaniem modelu $f(x_i, a_1, \dots, a_k)$ do serii danych pomiarowych $(x_i, y_i \pm \sigma_i)$ jest to minimalizujące $\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(y_i - f(x_i, a_1, \dots, a_k)\right)^2}{\sigma_i^2}$.

Procedura optymalizacji polega na wykonaniu kolejnych kroków:

1. Zdefiniowaniu początkowych wartości parametrów modelu $(a_1^0, \dots, a_k^0)$ tak, aby były one bliskie rzeczywistym wartościom parametrów $(a_1, \dots, a_k)$ i umożliwiały otrzymanie zbieżności algorytmu;
2. Określeniu tolerancji $\delta\chi^2$ zmian funkcji χ^2;
3. Obliczeniu funkcji χ^2 dla parametrów początkowych: $\chi^2(\boldsymbol{a}^0) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(y_i - f(x_i, a_1^0, \dots, a_k^0)\right)^2}{\sigma_i^2}$;
4. Obliczenie „lokalnie” optymalnej korekcji estymat oraz iteracyjna zmiana parametrów $\left(a_1^i, \dots, a_k^i\right)$, do momentu spełnienia warunku, że kolejne wartości funkcji χ^2 nie różnią się od siebie o więcej niż założona tolerancja.

W celu obliczenia niepewności uzyskanych wartości współczynników $(a_1, \dots, a_k)$ ponownie korzysta się z propagacji małych błędów przyjmując, że niepewność pomiarowa wynika tylko z niepewności zmiennej y.

Istnieje jednak szereg przykładów funkcji, w których parametry pojawiają się w formie nieliniowej, ale po wykonaniu zamiany zmiennych, zależności te można przekształcić do postaci liniowej funkcji szukanych parametrów – być może kosztem przedefiniowania niektórych z nich. Po wyznaczeniu ocen parametrów zależności liniowej oraz ich niepewności i oceny kowariancji, odwracamy transformację i uzyskujemy oceny parametrów zależności oryginalnej, a ich niepewności i ocenę ich kowariancji wyznaczamy na podstawie wzoru na propagację małych błędów. Jeśli niepewności zmiennej zależnej są na tyle małe, że przybliżenie propagacji małych błędów jest wystarczająco dokładne, to oceny wartości parametrów uzyskane na podstawie zlinearyzowanej zależności są bardzo bliskie wartościom wynikającym z metody najmniejszych kwadratów zastosowanej do oryginalnego problemu.

Niepewności oraz korelacje funkcji

Dla funkcji $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ zmiennych x_i, której rozwinięcie:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) \approx f(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_i - \mu_i) \tag{1}$$

do wyrazów liniowych wokół punktu $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$ dostarcza jej akceptowalnej aproksymacji w przestrzeni zmiennych x_i w hiperkostce o rozmiarach kilku niepewności u_i, wzór na niepewność wartości tej funkcji przyjmuje postać:

$$u_f^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 u_i^2 + \sum_{i=1,\, j\neq i}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial x_j} s_{ij}. \tag{2}$$

W przypadku dwóch funkcji $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ oraz $g(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ zmiennych x_i o niepewnościach u_i, do których to funkcji mają zastosowanie założenia dotyczące wyznaczania niepewności wielkości pośrednio mierzonej (przenoszenia niepewności), ocena kowariancji między tymi funkcjami przyjmuje postać:

$$s_{fg} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial x_i} u_i^2 + \sum_{i=1, j\neq i}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial x_j} s_{ij}. \qquad (3)$$

Należy zwrócić uwagę na następujący fakt: nawet gdy zmienne x_i są statystycznie niezależne, funkcje f i g pozostają skorelowane – fluktuacje wartości zmiennych wymuszają odpowiednią współzmienność wartości tych funkcji.