Úvod do praktické fyziky, cvičení 11
Metoda nejmenších čtverců – pokračování

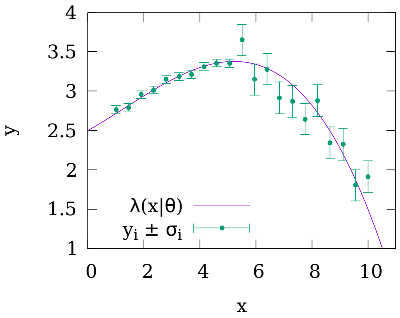
Jan Matoušek

15. 12. 2020

UNIVERZITA KARLOVA
Matematicko-fyzikální
fakulta

Víme ze cvičení 10:

- Nechť mezi veličinou x a y platí vztah
$$y = \lambda(x|\boldsymbol{\theta}).$$
- Modelová funkce λ závisí na parametrech
$$\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots \theta_m).$$
- V bodech $x_1, x_2, \ldots, x_N$ jsme naměřili hodnoty $y_1, y_2, \ldots, y_N$ se standardními odchylkami $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N$.
- $y_i \in N\big(\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}), \sigma_i\big)$
- Nejlepší odhad $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ je ten, který minimalizuje χ^2
$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})\right]^2}{\sigma_i^2}$$
(je to totiž ten, který maximalizuje $\ln L$).



- Zabývejme se funkcí lineární ve svých parametrech, tedy takovou, která jde napsat jako

$$\lambda(x|\boldsymbol{\theta}) = \theta_1 f_1(x) + \theta_2 f_2(x) + \ldots + \theta_M f_M(x),$$

kde $f_i(x)$ jsou už funkce bez volných parametrů. Příklad: $a + bx + c\cos x + d\sqrt{x}$.

- Předpovědi modelu v bodech $x_1, x_2, \ldots, x_N$ můžeme zapsat pomocí matice A jako

$$\begin{pmatrix} \lambda(x_1|\boldsymbol{\theta}) \\ \lambda(x_2|\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \lambda(x_N|\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_M(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_M(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_N) & f_2(x_N) & \cdots & f_M(x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_M \end{pmatrix}, \quad \text{neboli} \quad \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$$

- Např. pro model $\lambda(x|a,b) = a + bx + cx^2$ to bude

$$\begin{pmatrix} \lambda(x_1|a,b,c) \\ \vdots \\ \lambda(x_N|a,b,c) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

- Zabývejme se funkcí lineární ve svých parametrech, tedy takovou, která jde napsat jako
$$\lambda(x|\boldsymbol{\theta}) = \theta_1 f_1(x) + \theta_2 f_2(x) + \ldots + \theta_M f_M(x),$$
kde $f_i(x)$ jsou už funkce bez volných parametrů. Příklad: $a + bx + c\cos x + d\sqrt{x}$.
- Předpovědi modelu v bodech $x_1, x_2, \ldots, x_N$ můžeme zapsat pomocí matice A jako
$$\begin{pmatrix} \lambda(x_1|\boldsymbol{\theta}) \\ \lambda(x_2|\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \lambda(x_N|\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_M(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_M(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_N) & f_2(x_N) & \cdots & f_M(x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_M \end{pmatrix}, \quad \text{neboli} \quad \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$$
- Např. pro model $\lambda(x|a,b) = a + bx + cx^2$ to bude
$$\begin{pmatrix} \lambda(x_1|a,b,c) \\ \vdots \\ \lambda(x_N|a,b,c) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

Lineární regrese pomocí matic

- Zabývejme se funkcí lineární ve svých parametrech, tedy takovou, která jde napsat jako

$$\lambda(x|\boldsymbol{\theta}) = \theta_1 f_1(x) + \theta_2 f_2(x) + \ldots + \theta_M f_M(x),$$

  kde $f_i(x)$ jsou už funkce bez volných parametrů. Příklad: $a + bx + c\cos x + d\sqrt{x}$.
- Předpovědi modelu v bodech $x_1, x_2, \ldots, x_N$ můžeme zapsat pomocí matice A jako

$$\begin{pmatrix} \lambda(x_1|\boldsymbol{\theta}) \\ \lambda(x_2|\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \lambda(x_N|\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_M(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_M(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_N) & f_2(x_N) & \cdots & f_M(x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_M \end{pmatrix}, \quad \text{neboli} \quad \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$$

- Např. pro model $\lambda(x|a,b) = a + bx + cx^2$ to bude

$$\begin{pmatrix} \lambda(x_1|a,b,c) \\ \vdots \\ \lambda(x_N|a,b,c) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

Lineární regrese pomocí matic

- Máme lineární model $\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$.
- Potom můžeme napsat

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})\right]^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2}{\sigma_i^2}.$$

- Využijeme ještě kovarianční matice $V_{ij} = \mathrm{cov}(y_i, y_j)$. Pro nezávislá měření je

$$V = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_N^2) \qquad \text{a} \qquad V^{-1} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, ..., \frac{1}{\sigma_N^2}\right).$$

- Takže napíšeme

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2.$$

- Hledáme minimum, položíme derivace rovné nule pro $k = 1, 2, ..., M$:

$$0 = \frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_k} = -2\sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\hat{\theta}_j\right]A_{ik} = -2\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j$$

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j \qquad \text{pro} \quad k = 1, 2, ..., M.$$

- To se dá zapsat maticemi (pozn.: transponovaná matice $A_{ij}^{\mathrm{T}} = A_{ji}$),

$$A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\,\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

Lineární regrese pomocí matic

- Máme lineární model $\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$.
- Potom můžeme napsat
$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})\right]^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2}{\sigma_i^2}.$$
- Využijeme ještě kovarianční matice $V_{ij} = \mathrm{cov}(y_i, y_j)$. Pro nezávislá měření je
$$V = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_N^2) \qquad \text{a} \qquad V^{-1} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, ..., \frac{1}{\sigma_N^2}\right).$$
- Takže napíšeme
$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2.$$
- Hledáme minimum, položíme derivace rovné nule pro $k = 1, 2, ..., M$:
$$0 = \frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_k} = -2\sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\hat{\theta}_j\right] A_{ik} = -2\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j$$
$$\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j \qquad \text{pro} \quad k = 1, 2, ..., M.$$
- To se dá zapsat maticemi (pozn.: transponovaná matice $A_{ij}^{\mathrm{T}} = A_{ji}$),
$$A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\,\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

Lineární regrese pomocí matic

- Máme lineární model $\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$.
- Potom můžeme napsat
$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})\right]^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2}{\sigma_i^2}.$$
- Využijeme ještě kovarianční matice $V_{ij} = \mathrm{cov}(y_i, y_j)$. Pro nezávislá měření je
$$V = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_N^2) \qquad \text{a} \qquad V^{-1} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, ..., \frac{1}{\sigma_N^2}\right).$$
- Takže napíšeme
$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2.$$
- Hledáme minimum, položíme derivace rovné nule pro $k = 1, 2, ..., M$:
$$0 = \frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_k} = -2\sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\hat{\theta}_j\right]A_{ik} = -2\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j$$
$$\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j \qquad \text{pro} \quad k = 1, 2, ..., M.$$
- To se dá zapsat maticemi (pozn.: transponovaná matice $A_{ij}^{\mathrm{T}} = A_{ji}$),
$$A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\,\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

Lineární regrese pomocí matic

- Máme lineární model $\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$.
- Potom můžeme napsat

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})\right]^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2}{\sigma_i^2}.$$

- Využijeme ještě kovarianční matice $V_{ij} = \mathrm{cov}(y_i, y_j)$. Pro nezávislá měření je

$$V = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_N^2) \qquad \text{a} \qquad V^{-1} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, ..., \frac{1}{\sigma_N^2}\right).$$

- Takže napíšeme

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2.$$

- Hledáme minimum, položíme derivace rovné nule pro $k = 1, 2, ..., M$:

$$0 = \frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_k} = -2\sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\hat{\theta}_j\right]A_{ik} = -2\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j$$

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j \qquad \text{pro} \quad k = 1, 2, ..., M.$$

- To se dá zapsat maticemi (pozn.: transponovaná matice $A_{ij}^{\mathrm{T}} = A_{ji}$),

$$A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\,\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

Lineární regrese pomocí matic

- Máme lineární model $\lambda(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$.
- Potom můžeme napsat

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \lambda(x_i|\boldsymbol{\theta})\right]^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2}{\sigma_i^2}.$$

- Využijeme ještě kovarianční matice $V_{ij} = \mathrm{cov}(y_i, y_j)$. Pro nezávislá měření je

$$V = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_N^2) \qquad \text{a} \qquad V^{-1} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, ..., \frac{1}{\sigma_N^2}\right).$$

- Takže napíšeme

$$\chi^2(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j\right]^2.$$

- Hledáme minimum, položíme derivace rovné nule pro $k = 1, 2, ..., M$:

$$0 = \frac{\partial\chi^2}{\partial\theta_k} = -2\sum_{i=1}^{N} V_{ii}^{-1}\left[y_i - \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\hat{\theta}_j\right]A_{ik} = -2\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j$$

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ik}V_{ii}^{-1}y_i = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{ik}V_{ii}^{-1}A_{ij}\hat{\theta}_j \qquad \text{pro} \quad k = 1, 2, ..., M.$$

- To se dá zapsat maticemi (pozn.: transponovaná matice $A_{ij}^{\mathrm{T}} = A_{ji}$),

$$A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\,\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}}V^{-1}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

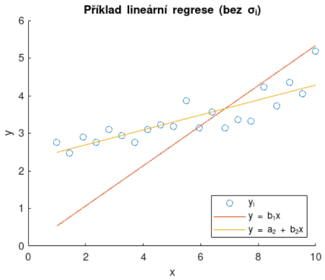
Rekapitulace

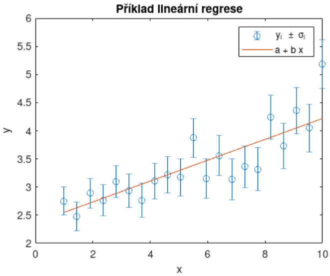
- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (A^{\mathrm{T}}V^{-1}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

Matlab (`upf_cv11_linreg.m`, `upf_cv11_linregerr.m`)

- Příklad: fit lineární funkcí $\lambda(x|\theta_1, \theta_2) = \theta_1 + \theta_2 x$. Tedy `A = [ones(N,1), x];`
- Lineární regrese bez $\boldsymbol{\sigma}$: `theta = A \ y;`
- Operátor \ provádí dělení zleva, čili řeší rovnici $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{\theta}$, pokud to lze. Pokud ne (naše A není čtvercová!), minimalizuje čtverce odchylek.
- Lineární regrese se $\boldsymbol{\sigma}$:
  `invV = diag(1./sigma.^2);`
  `B = A.' * invV * A \ A.' * invV;`
- `.` znamená provedení operace po složkách.
- `.'` transponuje matici.



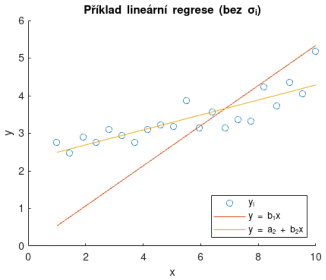


Lineární regrese pomocí matic: Prakticky v Matlabu

Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (A^{\mathrm{T}}V^{-1}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}V^{-1}\boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}.$$

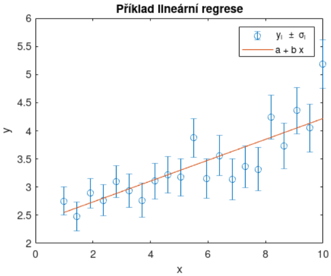


Matlab (`upf_cv11_linreg.m`, `upf_cv11_linregerr.m`)

- Příklad: fit lineární funkcí $\lambda(x|\theta_1, \theta_2) = \theta_1 + \theta_2 x$. Tedy `A = [ones(N,1), x];`
- Lineární regrese bez $\boldsymbol{\sigma}$: `theta = A \ y;`
- Operátor \ provádí dělení zleva, čili řeší rovnici $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{\theta}$, pokud to lze. Pokud ne (naše A není čtvercová!), minimalizuje čtverce odchylek.
- Lineární regrese se $\boldsymbol{\sigma}$:

```
invV = diag(1./sigma.^2);
B = A.' * invV * A \ A.' * invV;
```

- `.` znamená provedení operace po složkách.
- `.'` transponuje matici.



Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}} V^{-1} A\right)^{-1} A^{\mathrm{T}} V^{-1} \boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}$.

- Jaká je kovariance získaných parametrů?

$$\mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j) = E\left[\left(\hat{\theta}_i - E[\hat{\theta}_i]\right)\left(\hat{\theta}_j - E[\hat{\theta}_j]\right)\right] = E\left[\left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_j\right]$$

$$= E\left[\left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_j\right] = E\left[\sum_{k=1}^{M} B_{ik}\left(y_k - E[y_k]\right) \sum_{l=1}^{M} B_{jl}\left(y_l - E[y_l]\right)\right]$$

$$= \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl} E\left[\left(y_l - E[y_l]\right)\left(y_l - E[y_l]\right)\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl}\,\mathrm{cov}(y_k, y_l).$$

- Napsáno maticově,

$$U = BVB^{\mathrm{T}} \qquad \text{kde} \qquad U_{ij} = \mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j).$$

- `upf_cv11_linregerr.m`

Lineární regrese pomocí matic: Kovariance parametrů

Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}} V^{-1} A\right)^{-1} A^{\mathrm{T}} V^{-1} \boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}$.

- Jaká je kovariance získaných parametrů?

$$\mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j) = E\left[\left(\hat{\theta}_i - E[\hat{\theta}_i]\right)\left(\hat{\theta}_j - E[\hat{\theta}_j]\right)\right] = E\left[\left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_j\right]$$

$$= E\left[\left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_j\right] = E\left[\sum_{k=1}^{M} B_{ik}\left(y_k - E[y_k]\right) \sum_{l=1}^{M} B_{jl}\left(y_l - E[y_l]\right)\right]$$

$$= \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik} B_{jl} E\left[\left(y_l - E[y_l]\right)\left(y_l - E[y_l]\right)\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik} B_{jl}\,\mathrm{cov}(y_k, y_l).$$

- Napsáno maticově,

$$U = BVB^{\mathrm{T}} \qquad \text{kde} \qquad U_{ij} = \mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j).$$

- `upf_cv11_linregerr.m`

Lineární regrese pomocí matic: Kovariance parametrů

Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}} V^{-1} A\right)^{-1} A^{\mathrm{T}} V^{-1} \boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}$.

- Jaká je kovariance získaných parametrů?

$$
\begin{aligned}
\operatorname{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j) &= E\left[\left(\hat{\theta}_i - E[\hat{\theta}_i]\right)\left(\hat{\theta}_j - E[\hat{\theta}_j]\right)\right] = E\left[\left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_j\right] \\
&= E\left[\left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_j\right] = E\left[\sum_{k=1}^{M} B_{ik}\left(y_k - E[y_k]\right) \sum_{l=1}^{M} B_{jl}\left(y_l - E[y_l]\right)\right] \\
&= \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl} E\left[\left(y_l - E[y_l]\right)\left(y_l - E[y_l]\right)\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl}\operatorname{cov}(y_k, y_l).
\end{aligned}
$$

- Napsáno maticově,

$$U = BVB^{\mathrm{T}} \qquad \text{kde} \qquad U_{ij} = \operatorname{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j).$$

- `upf_cv11_linregerr.m`

Lineární regrese pomocí matic: Kovariance parametrů

Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}} V^{-1} A\right)^{-1} A^{\mathrm{T}} V^{-1} \boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}$.

- Jaká je kovariance získaných parametrů?

$$\mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j) = E\left[\left(\hat{\theta}_i - E[\hat{\theta}_i]\right)\left(\hat{\theta}_j - E[\hat{\theta}_j]\right)\right] = E\left[\left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_j\right]$$

$$= E\left[\left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_j\right] = E\left[\sum_{k=1}^{M} B_{ik}\left(y_k - E[y_k]\right) \sum_{l=1}^{M} B_{jl}\left(y_l - E[y_l]\right)\right]$$

$$= \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl}E\left[\left(y_l - E[y_l]\right)\left(y_l - E[y_l]\right)\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl}\,\mathrm{cov}(y_k, y_l).$$

- Napsáno maticově,

$$U = BVB^{\mathrm{T}} \qquad \text{kde} \qquad U_{ij} = \mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j).$$

- upf_cv11_linregerr.m

Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}} V^{-1} A\right)^{-1} A^{\mathrm{T}} V^{-1} \boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}$.

- Jaká je kovariance získaných parametrů?

$$\begin{aligned}
\operatorname{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j) &= E\left[\left(\hat{\theta}_i - E[\hat{\theta}_i]\right)\left(\hat{\theta}_j - E[\hat{\theta}_j]\right)\right] = E\left[\left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_j\right] \\
&= E\left[\left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_j\right] = E\left[\sum_{k=1}^{M} B_{ik}\left(y_k - E[y_k]\right) \sum_{l=1}^{M} B_{jl}\left(y_l - E[y_l]\right)\right] \\
&= \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl}\,E\left[\left(y_l - E[y_l]\right)\left(y_l - E[y_l]\right)\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik}B_{jl}\operatorname{cov}(y_k, y_l).
\end{aligned}$$

- Napsáno maticově,

$$U = BVB^{\mathrm{T}} \qquad \text{kde} \qquad U_{ij} = \operatorname{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j).$$

- upf_cv11_linregerr.m

Lineární regrese pomocí matic: Kovariance parametrů

Rekapitulace

- Data $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\sigma}$ (vektory dimenze N).
- Lineární model $\lambda(x_i|\theta_1, \theta_2, ..., \theta_M) = \sum_{j=1}^{M} A_{ij}\theta_j$, kde $A_{ij} = f_j(x_i)$.
- Metoda nejmenších čtevrců dává: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(A^{\mathrm{T}} V^{-1} A\right)^{-1} A^{\mathrm{T}} V^{-1} \boldsymbol{y} = B\boldsymbol{y}$.

- Jaká je kovariance získaných parametrů?

$$\mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j) = E\left[\left(\hat{\theta}_i - E[\hat{\theta}_i]\right)\left(\hat{\theta}_j - E[\hat{\theta}_j]\right)\right] = E\left[\left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - E[B\boldsymbol{y}]\right)_j\right]$$

$$= E\left[\left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_i \left(B\boldsymbol{y} - B\,E[\boldsymbol{y}]\right)_j\right] = E\left[\sum_{k=1}^{M} B_{ik}\left(y_k - E[y_k]\right) \sum_{l=1}^{M} B_{jl}\left(y_l - E[y_l]\right)\right]$$

$$= \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik} B_{jl} E\left[\left(y_l - E[y_l]\right)\left(y_l - E[y_l]\right)\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} B_{ik} B_{jl}\,\mathrm{cov}(y_k, y_l).$$

- Napsáno maticově,

$$U = BVB^{\mathrm{T}} \qquad \text{kde} \qquad U_{ij} = \mathrm{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j).$$

- `upf_cv11_linregerr.m`

Fitování v dalších programech

- Excel/Calc: viz cvičení 10.
  - Automaticky lineární regrese bez σ_i (v grafu nebo `LINEST()`).
  - Příklad s výpočtem parametrů fitu $a + bx$.
  - Lze udělat i obecnou regresi pomocí matic (`MMULT()`, `MINVERSE()`...)
  - Lze udělat i numerickou minimizace χ^2 libovolné funkce (Solver).
- Gnuplot: viz cvičení 10.
  - Numerická minimizace χ^2 libovolné funkce, např.:
    `fit a*x**2+b*exp(c*x) 'data.txt' using 1:2:3 via a,b,c`
- ROOT: `upf_cv11_fit.cc`
  - Modelová funkce: `TF1` objekt – libovolná funkce [manuál].
  - Metoda `Fit(modelFunc,options)` objektu typu `TGraphErrors` nebo `TH1` (histogram) [manuál].
- Python: `upf_cv11_polyfit.cc`, `upf_cv11_fit.cc`
  - Fit polynomem: `numpy.polyfit(x, y, deg=D, w=invSigmas, cov=True/False)` [manuál]
  - Fit obecnou funkcí (numerická minimizace):
    `scipy.optimize.curve_fit(modelFunc,x,y,p0=initPars,sigma=sigmas)`
    Modelová funkce je libovolná Pythonovská funkce [manuál].
  - Nebo další funkce jiných modulů.
- Origin: `upf_cv11_origin.opju`
  - Profesionální program na zpracování vědeckých dat vzdáleně podobný Excelu.