2. A paraméterbecslés

2.1. A probléma megfogalmazása

A paramétereket kísérletileg meghatározott *yi* értékekre támaszkodva becsülik. Ha *n* darab kisérletet (megfigyelést, mérést) végeznek, *n* darab

$y_i = f(\mathbf{x}_i, \mathbf{a}) + b_i + e_i \qquad i = 1,2, \ldots ,n \qquad (2.1)$

egyenlet adódik, ahol $f(\mathbf{x}_i, \mathbf{a})$ az *i*-edik kisérletben beállított x_{ij} kisérleti feltételeknek, (vagy azok valamely függvényének) és az **a** paramétereknek lineáris vagy nemlineáris kifejezése. A feladat annak a számított $\hat{\mathbf{a}}$ paramétervektornak meghatározása, amely az

$$y_i - f(\mathbf{x}_i, \hat{\mathbf{a}}) = 0 \qquad i = 1,2,\ldots,n \qquad (2.2)$$

kifejezést kielégíti.

Ha a pontosság érdekében több mérést végeznek, mint amennyi a meghatározandó paraméterek *p* száma, azaz n > p, az n darab egyenletből álló

$\mathbf{y} = f(\mathbf{X}, \mathbf{a}) + \mathbf{b} + \mathbf{e} \qquad (2.3)$

egyenletrendszer több egyenletet tartalmaz, mint az ismeretlenek száma, tehát *túlhatározott* lesz. A *különbözõ* e_i és az esetleges b_i értékek miatt azonban az egyenletek egymásnak ellentmondóak, inkompatibilisak, rendszerük *inkonzisztens*.. A paraméterbecsléshez tehát ilyen tulajdonságú egyenletrendszer megoldására alkalmas módszer kell.

Túlhatározott inkonzisztens egyenletekbõl több módon (pl. konzisztens egyenletek kiválasztásával, egyenletek összeadásával) állíthatók elõ konzisztensek. Ezek megoldásai egymástól nyilvánvalóan különböznek. Vonzó lenne az olyan megoldás, amelyik pontosan ugyan nem, de bizonyos szempontból optimálisan elégíti ki valamennyi, *n* darab egyenletet.

2.2 Inkonzisztens egyenletrendszer megoldása

Mivel a túlhatározott inkonzisztens egyenletrendszer egyes egyenleteiből számított $\hat{a}_j$ paraméterek nem elégítik ki valamennyi egyenletet, a reziduális maradékok

$$\mathbf{d} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - f(\mathbf{X}, \hat{\mathbf{a}}) \qquad (2.4)$$

vektora nem zérusvektor, nem csak 0 elemeket tartalmaz. Minél kevésbé jók a paraméterek, annál nagyobbak a reziduális maradékok. Kézenfekvő olyan paramétereket keresni, amelyek a *legrövidebb* reziduális vektort biztosítják, amelyekkel a reziduális vektor hossza, (egyszerűség kedvéért annak négyzete, *Q*) minimális:

$$Q = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{d} = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f(\mathbf{x}_i \hat{\mathbf{a}})\right)^2 = \min \qquad (2.5)$$

A gondolatmenet a Q célfüggvényben fellépő, *négyzetre emelt* különbségek miatt kapta a *legkisebb négyzetek* elvének nevét.

A (2.5) követelménynek megfelelő $\hat{\mathbf{a}}$ paraméterek azok, amelyekkel 0 értékűek a Q célfüggvény paraméterek szerinti deriváltjai:

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = \frac{\partial}{\partial a_k}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - f\left(\mathbf{x_i}\hat{\mathbf{a}}\right)\right)^2 = 0 \qquad \text{k =1,2, ...,p} \qquad (2.6)$$

A (2.6) egyenletek száma természetesen megegyezik a paraméterek számával, igy azokból a célfüggvényt kielégítõ, optimális paraméterek kiszámíthatók. Ha az $f(\mathbf{X},\mathbf{a})$ modell lineáris, az egyenletek lineárisak, ha nem, a paramétereket valamely, többnyire numerikus, nemlineáris egyenletrendszer megoldó módszerrel kell meghatározni.

<u>Példa</u>

Nemlineáris modell paramétereinek becslése

x = [0.5 1 1.5 2]^T független változó vektor mellett kisérletileg meghatározzuk az

$$f(\mathbf{x},\mathbf{a}) = a_1 + \exp(a_2 x)$$

modellel leírható folyamatban megfigyelt *y* értékeket. Az **y** = [3.1 2.1 2.9 4]^T mért-érték vektort kapjuk. A

$$\begin{aligned}
3.1 &= a_1 + \exp(0.5 * a_2)\\
2.1 &= a_1 + \exp(1.0 * a_2)\\
2.9 &= a_1 + \exp(1.5 * a_2)\\
4.0 &= a_1 + \exp(2.0 * a_2)
\end{aligned}$$

egyenletek egymásnak ellentmondanak. Minimálni kell a

$$Q = \sum_{i=1}^{4}\left(y_i - f(x_i,\mathbf{a})\right)^2 = \sum_{i=1}^{4}\left(y_i - a_1 - \exp(a_2 x_i)\right)^2$$

célfüggvényt. A célfüggvény paraméterek szerinti deriváltjai:

$$\frac{\partial Q}{da_1} = -2\sum_{i=1}^{4}\left(y_i - a_1 - \exp(a_2 x_i)\right)$$

$$\frac{\partial Q}{da_2} = -2\sum_{i=1}^{4}\left(y_i - a_1 - \exp(a_2 x_i)\right) x_i \exp(a_2 x_i)$$

A két megoldandó nemlineáris egyenlet:

$$\sum_{i=1}^{4}\left(y_i - a_1 - \exp(a_2 x)\right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{4}\left(y_i - a_1 - \exp(a_2 x_i)\right) x_i \exp(a_2 x_i) = 0$$

Az egyenletek iteratív megoldása az a_1 = 1.066 és a_2 = 0.4125 eredményeket adta. Az illesztett paraméterekkel számított $\hat{\mathbf{y}}$ vektor: [2.2947 2.5762 2.9222 3.3475], a reziduálisok vektora: [0.8053 -0.4762 -0.0222 0.6525]. A reziduálisok négyzetösszege (Q) 1.3016. Feltéve, de meg nem engedve, hogy a paramétereket két értékpárból számították volna ki, természetesen teljesen eltérõ paraméterek adódtak volna. ●

A legkisebb négyzetek elvének alapján megfogalmazott (2.5) célfüggvény valamennyi y_i mért értéket egyenértékűként kezel. Ha kisérleti okokból egyes y_i értékek pontatlanabbak, vagy más, később tárgyalt okból nem egyenértékűek, a célfüggvényben az egyes reziduális különbségeket súlyozni lehet és a

$$Q = w\mathbf{d}^{\mathrm{T}} w\mathbf{d} = \sum_{i=1}^{n} w^2 d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} w^2 \left(y_i - f(\mathbf{x}_i \hat{\mathbf{a}})\right)^2 = \min \qquad (2.7)$$

követelményt célszerű használni. Szemben az eredeti, nem súlyozott legkisebb négyzetes célfüggvénnyel, utóbbi a *súlyozott legkisebb négyzetes eljárás* követelménye.

2.3 Lineáris modellek paraméterbecslése

Tekintsük azt az esetet, amelyben a vizsgált rendszert lineáris modell ír le:

$$f(\mathbf{X},\mathbf{a}) = \mathbf{X}.\mathbf{a} \qquad (2.8)$$

(Bár ezt a jelölésekben nem emeljük ki, emlékeztetünk arra, hogy **X** mátrix a független változók *függvényeit* is tartalmazhatja. Valójában *paramétereikben* lineáris modellek paraméterbecsléséről van szó).

Rendezzük az n kísérletben mért y_i értékeket n x 1 méretû **y** oszlopvektorba. Rendezzük a modell a_k paramétereit p x 1 méretû **a** oszlopvektorba. Az n kísérletben beállított x_j független változókat rendezzük mátrixba. Ha a modell az a_0 állandó paramétert ("tengelymetszetet") is tartalmazza, a mátrix elsõ oszlopa egy csupa egyest tartalmazó oszlop. Ezzel az n x p méretû **X** mátrix-szal a fentemlített többváltozós lineáris modell tehát:

$$\underset{\mathbf{n1}}{\mathbf{y}} = \underset{\mathbf{np}}{\mathbf{X}}\,\underset{\mathbf{p1}}{\mathbf{a}} \qquad (2.9)$$

vagy részletesebben:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ . \\ . \\ . \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\ x_{11} \ldots x_{1m} \\ . \\ . \\ . \\ 1\ x_{n1} \ldots x_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ . \\ a_p \end{bmatrix} \qquad (2.10)$$

Mint ismeretes, ez a túlhatározott egyenletrendszer általában inkonzisztens , ezért megoldására célszerűen a 2.2 pontban ismertetett módszer alkalmazható.

Minimáljuk

$$Q = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{d} = (\mathbf{Xa} - \mathbf{y})^{\mathbf{T}}(\mathbf{Xa} - \mathbf{y}) = \sum_i (\mathbf{x_i a} - y_i)^2 \qquad (2.11)$$

reziduális négyzetösszeget! A kifejezést kifejtve

$$\begin{aligned}
&\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{d} = \\
&= (\mathbf{Xa} - \mathbf{y})^{\mathrm{T}}(\mathbf{Xa} - \mathbf{y}) = \\
&= (\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}} - \mathbf{y}^{\mathrm{T}})(\mathbf{Xa} - \mathbf{y}) = \\
&= \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xa} - \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} - \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xa} + \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \\
&= \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xa} - 2\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xa} + \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}
\end{aligned} \qquad (2.12)$$

összefüggés adódik. Q minimuma annál az **a**-nál van, amelynél d($\mathbf{d}^{\mathbf{T}}\mathbf{d}$)/d**a** = 0.

$$\mathrm{d}(\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}) = \mathbf{da}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xa} + \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\,\mathbf{da} - 2\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\,\mathbf{da} = 2\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\,\mathbf{da} - 2\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\,\mathbf{da} = 0$$

Ez a követelmény tömören:

$$(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} - \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})\mathbf{da} = 0 \qquad (2.13)$$

ahonnan

$$\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} = \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} \qquad (2.15)$$

Ez az egyenlet transzponálás után

$$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Xa} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

alakú. Lévén $\mathbf{X^TX}$ nem szinguláris esetben invertálható, a keresett paramétervektor:

$$\mathbf{a} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \qquad (2.16)$$

Megjegyezhető, hogy ez a súlyozatlan legkisebb négyzetes megoldás úgy is megkapható, hogy az

Xa = y

egyenletet balról szorozzuk $\mathbf{X^T}$ transzponált mátrix-szal:

$\mathbf{X^TXa = X^Ty}$

majd az egyenletet a négyzetes $\mathbf{X^TX}$ inverzével szorozzuk:

$\mathbf{a = (X^TX)^{-1}X^Ty}$

<u>Példa</u>

Többváltozós lineáris paraméterbecslés

A vizsgált rendszer leírására az $y = a_0 + a_1 * x1 + a_2 * x2$ modellt választjuk.

4 kísérletben,

x1 = [1 2 3 4]^T és
x2 = [1 3 2 1]^T

beállított független változó értékeknél meghatároztuk az

y = [1.3 8.7 6.1 6.8]^T

mért értékeket.

A rendszert leíró érvényes egyenletrendszer:

$$\mathbf{X.a} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \\ 1 & 4 & 1 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} a_o \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.3 \\ 8.7 \\ 6.1 \\ 6.8 \end{bmatrix} = \mathbf{y}$$

az $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ mátrix:

4	10	7
10	30	17
7	17	15

$\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ mátrix inverze:

2.9815	-0.5741	-0.7407
-0.5741	0.2037	0.0370
-0.7407	0.0370	0.3704

Az $(\mathbf{X}^T*\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$ mátrix:

1.6667	-0.3889	-0.2222	-0.0556
-0.3333	-0.0556	0.1111	0.2778
-0.3333	0.4444	0.1111	-0.2222

Az $(\mathbf{X}^T*\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ előírással számított a paraméterek:

a_0 = -2.9500
a_1 = 1.6500
a_2 = 2.6000

A (2.16) szerint a becsült paraméterek:
$\hat{\mathbf{a}} = [-2.95 \quad 1.65 \quad 2.6]^T$,

a számított függõ változó vektor:
$\hat{\mathbf{y}}$ = [1.3 8.15 6,1 6.8].
A mért és számított független változók különbsége:

$\mathbf{d} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y} = [0 \quad 0.55 \quad -1.1 \quad 0.55]^T$

A reziduálisok négyzetösszege:

RSS = $\mathbf{d}^T\mathbf{d}$ = 1.815

A mért és számított *y* értékek átlagai

$$\bar{y} = \bar{\hat{y}} = 1.815$$

A modell okozta változások négyzetösszege:

$$\mathrm{MSS} = (\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}})^T (\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}) = 27.9125$$

A "teljes" négyzetösszeg

$$\mathrm{TSS} = (\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}})^T (\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}) = 29.7275$$

A modell okozta változások négyzetösszege MSS/RSS = 15.4-szer nagyobb, mint a véletlen hibáknak tulajdonítható valtozások négyzetösszege.

Néhány, a példában elõforduló mátrix:

$$\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 4 & 10 & 7 \\ 10 & 30 & 17 \\ 7 & 17 & 15 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{HAT} = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

•

A becsült paraméterekkel *számított y* értékek (3.7) és (3.1) egyenletekbõl:

$$\underset{n1}{\hat{\mathbf{y}}} = \underset{np}{\mathbf{X}}\underset{p1}{\hat{\mathbf{a}}} = \underset{np}{\mathbf{X}}\left(\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\underset{np}{\mathbf{X}}\right)^{-1}\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\underset{n1}{\mathbf{y}} \tag{3.8}$$

Nevezetes az ebben az egyenletben szereplõ *n* x *n* méretû

$$\underset{nn}{\mathbf{H}} = \underset{np}{\mathbf{X}}\left(\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\underset{np}{\mathbf{X}}\right)^{-1}\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}} \tag{3.9}$$

"*hat matrix*"-nak nevezett szinguláris mátrix, amely szimmetrikus és idempotens (négyzete önmaga).

A mért és számított *y* értékek különbségének, a reziduálisoknak vektora:

$$\underset{n1}{\mathbf{d}} = \underset{n1}{\mathbf{y}} - \underset{n1}{\hat{\mathbf{y}}} = \underset{n1}{\mathbf{y}} - \underset{np}{\mathbf{X}}\left(\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\underset{np}{\mathbf{X}}\right)^{-1}\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\underset{n1}{\mathbf{y}} = \left(\underset{nn}{\mathbf{I}} - \underset{np}{\mathbf{X}}\left(\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\underset{np}{\mathbf{X}}\right)^{-1}\underset{pn}{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}}\right)\underset{n1}{\mathbf{y}} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y}$$

(3.10)

3.5 A legkisebb négyzetek elve

Inkonzisztens egyenletrendszert több módon is konzisztenssé lehet tenni. Fölvetõdik a kérdés, miért éppen a (3.6) egyenletre vezetõ eljárást választották erre a célra? Más szavakkal az a kérdés. milyen tulajdonságú megoldást ad ez az egyenletrendszer?

Ez a megoldás egyezik a (3.7) összefüggéssel.

Meg kell jegyezni, hogy a (3.7) ill. (3.13) becslés akkor torzítatlan, ha fennáll az a körülmény, hogy az **y** vektor elemei, az y_i mért értékek függetlenek és megegyezõ szórásúak. Az általánosabb esetekre a késõbbiekben még visszatérünk.