

Pienimmän Neliösumman Sovitus (PNS)

- ▶ n = Havaintojen **määrä**
- ▶ x_i = Havaintojen **ajat/paikat**/... ($i = 1, \dots, n$)
- ▶ $y_i = y(x_i)$ = Havaintojen **arvot** ($i = 1, \dots, n$)
- ▶ σ_i = Havaintojen **tarkkuus** ($i = 1, \dots, n$)
- ▶ $w_i = \sigma_i^{-2}$ = Havaintojen **painot** ($i = 1, \dots, n$)
- ▶ **Malli** havainnoille $\bar{y} \pm \bar{\sigma}$ on

$$g(\bar{\beta}) = g(x, \bar{\beta})$$

- ▶ $\bar{\beta} = [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_Q] =$ Mallin **vapaat parametrit**, joita on Q kappaletta
- ▶ $\epsilon_i = y_i - g(x_i, \bar{\beta}) =$ **Residuaalit** = Havainnot miinus malli
- ▶ PNS etsii parhaat $\bar{\beta}$ arvot $\beta_1, \dots, \beta_Q$, jotka **minimoivat**

$$\chi^2(\bar{\beta}) = \sum_{i=1}^n w_i \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\epsilon_i}{\sigma_i} \right]^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - g(x_i, \bar{\beta})}{\sigma_i} \right]^2.$$

- ▶ Summattu residuaalit jaettuina virheillessään korotettuna toiseen potenssiin. Siitä nimi PNS.
- ▶ Hyvässä mallissa $\chi^2 \approx n$. **Miksi?** Hyvässä mallissa $n > Q$. **Miksi?**

Malleista kuva: @www.edupristine.com

- ▶ Malli $\bar{g}$ on **lineaarinen**, jos sen kaikki osoittaisderivaatat $\partial g / \partial \beta_i$ ovat riippumattomia kaikista vapaista parametreista β_j . Jos näin ei ole, malli on **epälineaarinen**.

- ▶ **Esimerkki: lineaarinen** malli

$$g(\bar{\beta}, x) = M + A \sin x + B \cos x,$$

$$\bar{\beta} = [M, A, B] \text{ eli } Q = 3$$

$$\partial g / \partial M = 1,$$

$$\partial g / \partial A = \sin x,$$

$$\partial g / \partial B = \cos x$$

- ▶ **Esimerkki: epälineaarinen** malli

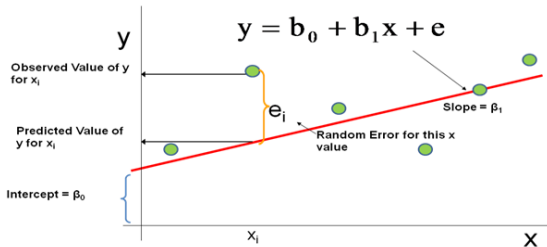
$$g = Ae^{Bx},$$

$$\bar{\beta} = [A, B] \text{ eli } Q = 2$$

$$\partial g / \partial A = e^{Bx},$$

$$\partial g / \partial B = AB e^{Bx}$$

- ▶ **Lineaarisilla** malleilla PNS antaa $\bar{\beta}$:lle yksikäsitteisen ratkaisun $\bar{\beta}_1$.
- ▶ **Epälineaarisilla** malleilla $\bar{\beta}$:n ratkaisu $\bar{\beta}_1$ riippuu siitä, mikä annetaan (etsitään tavalla tai toisella) ratkaisun **alkuarvoksi** $\bar{\beta}_0$.



python

python: PNS

- Data: **OPpns1.dat** ($n = 3$)

```
1 2.42
2 5.47
3 7.24

#
# Kommenttirivi: Python ohjelmani Ppns1.py
# - Pienimman neliosuman sovitus
#
import os ; os.system('clear') # Tyhjennetaan
import numpy as np ; import pylab as pl # Importoidaan
import scipy ; from scipy import optimize # Miksi outoa?
#
def residuals(beta,y,x):
    epsilon= y-(beta[0]+beta[1]*x)
    return epsilon
#
file='OPpns1.dat' #Data
x=np.loadtxt(file,skiprows=0,usecols=(0,)) #Data
y=np.loadtxt(file,skiprows=0,usecols=(1,)) #Data
beta0=np.ones(2) ; print('beta0=',beta0) # Alkuarvo
tu=optimize.leastsq(residuals,beta0,args=(y,x))
beta1=tu[0] ; print('beta1=',beta1) # Loppuarvo
pl.xlim([0,4]) ; pl.ylim([0,9]) # xy rajat
pl.plot(x,y,'or') # Data plot
xx=0.5+np.arange(21)/20.*3 # Mallin xx
g =beta1[0]+beta1[1]*xx ; pl.plot(xx,g) # Malli g(xx)
pl.savefig('Ppns1.jpg') ; pl.show() # Kuva&Nayta
```

- Tulostaa

```
beta0= [ 1.  1.]
beta1= [ 0.22333333  2.41      ]
```

python: PNS

$$\bar{x} = [x_1, x_2, x_3] = \mathbf{x} = \text{Data}$$

$$\bar{y} = [y_1, y_2, y_3] = \mathbf{y} = \text{Data}$$

$$\bar{g} = g(x, \bar{\beta}) = a + bx = \mathbf{g} = \text{Malli}$$

$$\bar{\beta} = [a, b] = \text{Vapaat parametrit}$$

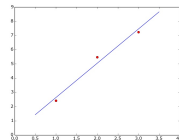
$$\bar{\epsilon} = \bar{y} - \bar{g} = \text{epsilon} = \text{Residuaalit}$$

- **optimize.leastsq** tarvitsee aliohjelman **residuals**

$$\bar{\beta}_0 = \text{beta0} = \text{sovituksen alkuarvo}$$

$$\bar{\beta}_1 = \text{beta1} = \text{sovituksen loppuarvo}$$

Lineaarinen $\Rightarrow$ loppuarvo **beta1** ei riipu alkuarvosta **beta0**



python

octave: PNS

- Data: **OPpns1.dat** ($n = 3$)

```
1 2.42
2 5.47
3 7.24

# _____
# Kommenttirivi: Octave ohjelmani Opns1.m
# - Pienimman neliosumman sovitus
# _____
clear ; clc      # Poistetaan ... Tyhjennetaan ...
# _____
function y=ffun(x,beta) ; #
y=beta(1)+beta(2)*x      ; # Ilman ";" tulostaa!
endfunction              ; #
# _____
pkg load optim          ; # Added spring 2017
# _____
filename='OPpns1.dat'; fid=fopen(filename,'r'); # Data
[z]=fscanf(fid,'%g%g',[2,Inf]);                # "-"
x=z(1,:); y=z(2,:);                             # "-"
beta0=[1 1]; printf("beta0=%6.2f%6.2f\n",beta0) # Alkuarvo
[yfit beta1] = leasqr(x,y,beta0,"ffun");        # PNS
printf("beta1=%6.2f%6.2f\n",beta1)              # Loppuarvo
axis([0,4,0,9]);                                # xy rajat
hold on; plot(x,y,'or'); xx=0.5+((0:21)/20.)*3; # Mallin xx
g =beta1(1)+beta1(2)*xx; plot(xx,g);            # Malli g(xx)
hold off; print('Opns1.jpg','-djpg')             # Kuva
```

- Tulostaa

```
beta0= 1.00 1.00
beta1= 0.22 2.41
```

- Sovitus ilman "painoja". Paljon vaihtoehtoja | www |

octave: PNS

$$\bar{x} = [x_1, x_2, x_3] = \mathbf{x} = \text{Data}$$

$$\bar{y} = [y_1, y_2, y_3] = \mathbf{y} = \text{Data}$$

$$\bar{g} = g(x, \bar{\beta}) = a + bx = \mathbf{g} = \text{Malli}$$

$$\bar{\beta} = [a, b] = \text{Vapaat parametrit}$$

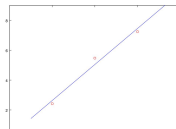
$$\bar{\epsilon} = \bar{y} - \bar{g} = \text{epsilon} = \text{Residuaalit}$$

- **leasqr** tarvitsee aliohjelman **function** tunnuksella "**ffun**"

$$\bar{\beta}_0 = \text{beta0} = \text{sovituksen alkuarvo}$$

$$\bar{\beta}_1 = \text{beta1} = \text{sovituksen loppuarvo}$$

Lineaarinen $\Rightarrow$ loppuarvo **beta1** ei riipu alkuarvosta **beta0**



python: PNS

- ▶ Toinen näyttö: kotisivun `Ppns2.py`
- ▶ Loopin `for i in range(4):` sisällä
- ▶ Plotattavat käyrät `yy` ja `gg`

`xx` = $0 \leq xx_1, \dots, xx_{101} \leq 2\pi$ = tiheä tasavälinen plottien argumentti

`yy` = $g(xx, \bar{\beta}_1)$ sovitetty käyrä

Kuvat: `yy` = punainen viiva

`gg` = $g(xx, \bar{\beta}_{SIM})$ simulointimallin käyrä

Kuvat: `gg` = sininen viiva

- ▶ Varsinaiset plotit

`pl.axes([z1[i], z2[i], lev, kor])` = plottien paikat

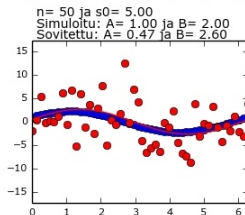
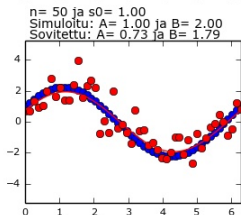
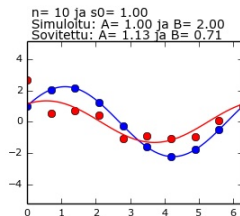
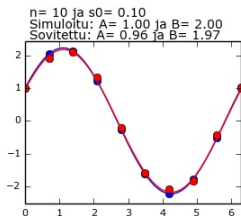
`pl.xlim([x1, x2])` = x-rajat

`pl.ylim([y1, y2])` = y-rajat

python: PNS

- ▶ Loopin `for i in range(4):` sisällä
`pl.plot(x0, g0, 'ob')` = siniset ympyrät
`pl.plot(xx, gg, 'b')` = sin... jatkuva viiva
`pl.plot(x0, y0, 'or')` = punaiset ympyrät
`pl.plot(xx, yy, 'r')` = pun... jatkuva viiva
`txt1='...'` = formatoitu stringi
`pl.text(x1...)` = stringin tulostus kuvaan
- ▶ Loopin `for i in range(4):` jälkeen
`pl.savefig('Ppns2.jpg')` = kuvan tallennus `jpg` muodossa
- ▶ Vain `n0=n[i]`, `s0=s[i]` ja plotin paikka `pl.axes([z1[i], z2[i]...)` muuttuvat loopin sisällä
- ▶ Kuva `Ppns2.jpg` seuraavalla sivulla

PNS kuva: Ppns2.jpg



octave: PNS

- ▶ Toinen näyttö: kotisivun `Opns2.m`
- ▶ Loopin `for i=1:4` sisällä
- ▶ Plotattavat käyrät `yy` ja `gg`
 $xx = 0 \leq xx_1, \dots, xx_{100} \leq 2\pi =$ tiheä tasavälinen plottien argumentti
 $yy = g(xx, \bar{\beta}_1)$ sovitetty käyrä
 Kuvat: `yy` = punainen viiva
 $gg = g(xx, \bar{\beta}_{SIM})$ simulointimallin käyrä
 Kuvat: `gg` = sininen viiva
- ▶ Varsinaiset plotit
`subplot(8,8,[z1(i),z2(i)])` = plottien paikat
`axis([x1,x2,y1,y2])` = xy-rajat
`set(gca,'fontsize',5)` = xy-akselien numeroiden koko

octave: PNS

- ▶ Loopin `for i=1:4` sisällä
`hold on` ja `hold off` pari
`plot(x0,g0,'ob','markersize',3)`
 = siniset ympyrät
`plot(xx,gg,'b')` = sin... jatkuva viiva
`plot(x0,y0,'or','markersize',3)`
 = punaiset ympyrät
`plot(xx,yy,'r')` = pun... jatkuva viiva
`txt1=sprintf ...` = formatoitu stringi
`text(x1+ ...)` = stringin tulostus kuvaan
- ▶ Loopin `for i=1:4` jälkeen
`print('Opns2.jpg','-djpg')` = kuvan tallennus pdf muodossa
- ▶ Vain `n0=n(i)`, `s0=s(i)` ja plotin paikka
`subplot(8,8,[z1(i),z2(i)])`
 muuttuvat loopin sisällä

python & octave & PNS

PNS kuva: Opns2.jpg

- ▶ Mitä opittiin?

- ▶ $n = 10, \sigma = 0.1$

Vähän tarkkaa dataa

PNS tulos OK

- ▶ $n = 10, \sigma = 1.0$

Vähän epätarkkaa dataa

PNS tulos “sinne päin”

- ▶ $n = 50, \sigma = 1.0$

Paljon epätarkkaa dataa

PNS tulos OK

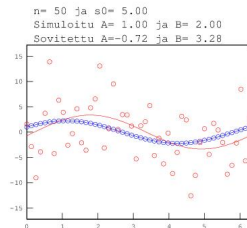
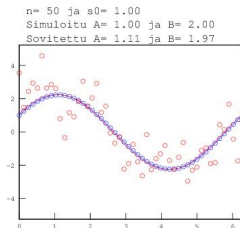
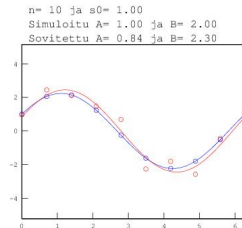
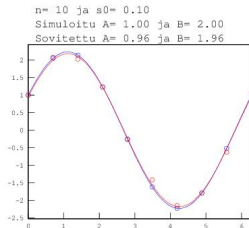
- ▶ $n = 50, \sigma = 5.0$

Paljon huonoa dataa

PNS tulos “sinne päin”

- ▶ Sovita väärä malli tähän dataan (esim. suora)

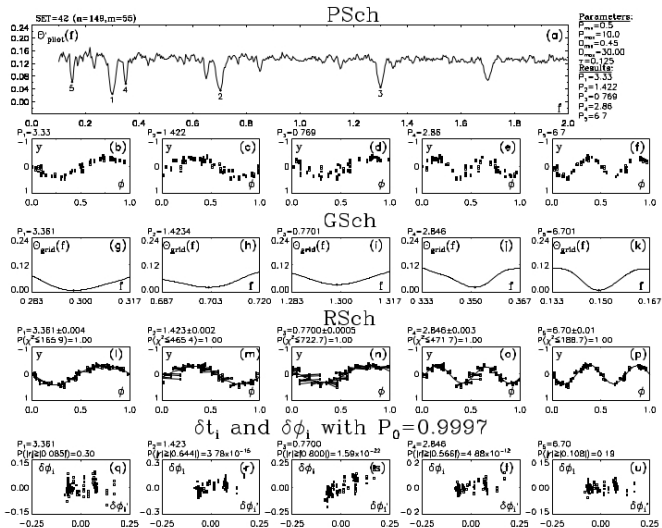
⇒ “Musta laatikko”



Epälineaarista malleista

PNS

- ▶ Epälineaariset mallit
Jetsu & Pelt (1999)
A&AS 139, 629
“TSPA”=
Three Stage
Period Analysis
- ▶ Samalle datalle monta sopivaa mallia
- ▶ Mikä niistä on oikea?



Sinikäyrän sovitus

Sinikäyrän sovitus

- ▶ **Harjoitustyö: Vaiheet** frekvenssillä f_{best}

$$\phi_i = \text{FRAC}[(t_i - t_0)f_{\text{best}}],$$

missä $t_0 = 0$ ja $\text{FRAC}[x]$ poistaa argumentin x kokonaislukuosan

Esim: $\text{FRAC}[98.76] = 0.76$

Poistaa kokonaiset kierrokset
⇒ Kaikki kierrokset päällekkäin

- ▶ Havainnot vaiheen funktiona oikealla
- ▶ Sovitetaan malli

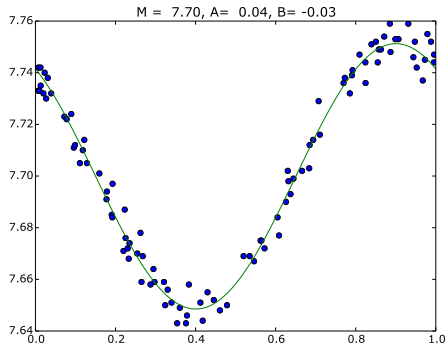
$$g(t, \bar{\beta}) = M + A \cos(2\pi\phi_i) + B \sin(2\pi\phi_i),$$

missä vapaat parametrit ovat $\bar{\beta} = [M, A, B]$.

- ▶ Parhaan pienimmän neliösumman mallin M , A ja B arvot annetaan oikealla

Sinikäyrän sovitus

- ▶ **python** ja **octave** eivät välttämättä anna täsmälleen samoja arvoja. **Miksi?**



Malleista

Malleista (Kuva: @tamino.wordpress.com)

► Epälineaarinen malli

$$g(t, \bar{\beta}) = M + A \cos(2\pi ft) + B \sin(2\pi ft),$$

missä $\bar{\beta} = [M, A, B, f]$, koska
esimerkiksi $\partial g / \partial A = \cos(2\pi ft)$

- Sovituksen lopputulos $\bar{\beta}_1$ riippuu vahvasti alkuoletuksesta $\bar{\beta}_0$
- Ratkaistaan paras f_{best} tehospektrillä
- $2\pi f_{\text{best}} = \text{vakio} \Rightarrow$ Lineaarinen malli

$$g(t, \bar{\beta}) = M + A \cos(2\pi f_{\text{best}} t) + B \sin(2\pi f_{\text{best}} t),$$

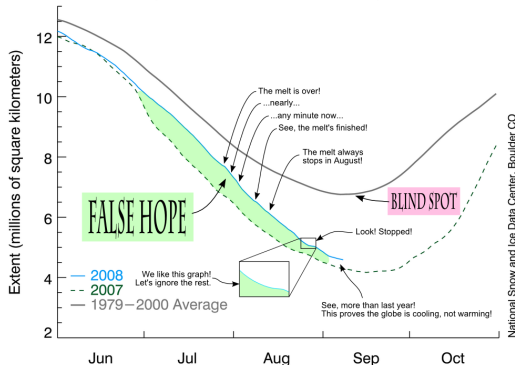
missä $\bar{\beta} = [M, A, B] \Rightarrow \bar{\beta}_0$ ei vaikuta lopputulokseen $\bar{\beta}_1 = [M_1, A_1, B_1]$

- Jetsu & Pelt (1999, A&AS 139, 629): Käytetään lopuksi epälineaarisen mallin alkuarvona $\bar{\beta}_0 = [M_1, A_1, B_1, f_{\text{best}}]$

Malleista

► Mallien tulkinta on “taidela”

A Denier's Guide to the 2008 Melt
Arctic Sea Ice Extent
(Area of ocean with at least 15% sea ice)



Malleista

Malleista

► **Yleisesti:** $g(t, \vec{\beta}) = \sum_{k=0}^K B_k \cos(2\pi kft) + C_k \sin(2\pi kft)$,
missä $\vec{\beta} = [B_0, \dots, B_K, C_1, \dots, C_K, f]$ (**Huom:** C_0 tarpeeton)

► Tehospektri olettaa
sinikäyrän oikeaksi
malliksi ($K = 1$)

► **Todellisuus**

– K on tuntematon

– Samassa datassa saattaa
vaihdella $K = 0, 1, 2, 3, \dots$?

– $K = 0 \equiv$ Ei periodisuutta

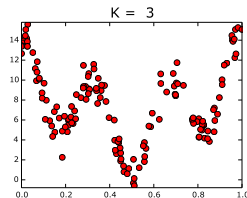
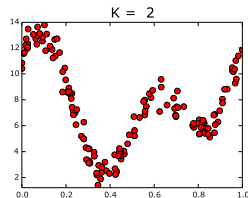
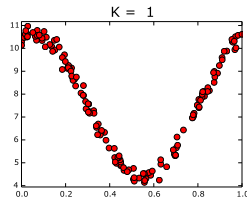
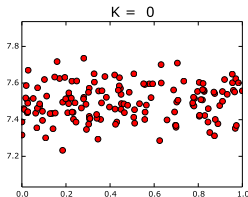
– $K = 1 \equiv$ 1 huippu

– $K = 2 \equiv$ 1 tai 2 huippua

– $K = 3 \equiv$ 1, 2 tai 3 huippua

– Paras K arvo mallille
voidaan myös ratkaista

Esim: Lehtinen et al.
(2011: A&A, 527, A136)



Malleista

- ▶ Signaali kohinan seasta (Kajatkari et al. 2015, A&A)
- ▶ Välillä periodisuutta, välillä ei

