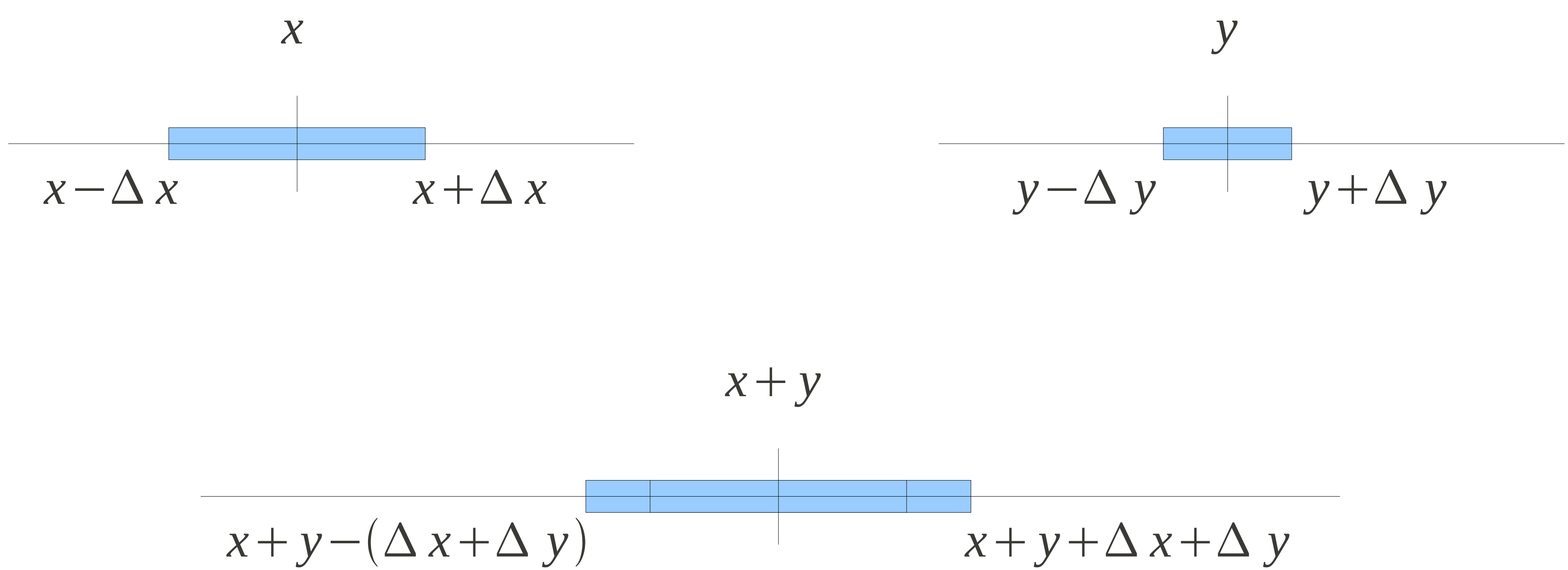
Bioinformatika III

Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

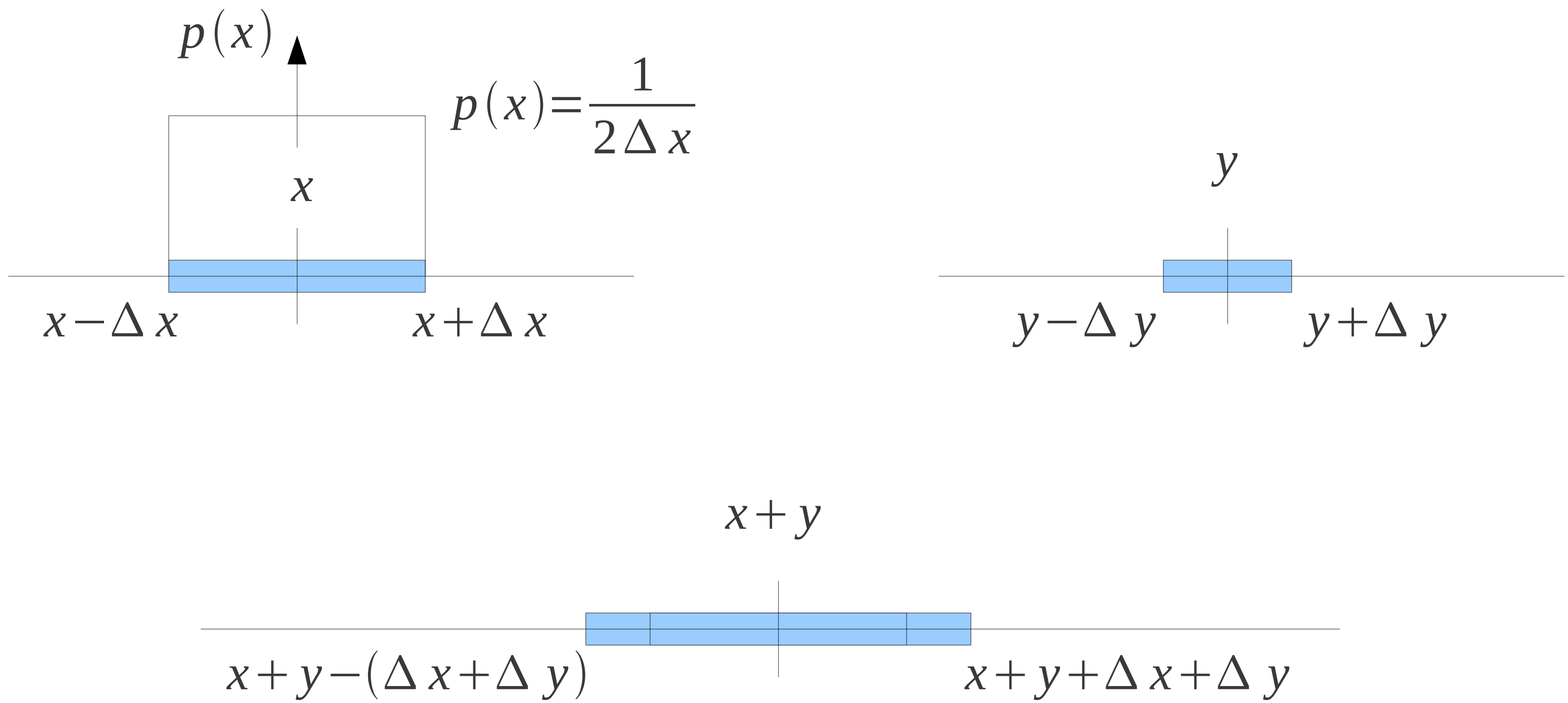
Paskaita 11
paklaidų skaičiavimas ir jų atvaizdavimas CIF failuose

Saulius Gražulis
2011 m.

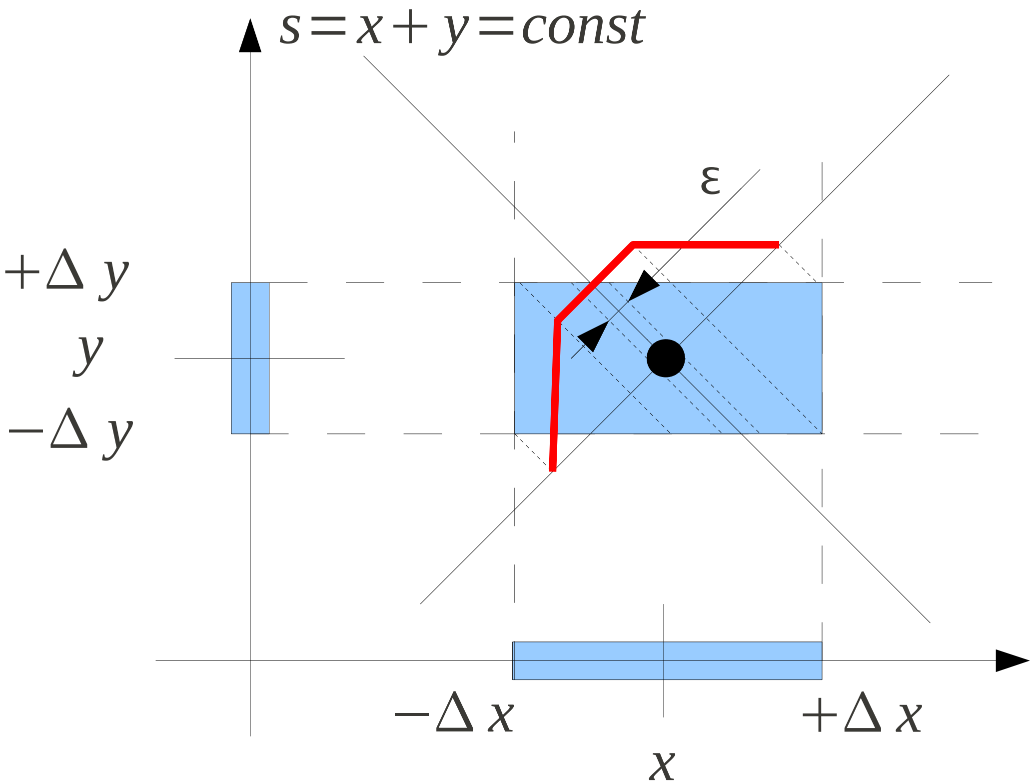
„Naivi“ paklaidų sudėtis

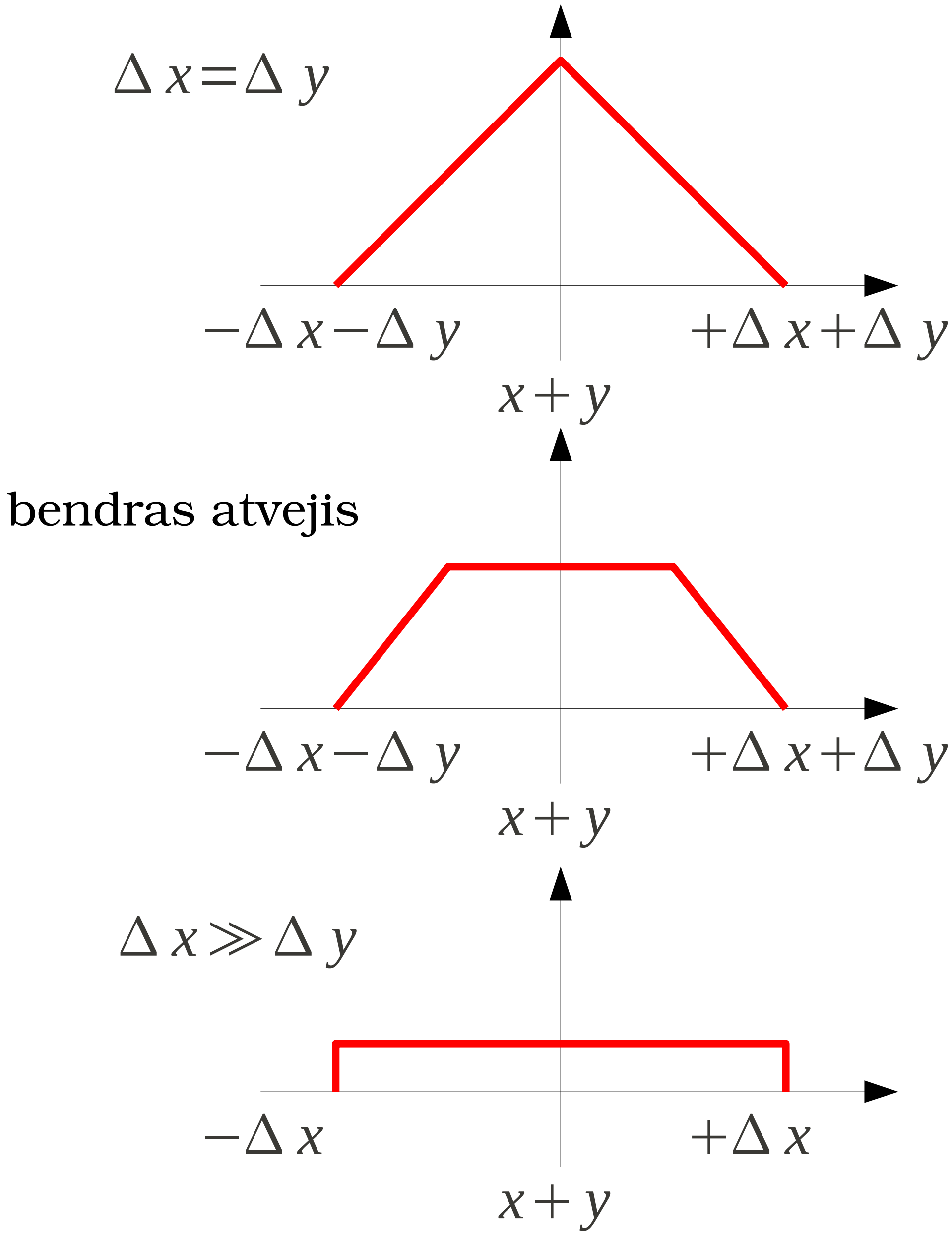


Paklaidų sudėtis įvertinant dydžio tikimybės tankį

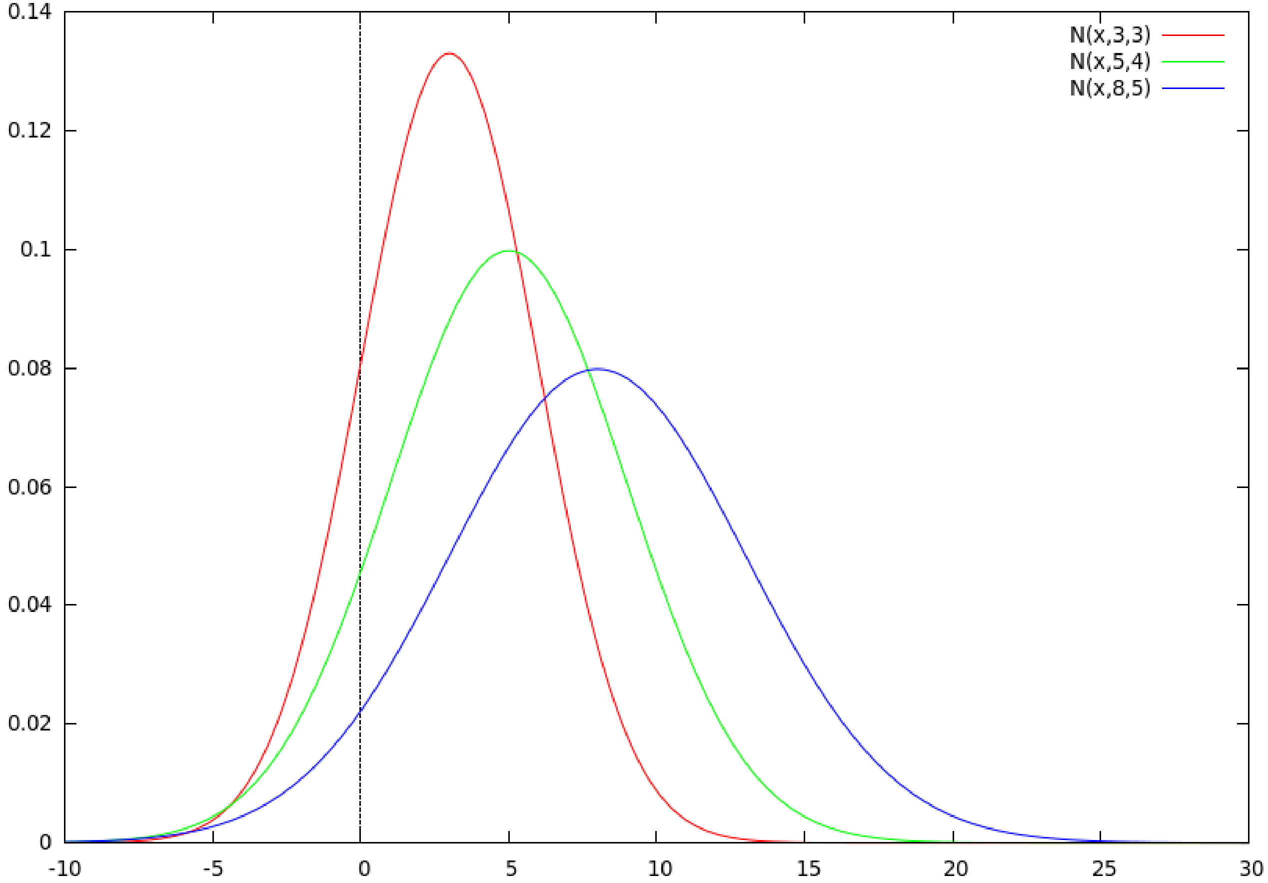


Sumos tikimybės tankis





Normaliai pasiskirsčiusių dydžių suma



$$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}}e^{-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma_x^2}}$$

$$p(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}}e^{-\frac{(x-m_y)^2}{2\sigma_y^2}}$$

x ir y statistiškai nepriklausomi

$$m_{x+y}=m_x+m_y$$

$$\sigma_{x+y}^2=\sigma_x^2+\sigma_y^2$$

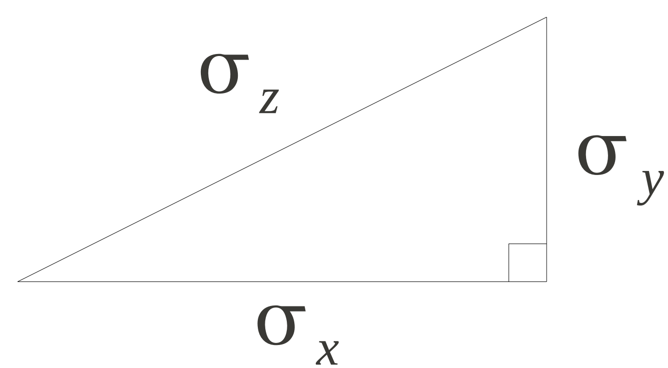
$$p(x+y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_x^2+\sigma_y^2)}}e^{-\frac{(x-(m_x+m_y))^2}{2(\sigma_x^2+\sigma_y^2)}}$$

Aritmetinių operacijų paklaida

Statistiškai nepriklausomiems dydžiams x ir y:

$$z = x \pm y \qquad \sigma_z^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$$

$$z = x\,y$$
$$z = x / y$$
$$\left(\frac{\sigma_z}{z}\right)^2 = \left(\frac{\sigma_x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_y}{y}\right)^2$$



Bet kokios funkcijos paklaida

$$z = f(x, y)$$

$$\Delta z = \frac{\partial f}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial f}{\partial y}\Delta y + O(\Delta x^2 + \Delta y^2)$$

$$\sigma_z = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\sigma_x\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\sigma_y\right)^2}$$

J. R. Taylor *An Introduction to error analysis, 1982, University Science Books, Mill Valley, California*

Дж. Тейлор, Введение в теорию ошибок, Москва, „Мир“, 1985

Tikslaus ir netikslaus dydžio rezultatas

$$z = x \pm y \qquad \sigma_z^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$$

$$\sigma_y \to 0 \;\Rightarrow\; \sigma_z \to \sigma_x$$

$$z = x \pm a \qquad \sigma_z = \sigma_x$$

$$z = k\,x \qquad \sigma_z = k\,\sigma_x$$

Atvirkštinis paklaidos skaičiavimo uždavinys

$$z = x + y \qquad \sigma_z^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$$

Duota: z, y ir jų paklaidos; **žinome**, ***kad z gautas sudėjus nepriklausomus x ir y***
Rasti y ir jo paklaidą.

$$y = z - x \qquad \sigma_y^2 = \sigma_z^2 - \sigma_x^2$$

Duota: z, y ir jų paklaidos; **žinome**, ***kad z ir x statistiškai nepriklausomi***
Rasti y ir jo paklaidą.

$$y = z - x \qquad \sigma_y^2 = \sigma_z^2 + \sigma_x^2$$

Koreliuotų dydžių paklaida

$$z = x + y \qquad \sigma_z^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$$

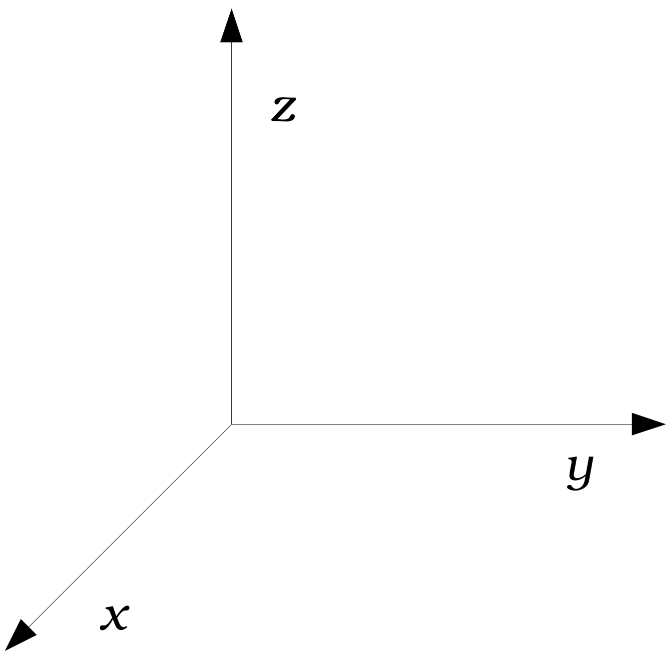
$$x = y = a \qquad \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_a^2$$

1) $z = x + y = a + a = 2a$ $\qquad \sigma_z = \sqrt{\sigma_a^2 + \sigma_a^2} = \sigma_a \sqrt{2}$

2) $z = x + y = a + a = 2a$ $\qquad \sigma_z = 2a\sqrt{\left(\frac{\sigma_2}{2}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_a}{a}\right)^2} = 2\sigma_a$

= 0 :)

Koord. paklaidos stačiakampėse gardelėse

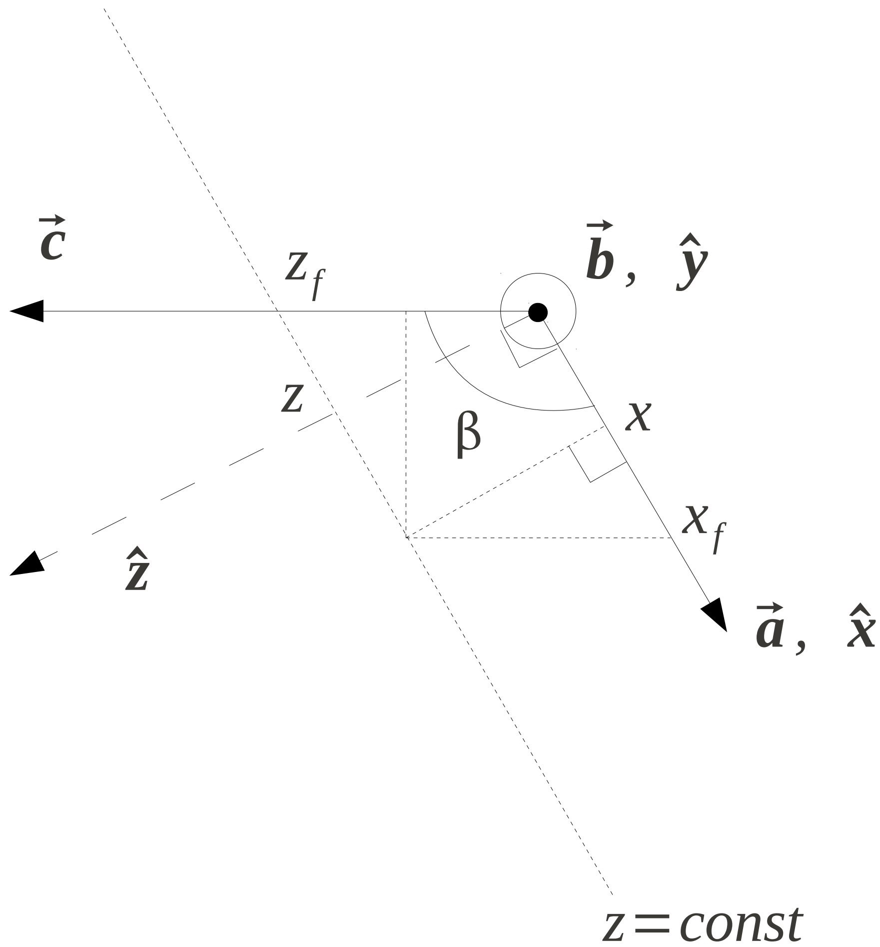


$$x_f = x / |\vec{a}|$$

$$\sigma_{x_f} = \sigma_x / |\vec{a}|$$

Analogiškai skaičiuojamos y_f, z_f paklaidos

Koordinačių paklaidos monoklininėje gardelėje



$$y_f = y / b$$
$$\sigma_{y_f} = \sigma_y / |\vec{b}|$$

$$z_f = z / (c \cos(\beta - 90^o)) = z / (c \sin(\beta))$$
$$\sigma_{z_f} = \sigma_z / (c \sin(\beta))$$

Filosofinė mokslo nuostata?

- Demarkacijos kriterijus:
  - Mokslinis metodas pripažįsta, kad mūsų žinios nepilnos ir netobulos, o rezultatai turi paklaidas;
  - Mūsų žinių ribų kiekybinis įvertinimas yra svarbus ir neatsiejamas mokslo uždavinys.