Metoda nejmenších čtverců

Základy vyšší matematiky

LDF MENDELU

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Podpořeno projektem Průřezová inovace studijních programů Lesnické a dřevařské fakulty MENDELU v Brně (LDF) s ohledem na disciplíny společného základu http://akademie.ldf.mendelu.cz/cz (reg. č. CZ.1.07/2.2.00/28.0021) za přispění finančních prostředků EU a státního rozpočtu České republiky.

Formulace obecného problému

Předpokládejme, že je dán soubor n bodů $[x_1, y_1], [x_2, y_2], \ldots, [x_n, y_n]$.

- Tyto body mohou být získany například jako výsledek měření veličin x a y. (Pro hodnoty $x_1, x_2, \ldots$ veličiny x byly naměřeny odpovídající hodnoty $y_1, y_2, \ldots$ veličiny y.)
- Předpokládáme přitom, že mezi veličinami x a y existuje vzájemný vztah, tj. existuje funkce f taková, že $y = f(x)$.
- Je zřejmé, že naměřené hodnoty jsou zatíženy chybami měření, takže pro všechny naměřené hodnoty nebude platit $y_i = f(x_i)$ $(i = 1, \ldots, n)$.

Úkol: Aproximovat (vyrovnat) daný soubor bodů vhodnou funkcí, tj. najít tzv. aproximační funkci f, jejíž graf prochází "co nejblíže" daných bodů (naměřených hodnot).

Při metodě nejmenších čtverců se požaduje, aby součet čtverců (druhých mocnin) rozdílů naměřených hodnot y_i a hodnot funkce $f(x_i)$ byl co nejmenší. Problém lze formulovat takto:

$$\sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 \to \min,$$

přičemž funkce $y = f(x)$ je funkce s neznámými koeficienty a její tvar závisí na vztahu mezi x a y. Tento vztah je znám z teorie nebo jej odhadneme z naměřených hodnot.

Nalezená funkce f může být poté využita k dalšímu studiu vztahu mezi x a y a k predikci budoucího vývoje tohoto vztahu.

Lineární aproximace

Předpokládejme, že mezi veličinami x a y je lineární vztah. Funkci f lze tedy psát ve tvaru

$$y = ax + b.$$

K nalezení koeficientů a, b je potřeba vyřešit extremální úlohu:

$$Z(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2 \to \min .$$

S využitím diferenciálního počtu funkcí dvou proměnných lze tuto úlohu převést na úlohu najít řešení následující soustavy:

$$\begin{aligned} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn &= \sum_{i=1}^{n} y_i. \end{aligned}$$

Příklad

Pomocí metody nejmenších čtverců najděte přímku, která aproximuje soubor bodů: $[1,1],[2,3],[3,2],[4,3],[5,7]$.

Příklad

Pomocí metody nejmenších čtverců najděte přímku, která aproximuje soubor bodů: $[1,1],[2,3],[3,2],[4,3],[5,7]$.

Koeficienty přímky a, b najdeme řešením soustavy

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$
$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum_{i=1}^{n} y_i,$$

kde $n=5$ je počet bodů.

Příklad

Pomocí metody nejmenších čtverců najděte přímku, která aproximuje soubor bodů: $[1,1],[2,3],[3,2],[4,3],[5,7]$.

Koeficienty přímky a, b najdeme řešením soustavy

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum_{i=1}^{n} y_i,$$

kde $n=5$ je počet bodů.

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	1	1	1	1
2	2	3	4	6
3	3	2	9	6
4	4	3	16	12
5	5	7	25	35
$\sum_{i=1}^{5}$	15	16	55	60

Příklad

Pomocí metody nejmenších čtverců najděte přímku, která aproximuje soubor bodů: $[1,1], [2,3], [3,2], [4,3], [5,7]$.

Koeficienty přímky a, b najdeme řešením soustavy

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum_{i=1}^{n} y_i,$$

kde $n = 5$ je počet bodů.

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	1	1	1	1
2	2	3	4	6
3	3	2	9	6
4	4	3	16	12
5	5	7	25	35
$\sum_{i=1}^{5}$	15	16	55	60

Máme tedy vyřešit soustavu:

$$\begin{aligned} 55a + 15b &= 60 \\ 15a + 5b &= 16 \end{aligned}$$

Příklad

Pomocí metody nejmenších čtverců najděte přímku, která aproximuje soubor bodů: $[1,1],[2,3],[3,2],[4,3],[5,7]$.

Koeficienty přímky a, b najdeme řešením soustavy

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$
$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum_{i=1}^{n} y_i,$$

kde $n = 5$ je počet bodů.

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	1	1	1	1
2	2	3	4	6
3	3	2	9	6
4	4	3	16	12
5	5	7	25	35
$\sum_{i=1}^{5}$	15	16	55	60

Máme tedy vyřešit soustavu:

$$\begin{aligned} 55a + 15b &= 60 \\ 15a + 5b &= 16 \end{aligned}$$

Řešením dostaneme $a = \frac{6}{5}$, $b = -\frac{2}{5}$. Přímka má tedy rovnici $\boxed{y = \frac{6}{5}x - \frac{2}{5}}$.

Příklad (pokračování)