evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Metoda nejmenších čtverců

Základy vyšší matematiky

LDF MENDELU

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.

Simona Fišnarová

Brno 2012

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:

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

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: $[1,1], [2,3], [3,2], [4,3], [5,7]$.

Koeficienty přímky a, b najdeme řešením soustavy

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

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)