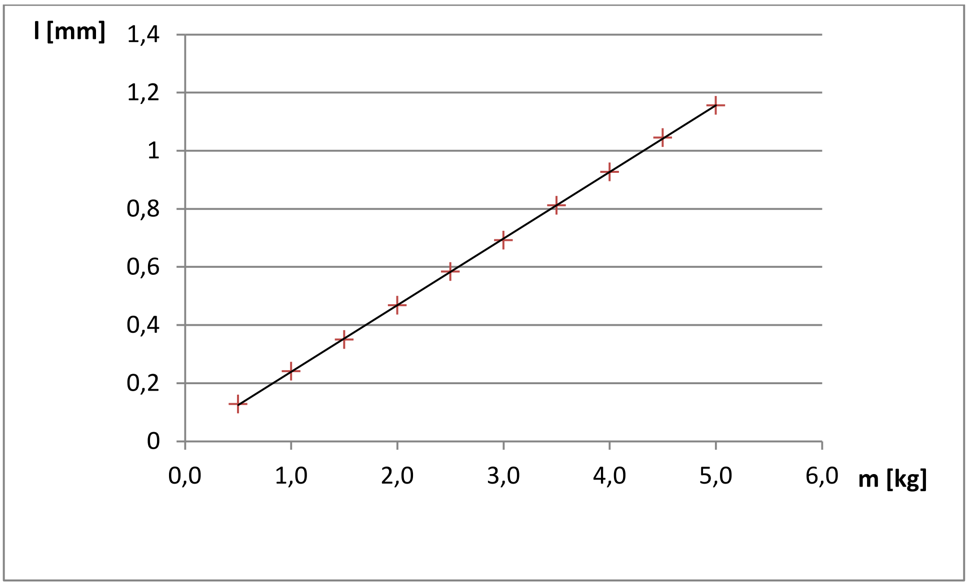
Josef Čížek

Metoda nejmenších čtverců

Pro vysvětlení problematiky metody nejmenších čtverců mějme tento příklad. Pomocí experimentu byla zjištěna změna délky drátu v závislosti na zatížení a hodnoty zaneseny do následující tabulky (viz Fyzikální praktikum I, Prof. RNDr. Tomáš Ficker, DrSc., str.18).

i	m [kg]	l [mm]	m^2 [kg^2]	m*l [kg*mm]
1	0,5	0,128	0,25	0,0640
2	1,0	0,241	1,00	0,2410
3	1,5	0,350	2,25	0,5250
4	2,0	0,468	4,00	0,9360
5	2,5	0,584	6,25	1,4600
6	3,0	0,692	9,00	2,0760
7	3,5	0,812	12,25	2,8420
8	4,0	0,927	16,00	3,7080
9	4,5	1,045	20,25	4,7025
10	5,0	1,156	25,00	5,7800
$\sum$	27,5	6,403	96,25	22,3345

Graf závislosti délky na hmotnosti



Fyzikální praktikum – řešení:

Pro výpočet parametrů a, b v rovnici $l = a * m + b$ budeme potřebovat následující sumace $\sum_{i=1}^{n} m_i, \sum_{i=1}^{n} l_i, \sum_{i=1}^{n} m_i^2, \sum_{i=1}^{n} m_i l_i$ a rovnice $a = \frac{10*\sum_{i=1}^{n} m_i l_i - \sum_{i=1}^{n} m_i * \sum_{i=1}^{n} l_i}{10*\sum_{i=1}^{n} m_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} m_i\right)^2}$,

$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} m_i^2 * \sum_{i=1}^{n} l_i - \sum_{i=1}^{n} m_i * \sum_{i=1}^{n} m_i l_i}{10*\sum_{i=1}^{n} m_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} m_i\right)^2}$

Nyní do obou rovnic dosadíme a vypočítáme hodnoty parametrů a a b.

$$a = \frac{10 * 22{,}3345 - 27{,}5 * 6{,}403}{10 * 96{,}25 - (27{,}5)^2} = 0{,}2291[mm/kg]$$

$$b = \frac{96{,}25 * 6{,}403 - 27{,}5 * 22{,}3345}{10 * 96{,}25 - (27{,}5)^2} = 0{,}0101[mm]$$

Dostaneme tedy rovnici výše vykreslené proložené přímky grafem naměřených hodnot.

$$l = 0{,}2291 * m + 0{,}0101$$

Nyní však tento příklad řešme jako přeurčenou soustavu lineárních algebraických rovnic metodou nejmenších čtverců. Tedy jako deset rovnic o dvou neznámých.

Obecný tvar.

$$l_i = a * m_i + b$$

$$0{,}128 = a * 0{,}5 + b \qquad 0{,}692 = a * 3{,}0 + b$$

$$0{,}241 = a * 1{,}0 + b \qquad 0{,}812 = a * 3{,}5 + b$$

$$0{,}350 = a * 1{,}5 + b \qquad 0{,}927 = a * 4{,}0 + b$$

$$0{,}468 = a * 2{,}0 + b \qquad 1{,}045 = a * 4{,}5 + b$$

$$0{,}584 = a * 2{,}5 + b \qquad 1{,}156 = a * 5{,}0 + b$$

Tyto rovnice můžeme přepsat do tabulky.

m	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0
l	0,128	0,241	0,350	0,468	0,584	0,692	0,812	0,927	1,045	1,156

A tedy

$$\varphi^{(1)} = \begin{pmatrix} 0{,}5 \\ 1{,}0 \\ 1{,}5 \\ 2{,}0 \\ 2{,}5 \\ 3{,}0 \\ 3{,}5 \\ 4{,}0 \\ 4{,}5 \\ 5{,}0 \end{pmatrix} \qquad \varphi^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \varphi = \begin{pmatrix} 0{,}128 \\ 0{,}241 \\ 0{,}350 \\ 0{,}468 \\ 0{,}584 \\ 0{,}692 \\ 0{,}812 \\ 0{,}927 \\ 1{,}045 \\ 1{,}156 \end{pmatrix}$$

Vypočítáme skalární součiny a vytvoříme matici

$$\langle \varphi^{(i)}, \varphi^{(j)} \rangle$$

$$\langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(1)} \rangle = 96{,}25 \qquad \langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(2)} \rangle = 27{,}5 \qquad \langle \varphi^{(1)}, \varphi \rangle = 22{,}3345$$

$\langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)} \rangle = 27{,}5$ $\langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(2)} \rangle = 10$ $\langle \varphi^{(2)}, \varphi \rangle = 6{,}403$

Nyní si povšimněte shody výsledků skalárních součinů s dříve vyšetřenými hodnotami sum $\sum_{i=1}^{n} m_i, \sum_{i=1}^{n} l_i, \sum_{i=1}^{n} m_i^2, \sum_{i=1}^{n} m_i l_i$.

Proč tomu tak je. Jestliže máme rovnici ve tvaru $l_i = a * m_i + b$, kde $i = 1, 2, 3, \dots, 10$, můžeme ji převést do tvaru řešení. $r_i = a * m_i + b - l_i$.

Dále můžeme výsledné hodnoty r_i zapsat ve vektorovém tvaru kde $r = \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_{10} \end{bmatrix}$ a kde nás zajímá minimum z normy pro r. Pro vyšetření můžeme použít dvojkovou normu.

$$\|r\|^2 = r_1^2 + \dots + r_{10}^2$$

$$\|r\|^2 = \sum_{i=1}^{10} (a * m_i + b - l_i)^2 = F(a, b) \to MIN$$

Nyní funkci $F(a, b)$ parciálně zderivujeme a položíme rovnu nule.

$$\frac{\delta F}{\delta a} = \sum_{i=1}^{10} 2 * (a * m_i + b - l_i) * m_i = 0$$

A tedy

$$\sum_{i=1}^{10} a * m_i^2 + b * m_i = \sum_{i=1}^{10} l_i * m_i$$

$$\frac{\delta F}{\delta b} = \sum_{i=1}^{10} 2 * (a * m_i + b - l_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{10} a * m_i + b = \sum_{i=1}^{10} l_i$$

Zde je tedy vidět, postup, jak se došlo k sumacím uvedených ve Fyzikálním praktiku.

Pokračujme dále v řešení. Sestavíme matici z vypočítaných skalárních součinů.

$$\left[\begin{array}{cc|c} 96,25 & 27,5 & 22,3345 \\ 27,5 & 10 & 6,403 \end{array}\right]$$

Tuto matici získáme i druhým způsobem a to pomocí vzorce $A^T * A * x = A^T * b$.

V našem případě je matice $A = \begin{pmatrix} 0,5 & 1 \\ 1,0 & 1 \\ 1,5 & 1 \\ 2,0 & 1 \\ 2,5 & 1 \\ 3,0 & 1 \\ 3,5 & 1 \\ 4,0 & 1 \\ 4,5 & 1 \\ 5,0 & 1 \end{pmatrix}$

a tedy matice transponovaná je $A^T = \begin{pmatrix} 0,5 & 1,0 & 1,5 & 2,0 & 2,5 & 3,0 & 3,5 & 4,0 & 4,5 & 5,0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

dostáváme tedy rovnici

$$\begin{pmatrix} 0,5 & 1,0 & 1,5 & 2,0 & 2,5 & 3,0 & 3,5 & 4,0 & 4,5 & 5,0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 0,5 & 1 \\ 1,0 & 1 \\ 1,5 & 1 \\ 2,0 & 1 \\ 2,5 & 1 \\ 3,0 & 1 \\ 3,5 & 1 \\ 4,0 & 1 \\ 4,5 & 1 \\ 5,0 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0,5 & 1,0 & 1,5 & 2,0 & 2,5 & 3,0 & 3,5 & 4,0 & 4,5 & 5,0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 0,128 \\ 0,241 \\ 0,350 \\ 0,468 \\ 0,584 \\ 0,692 \\ 0,812 \\ 0,927 \\ 1,045 \\ 1,156 \end{pmatrix}$$

Po úpravě dostaneme matici

$$\left(\begin{array}{cc|c} 96,25 & 27,5 & 22,3345 \\ 27,5 & 10 & 6,403 \end{array}\right)$$

Nyní použijeme Cramerovo pravidlo pro nalezení kořenů.

$$D = \begin{vmatrix} 96{,}25 & 27{,}5 \\ 27{,}5 & 10 \end{vmatrix} = 206{,}25$$

$$a = \frac{\begin{vmatrix} 22{,}3345 & 27{,}5 \\ 6{,}403 & 10 \end{vmatrix}}{206{,}25} \doteq 0{,}22915151$$

$$b = \frac{\begin{vmatrix} 96{,}25 & 22{,}3345 \\ 27{,}5 & 6{,}403 \end{vmatrix}}{206{,}25} \doteq 0{,}01013333$$

Opět si povšimněte, že i touto metodou jsme došli ke stejným hodnotám parametrů a a b.

Dále dosadíme kořeny do zadání

$a * 0{,}5 + b = 0{,}12470909$

$a * 1{,}0 + b = 0{,}23928484$

$a * 1{,}5 + b = 0{,}35386060$

$a * 2{,}0 + b = 0{,}46843635$

$a * 2{,}5 + b = 0{,}58301211$

$a * 3{,}0 + b = 0{,}69758786$

$a * 3{,}5 + b = 0{,}81216362$

$a * 4{,}0 + b = 0{,}92673937$

$a * 4{,}5 + b = 1{,}04131513$

$a * 5{,}0 + b = 1{,}15589088$

Nakonec vypočítáme normu, abychom zjistili, zda je naše proložená křivka tou nejideálněji proloženou.

$$\|\varphi - \varphi^*\|_2 =$$
$$= \sqrt{(0{,}128 - 0{,}12470909)^2 + (0{,}241 - 0{,}23928484)^2 + \ \dots + (1{,}156 - 1{,}15589088)^2} =$$
$$= 0{,}00864589$$

Seznam použité literatury

[1] Dalík, J.: Numerické metody, Akademické nakladatelství CERM s.r.o. Brno, Brno 1997

[2] Ficker, T.: Fyzikální praktikum I, Akademické nakladatelství CERM s.r.o. Brno, Brno 2006

Za spolupráce a pod vedením Mgr. Ireny Hinterleitner, které tímto děkuji.

V Brně 2015