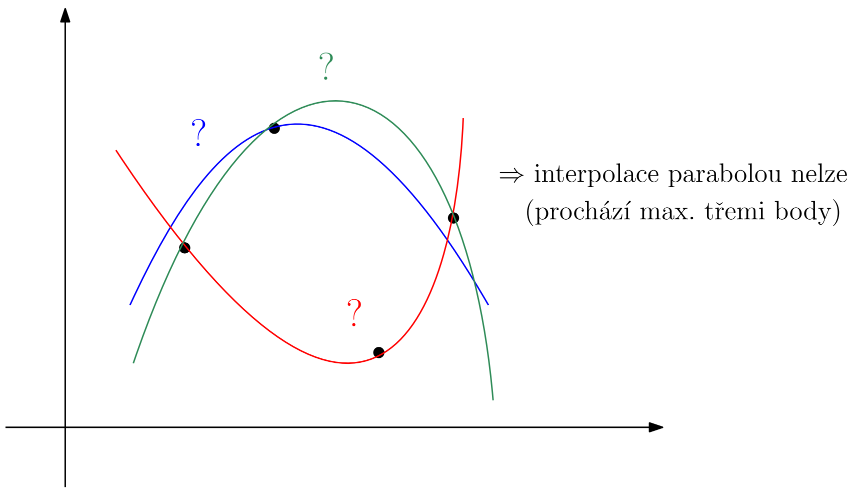
Metoda nejmenších čtverců (MNČ)

- řeší se podobný typ úlohy jako u interpolace - tedy nahrazení dané, často neznámé, funkce y,
- u interpolace se vyžaduje, aby interpolační funkce procházela naměřenými hodnotami - u MNČ ne
- např. prolož parabolu čtyřmi body:



- řešení ve smyslu MNČ existuje vždy (na rozdíl od interpolace)

- chceme aproximovat funkci $y(t)$ proměnné t,
- pro různé hodnoty $t_1, \dots, t_m$ je dáno m měření $y_1, \dots, y_m$,
- chceme modelovat $y(t)$ pomocí n ($n \leq m$) **bázových funkcí** $\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t)$, tj.

$$y(t) \approx x_1\varphi_1(t) + x_2\varphi_2(t) + \cdots + x_n\varphi_n(t),$$

  kde $x_1, \dots, x_n$ jsou neznámé parametry,
- maticová formulace problému: $\boldsymbol{y} \approx \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, kde

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \dots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix}.$$

  → tato soustava nelze řešit pomocí GEM apod. (je více rovnic než neznámých = problém).
- parametr $\boldsymbol{x}^*$ hledáme tak, aby byly minimalizovány kvadráty **reziduí** $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, tj. řešením úlohy

$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{r}_2^2\| = \min_{\boldsymbol{x}} \sum_{i=1}^{m} r_i^2$$

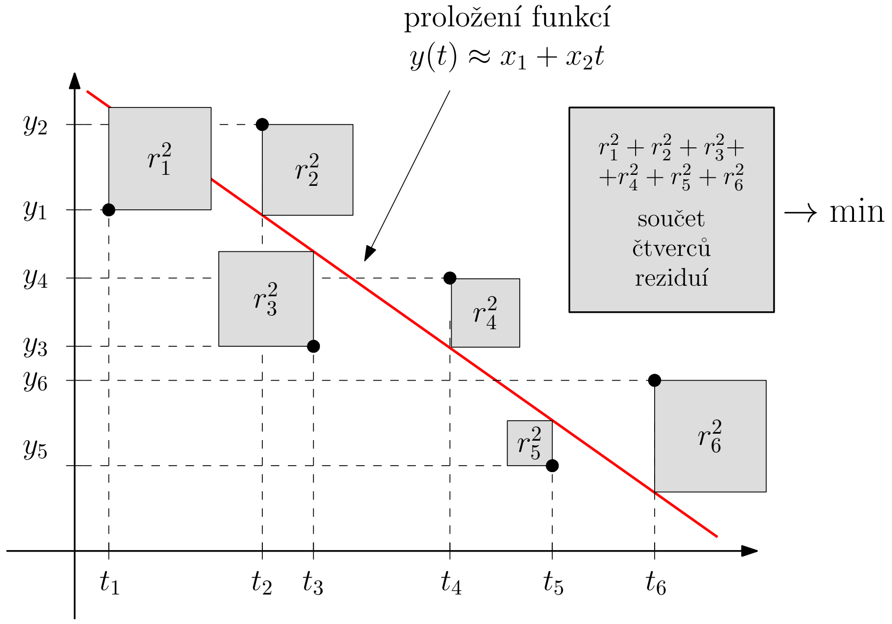
- lze ukázat, že $\boldsymbol{x}^*$ se dostane řešením tzv. **normální soustavy rovnic**

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y},$$

  neboli

$$\boldsymbol{x}^* = \left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}.$$

- **užití ve statistice:**
  - sleduje se nějaká závislost y na t, např. $y = x_1 + x_2 t$ (lineární závislost)
  - měření jsou vždy doprovázena chybami měření, tj. ve skutečnosti naměříme $y = x_1 + x_2 t + \varepsilon$, kde ε je nějaká náhodná veličina
  - tudíž naměřená data neleží na přesné přímce.



Příklad 1: Byly naměřeny hodnoty funkce $y(t)$ a tyto jsou uvedeny v tabulce. Aproximujte funkci $y(t)$ pomocí přímky.

t_i	-2	0	1	3
y_i	1	3.8	1.8	4.2

Řešení. Podle zadání máme aproximovat $y(t) \approx x_1 + x_2 t$, tedy máme případ, kdy $\varphi_1(t) = 1, \varphi_2(t) = t$. Sestavíme normální soustavu rovnic, přičemž

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3.8 \\ 1.8 \\ 4.2 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \varphi_1(-2) & \varphi_2(-2) \\ \varphi_1(0) & \varphi_2(0) \\ \varphi_1(1) & \varphi_2(1) \\ \varphi_1(3) & \varphi_2(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}.$$

Dále spočteme

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 14 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 3.8 \\ 1.8 \\ 4.2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10.8 \\ 12.4 \end{bmatrix}.$$

Spočítáme-li inverzní matici k matici $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$, dostaneme

$$\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)^{-1} = \frac{1}{26}\begin{bmatrix} 7 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

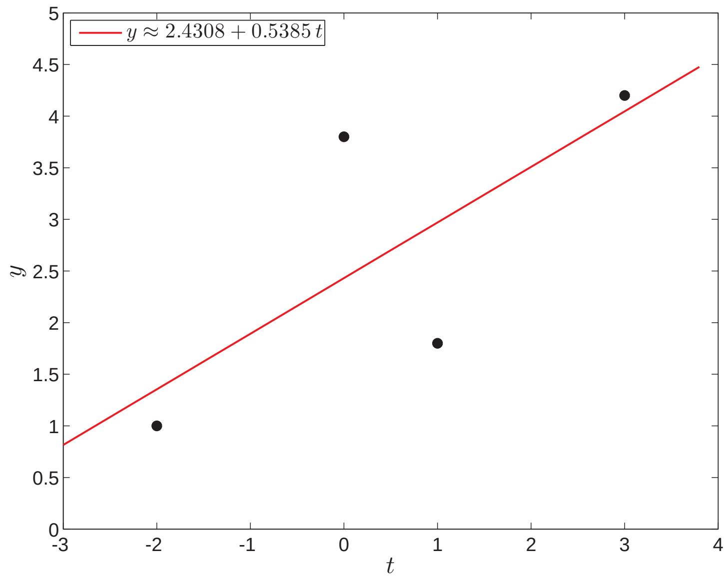
Řešení $\boldsymbol{x}^*$ se obdrží řešením této soustavy, tj. ve tvaru

$$\boldsymbol{x}^* = \left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \frac{1}{26}\begin{bmatrix} 7 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 10.8 \\ 12.4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.4308 \\ 0.5385 \end{bmatrix}.$$

Tedy hledaná aproximace funkce je

$$y(t) \approx 2.4308 + 0.5385t,$$

viz obrázek níže:



□

Příklad 2: Byly naměřeny hodnoty funkce $y(t)$ a tyto jsou uvedeny v tabulce. Aproximujte funkci $y(t)$ pomocí polynomu 2. stupně.

t_i	1	2	3	4
y_i	3	2.1	2.9	0.5

Řešení. Podle zadání máme aproximovat $y(t) \approx x_1 + x_2 t + x_3 t^2$, tedy máme případ, kdy $\varphi_1(t) = 1, \varphi_2(t) = t, \varphi_3(t) = t^2$. Sestavíme normální soustavu rovnic, přičemž

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2.1 \\ 2.9 \\ 0.5 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_2(1) & \varphi_3(1) \\ \varphi_1(2) & \varphi_2(2) & \varphi_3(2) \\ \varphi_1(3) & \varphi_2(3) & \varphi_3(3) \\ \varphi_1(4) & \varphi_2(4) & \varphi_3(4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix}.$$

Dále spočteme

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 \\ 2.1 \\ 2.9 \\ 0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.5 \\ 17.9 \\ 45.5 \end{bmatrix}.$$

Spočítáme-li inverzní matici k matici $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$, dostaneme

$$\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 7.75 & -6.75 & 1.25 \\ -6.75 & 6.45 & -1.25 \\ 1.25 & -1.25 & 0.25 \end{bmatrix}.$$

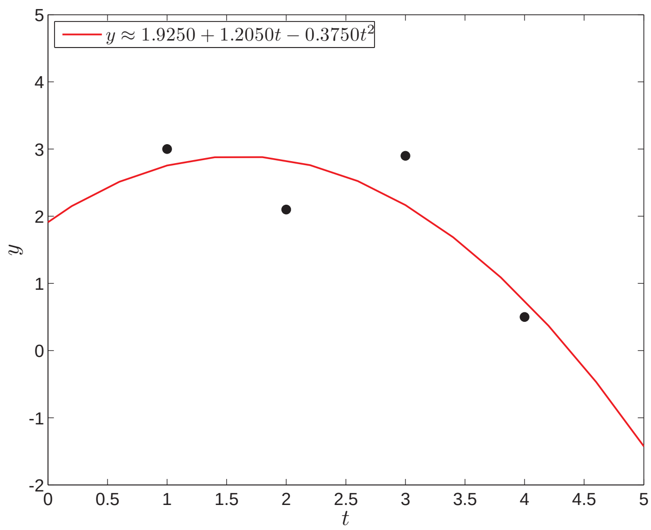
Řešení $\boldsymbol{x}^*$ se obdrží řešením normální soustavy, tj. ve tvaru

$$\boldsymbol{x}^* = \left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 7.75 & -6.75 & 1.25 \\ -6.75 & 6.45 & -1.25 \\ 1.25 & -1.25 & 0.25 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 8.5 \\ 17.9 \\ 45.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.9250 \\ 1.2050 \\ -0.3750 \end{bmatrix}.$$

Tedy hledaná aproximace funkce je

$$y(t) \approx 1.9250 + 1.2050t - 0.3750t^2,$$

viz obrázek níže:



□