

Legkisebb négyzetek módszere

Adottak a

t_1, t_2, \dots, t_m időpillanatokban az

f_1, f_2, \dots, f_m megfigyelések.

A folyamatot leíró $F(t)$ modell paramétereit keressük.

Lineáris regresszió

A modell lineáris:

$$F(t) = a + bt$$

Olyan a, b paramétereket keresünk, hogy

$$\sum_{i=1}^m (F(t_i) - f_i)^2$$

minimális legyen.

Legyen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Ekkor

$$Ax = \begin{pmatrix} a + bt_1 \\ a + bt_2 \\ \vdots \\ a + bt_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(t_1) \\ F(t_2) \\ \vdots \\ F(t_m) \end{pmatrix}$$

Olyan a , b paramétereket keresünk, melyekkel

$$J(x) = \sum_{i=1}^m (F(t_i) - f_i)^2 = \|Ax - f\|_2^2$$

minimális.

$$J(x) = \sum_{i=1}^m (F(t_i) - f_i)^2 = \sum_{i=1}^m (a + bt_i - f_i)^2$$

Minimum csak ott lehet, ahol

$$\frac{\partial J(x)}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial J(x)}{\partial b} = 0$$

$$\frac{\partial J(x)}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^m (a + bt_i - f_i)$$

és

$$\frac{\partial J(x)}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^m (a + bt_i - f_i)t_i$$

Átrendezve:

$$ma + b \sum_{i=1}^m t_i = \sum_{i=1}^m f_i$$

$$a \sum_{i=1}^m t_i + b \sum_{i=1}^m t_i^2 = \sum_{i=1}^m t_i f_i$$

Mátrixalakban:

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m t_i \\ \sum_{i=1}^m t_i & \sum_{i=1}^m t_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_i \\ \sum_{i=1}^m t_i f_i \end{pmatrix}$$

A mátrix determinánása:

$$m \sum_{i=1}^m t_i^2 - \left(\sum_{i=1}^m t_i \right)^2 \geq 0$$

és $= 0 \iff$ az összes t_i megegyezik:

$$t_1 = t_2 = \dots = t_m =: t_0$$

1. Ha van legalább két különböző t_i érték, akkor a rendszer egyértelműen megoldható. A megoldás a J minimumhelye lesz.

2. Ha $t_1 = t_2 = \dots = t_m =: t_0$, akkor

$$\begin{pmatrix} m & mt_0 \\ mt_0 & mt_0^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_i \\ t_0 \sum_{i=1}^m f_i \end{pmatrix}$$

a 2. egyenlet az első t_0 -szorosa \rightarrow végtelen sok megoldás.

$$b = s \in \mathbb{R}, \quad a = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f_i - st_0$$

Ha $b = 0$

$$a = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f_i$$

Példa:

1. Határozzuk meg az alábbi adatokat négyzetesen legjobban közelítő egyenes egyenletét!

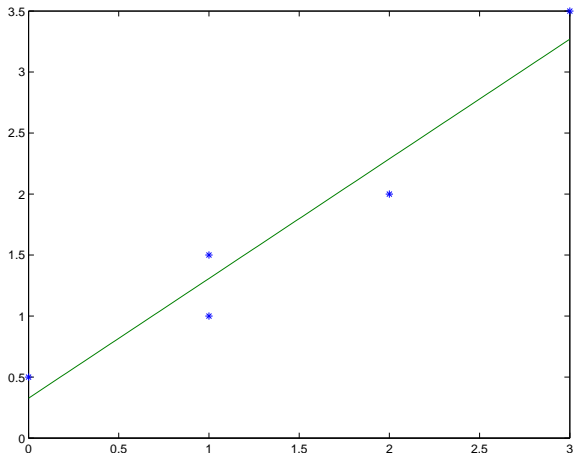
t_i	0	1	1	2	3
f_i	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{7}{2}$

A modell: $F(t) = a + b \cdot t$

$$\begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 7 & 15 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{17}{2} \\ 17 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{26} \begin{pmatrix} 15 & -7 \\ -7 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{17}{2} \\ 17 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{17}{52} \\ \frac{51}{52} \end{pmatrix}$$

Az illesztett modell: $F(t) = \frac{17}{52} + \frac{51}{52}t$



Példa

2. Határozzuk meg az alábbi adatokat négyzetesen legjobban közelítő egyenes egyenletét!

t_i	2	2	2	2	2
f_i	1	1	2	2	2

A modell: $F(t) = a + b \cdot t$

$$\begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 20 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 16 \end{pmatrix}$$

$$5a + 10b = 8$$

$$b = s \in \mathbb{R}, \quad a = \frac{8}{5} - 2s$$

Ha $s = 0$, akkor $F(t) \equiv \frac{8}{5}$

Legkisebb négyzetes közelítések

Adottak a

t_1, t_2, \dots, t_m időpillanatokban az

f_1, f_2, \dots, f_m megfigyelések.

A folyamatot leíró

$$F(t) = \sum_{j=1}^n x_j \varphi_j(t)$$

modell paramétereit keressük úgy, hogy

$$J(x) = \sum_{i=1}^m (F(t_i) - f_i)^2$$

minimális legyen.

Itt $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ adott függvények, x_1, \dots, x_n ismeretlen paraméterek.

Példák a modellre:

1. $n = 2$ és $\varphi_1(t) \equiv 1$, $\varphi_2(t) = t$:

$$F(t) = x_1 + x_2 t$$

(lineáris regresszió)

2. $\varphi_1(t) \equiv 1$, $\varphi_2(t) = t$, ..., $\varphi_n(t) = t^{n-1}$:

$$F(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \cdots + x_n t^{n-1}$$

(polinomiális modell)

3. $n = 3$ és $\varphi_1(t) \equiv 1$, $\varphi_2(t) = \sin(\pi t)$, $\varphi_3(t) = \cos(\pi t)$:

$$F(t) = x_1 + x_2 \sin(\pi t) + x_3 \cos(\pi t)$$

(trigonometrikus modell)

Legyen

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & & & \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \dots & \varphi_n(t_m) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n,$$

Ekkor

$$Ax = \begin{pmatrix} F(t_1) \\ F(t_2) \\ \vdots \\ F(t_m) \end{pmatrix}$$

A minimalizálandó függvény:

$$J(x) = \sum_{i=1}^m (F(t_i) - f_i)^2 = \|Ax - f\|_2^2$$

Minimum csak ott lehet, ahol

$$\frac{\partial J(x)}{\partial x_k} = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

$$J(x) = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n x_j \varphi_j(t_i) - f_i \right)^2$$

$$\frac{\partial J(x)}{\partial x_k} = 2 \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n x_j \varphi_j(t_i) - f_i \right) \varphi_k(t_i) = 0$$

$k = 1, \dots, n$ esetén:

$$\sum_{j=1}^n x_j \underbrace{\sum_{i=1}^m \varphi_j(t_i) \varphi_k(t_i)}_{(A^T A)_{kj}} = \underbrace{\sum_{i=1}^m f_i \varphi_k(t_i)}_{(A^T f)_k}$$

$$\underbrace{\sum_{j=1}^n (A^T A)_{kj} x_j}_{(A^T A x)_k} = (A^T f)_k$$

Minimum csak ott lehet, ahol

$$A^T A x = A^T f$$

egy lineáris egyenletrendszer x -re (**Gauss-féle normálegyenlet**)

Állítás.

1. A Gauss-féle normálegyenlet mindig megoldható.
2. A Gauss-féle normálegyenlet megoldása a legkisebb négyzetes értelemben legjobban közelítő modell paramétereit adja.
3. Ha az A mátrix oszlopvektorai lineárisan függetlenek, akkor a Gauss-féle normálegyenletnek egyetlen megoldása van.

Ha az A oszlopvektorai függőek (az $A^T A$ mátrix szinguláris), akkor végtelen sok megoldás van.

Szingularitás esetén javasolható:

- ▶ több adat felvétele
- ▶ a modell egyszerűsítése

Összefoglalva

A legkisebb négyzetes feladat megoldását az

$$A^T A x = A^T f$$

Gauss-féle normálegyenlet adja.

Az egyenlet mindig megoldható. Ha az A mátrix oszlopvektorai lineárisan függetlenek, akkor pontosan egy megoldás van, egyébként végtelen sok.

$A^T A$ szimmetrikus $\rightarrow LDL^T$ -felbontás, vagy Cholesky felbontás

Példa:

Ha a modell lineáris: $F(t) = x_1 + x_2 t$, akkor $\varphi_1(t) \equiv 1$ és $\varphi_2(t) = t$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \\ 1 & t_m \end{pmatrix}$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m t_i \\ \sum_{i=1}^m t_i & \sum_{i=1}^m t_i^2 \end{pmatrix}, \quad A^T f = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_i \\ \sum_{i=1}^m t_i f_i \end{pmatrix}$$

szingularitás: az A oszlopvektorai lineárisan függőek, azaz

$$t_1 = t_2 = \cdots = t_m$$

Példa

Ha a modell polinomiális: $F(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \dots + x_n t^{n-1}$

azaz $\varphi_1(t) \equiv 1, \varphi_2(t) = t, \dots, \varphi_n(t) = t^{n-1}$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \dots & t_1^{n-1} \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \dots & t_2^{n-1} \\ \vdots & & & & \\ 1 & t_m & t_m^2 & \dots & t_m^{n-1} \end{pmatrix}$$
$$A^T A = \begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m t_i & \sum_{i=1}^m t_i^2 & \dots & \sum_{i=1}^m t_i^{n-1} \\ \sum_{i=1}^m t_i & \sum_{i=1}^m t_i^2 & \sum_{i=1}^m t_i^3 & \dots & \sum_{i=1}^m t_i^n \\ \sum_{i=1}^m t_i^2 & \sum_{i=1}^m t_i^3 & \dots & \dots & \\ \vdots & & & & \\ \sum_{i=1}^m t_i^{n-1} & & & \dots & \sum_{i=1}^m t_i^{2n-2} \end{pmatrix}$$

$$A^T f = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_i \\ \sum_{i=1}^m f_i t_i \\ \sum_{i=1}^m f_i t_i^2 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m f_i t_i^{n-1} \end{pmatrix}$$

a feladat egyértelműen megoldható, ha a t_1, t_2, \dots, t_m értékek között legalább n különböző van

Példa

Határozzuk meg az alábbi adatokat négyzetesen legjobban közelítő parabola egyenletét!

t_i	0	1	1	2	3	4
f_i	4	1	2	5	11	24

A modell: $F(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2$

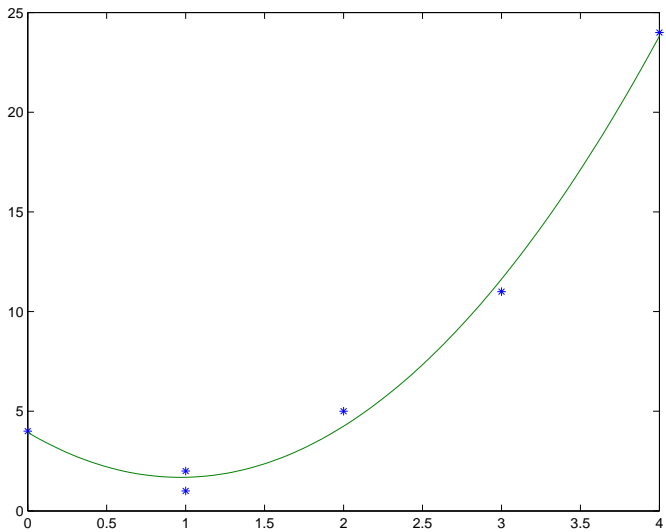
$$A^T A = \begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m t_i & \sum_{i=1}^m t_i^2 \\ \sum_{i=1}^m t_i & \sum_{i=1}^m t_i^2 & \sum_{i=1}^m t_i^3 \\ \sum_{i=1}^m t_i^2 & \sum_{i=1}^m t_i^3 & \sum_{i=1}^m t_i^4 \end{pmatrix} \quad A^T f = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_i \\ \sum_{i=1}^m f_i t_i \\ \sum_{i=1}^m f_i t_i^2 \end{pmatrix}$$

$$A^T A x = A^T f$$

$$\begin{pmatrix} 6 & 11 & 31 \\ 11 & 31 & 101 \\ 31 & 101 & 355 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 47 \\ 142 \\ 506 \end{pmatrix}$$

ennek megoldása (4 tizedesjegyre kerekítve)

$$x = \begin{pmatrix} 2.4063 \\ -4.6563 \\ 3.9375 \end{pmatrix}$$



Példa:

Határozzuk meg az alábbi adatokat négyzetesen legjobban közelítő $F(t) = a + \frac{b}{t}$ alakú modell paramétereit!

t_i	0.5	0.6	0.7	0.9	1	1.2	1.4	1.6	1.8	2
f_i	8.1	7	6.3	5.3	5	4.52	4.14	3.9	3.7	3.51

$$m = 10, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{t_1} \\ 1 & \frac{1}{t_2} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \frac{1}{t_{10}} \end{pmatrix}$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 10 & \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{t_i} \\ \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{t_i} & \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{t_i^2} \end{pmatrix}, \quad A^T f = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{10} f_i \\ \sum_{i=1}^{10} \frac{f_i}{t_i} \end{pmatrix}$$

