Metóda najmenších štvorcov

Jakub Záthurecký
zathurecky@math.muni.cz

Dept. of Mathematics and Statistics, Faculty of Science, Masaryk University

December 3, 2024

Motivácia

- Riešme systém lineárnych rovníc $Ax = b$.
- Ak $h(A) = h(A|b)$, potom má systém práve jedno riešenie (Frobeniova veta).
- V praktických situáciách je táto podmienka často porušená.
- Typický príklad: systém je preurčený (overdetermined) - má omnoho viac rovníc ako neznámych.
- Ak riešenie neexistuje, hľadáme nejaký jeho „najlepší“ ekvivalent.

Príklad

- Nech je medzi veličinami y a x lineárny vzťah: $y = ax + b$, pre nejaké (neznáme) $a, b \in \mathbb{R}$.
- Pre n hodnôt x_i veličiny x máme nameraných n hodnôt y_i veličiny y, $i = 1, \ldots, n$.
- V ideálnom prípade by body (x_i, y_i) ležali na priamke $y = ax + b$.
- Vzhľadom k tomu, že merania sú zaťažené (náhodnou) chybou, body neležia na žiadnej priamke.
- Snažíme sa nájsť priamku $y = ax + b$ (koeficienty a, b) tak, aby danými bodmi „prechádzala“ čo najlepšie.

Príklad

i	x_i	y_i
1	0	5
2	1	3
3	3	3
4	5	2
5	6	1

$$y = ax + b$$

$$\begin{aligned} 0a + b &= 5, \\ 1a + b &= 3, \\ 3a + b &= 3, \\ 5a + b &= 2, \\ 6a + b &= 1. \end{aligned}$$

- Systém nemá riešenie (z prvej rovnice dostávame $b = 5$ a po dosadení do ostatných rovníc dostávame rôzne hodnoty pre a).
- Obrázok.

Maticový zápis

$$
\begin{aligned}
0a + b &= 5,\\
1a + b &= 3,\\
3a + b &= 3,\\
5a + b &= 2,\\
6a + b &= 1.
\end{aligned}
$$

$$Ac = f,$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 5 & 1 \\ 6 & 1 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- c - vektor neznámych koeficientov a, b

Geometrická interpretácia systému lineárnych rovníc

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 5 & 1 \\ 6 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow a \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 3 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} + b \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- systém $Ac = f$ má riešenie práve vtedy, keď sa dá vektor f napísať ako lineárna kombinácia stĺpcov $s_1(A)$ a $s_2(A)$ matice A.

Geometrická interpretácia systému lineárnych rovníc

- Definujeme priestor $\mathrm{Im}(A)$ generovaný stĺpcami matice A:

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}(A) &= \{Ac \mid c \in \mathbb{R}^2\}\\ &= \{a \cdot s_1(A) + b \cdot s_2(A) \mid a, b \in \mathbb{R}\}\end{aligned}$$

- Tento zápis je v skutočnosti parametrické vyjadrenie roviny (v 5-rozmernom priestore $\mathbb{R}^5$), ktorej smerové vektory sú stĺpce matice A, teda $s_1(A)$ a $s_2(A)$, a v ktorej leží bod $0 = [0, 0, 0, 0, 0]$ (ten dostaneme voľbou $a = b = 0$).
- Systém $Ac = f$ má riešenie práve vtedy, keď bod f leží v rovine $\mathrm{Im}(A)$. Ak $f \notin \mathrm{Im}(A)$, potom tento systém nemá riešenie.
- Obrázok.

Skalárny súčin

- Pre vektory $u = (u_1, \dots, u_k)^T$, $v = (v_1, \dots, v_k)^T \in \mathbb{R}^k$ (vektory chápeme ako stĺpcové vektory, teda ako matice, ktoré majú k riadkov a 1 stĺpec, takže ak ich chceme napísať do riadku, musíme použiť transponovanie) sme definovali skalárny súčin

$$\langle u, v \rangle = u \cdot v = u_1 v_1 + \cdots + u_k v_k = \sum_{i=1}^{k} u_i v_i .$$

- To sa dá vyjadriť tiež pomocou maticového násobenia:

$$u^T \cdot v = (u_1, \dots, u_k) \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_k \end{pmatrix} = u_1 v_1 + \cdots + u_k v_k = \sum_{i=1}^{k} u_i v_i .$$

Najlepšie (ne)riešenie

- Pokúsime sa nájsť bod f^* v rovine $\mathrm{Im}(A)$, ktorý je nabližšie k bodu f spomedzi všetkých bodov roviny $\mathrm{Im}(A)$. Inými slovami, je to bod, v ktorom sa realizuje vzdialenosť bodu f od roviny $\mathrm{Im}(A)$.
- Tento bod má tú vlastnosť, že vektor $f - f^*$ je kolmý na rovinu $\mathrm{Im}(A)$.
- Zároveň, vzhľadom k tomu, že $f^* \in \mathrm{Im}(A)$, existuje vektor koeficentov c^* taký, že $Ac^* = f^*$. Inými slovami, systém $Ac = f^*$ má riešenie a tým je vektor c^*.
- Obrázok.

Výpočet

- Vektor $f - f^*$ je kolmý na rovinu $\mathrm{Im}(A)$ práve vtedy, keď je kolmý na jej obidva smerové vektory:

$$s_1(A)^T \cdot (f - f^*) = s_1(A)^T \cdot (f - Ac^*) = 0,$$
$$s_2(A)^T \cdot (f - f^*) = s_2(A)^T \cdot (f - Ac^*) = 0.$$

- To môžeme v maticovom tvare vyjadriť nasledujúcim spôsobom:

$$A^T \cdot (f - Ac^*) = 0,$$

- pričom nula na pravej strane označuje nulový vektor $(0, 0)^T$.

Výpočet

$$(0,1,3,5,6)\cdot\left(\begin{pmatrix}5\\3\\3\\2\\1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&1\\1&1\\3&1\\5&1\\6&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\right)=0,$$

$$(1,1,1,1,1)\cdot\left(\begin{pmatrix}5\\3\\3\\2\\1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&1\\1&1\\3&1\\5&1\\6&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\right)=0.$$

$$\begin{pmatrix}0&1&3&5&6\\1&1&1&1&1\end{pmatrix}\cdot\left(\begin{pmatrix}5\\3\\3\\2\\1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&1\\1&1\\3&1\\5&1\\6&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\right)=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$$

Výpočet

- Rovnicu $A^T \cdot (f - Ac^*) = 0$ upravíme:

$$
\begin{aligned}
A^T \cdot (f - Ac^*) &= 0,\\
A^T f - A^T A c^* &= 0,\\
A^T A c^* &= A^T f.
\end{aligned}
$$

$$
A^T A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 5 & 1 \\ 6 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 71 & 15 \\ 15 & 5 \end{pmatrix}.
$$

- Matica $A^T A$ je evidentne invertibilná, takže môžeme dopočítať c^*:

Výpočet

$$
\begin{aligned}
A^T A c^* &= A^T f, \\
c^* &= (A^T A)^{-1} A^T f.
\end{aligned}
$$

$$
c^* = \begin{pmatrix} 71 & 15 \\ 15 & 5 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{7}{13} \\ \frac{287}{65} \end{pmatrix}
$$

- Hľadaná priamka má tvar $y = -\frac{7}{13}x + \frac{287}{65}$.

Názov metódy (Interpretácia výsledku)

- c^* sme hľadali tak, že sme minimalizovali vzdialenosť f od $f^* = Ac^*$. Inak povedané, hľadali sme c^* tak, aby vektor $f - Ac^*$ mal minimálnu veľkosť.

$$f - Ac^* = \begin{pmatrix} y_1 - ax_1 - b \\ \vdots \\ y_5 - ax_5 - b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 - 0a - b \\ 3 - 1a - b \\ 3 - 3a - b \\ 2 - 5a - b \\ 1 - 6a - b \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} |f - Ac^*| &= \sqrt{\sum_{i=1}^{5} (y_i - ax_i - b)^2} \\ &= \sqrt{\begin{aligned} (5 - 0a - b)^2 + (3 - 1a - b)^2 + (3 - 3a - b)^2 \\ + (2 - 5a - b)^2 + (1 - 6a - b)^2 \end{aligned}} \end{aligned}$$

Názov metódy (Interpretácia výsledku)

- Vzhľadom k tomu, že $\sqrt{\bullet}$ je rastúca funkcia, minimalizácia $|f - Ac^*|$ je ekvivalentá (dostaneme ten istý výsledok) minimalizácii výrazu

$$\sum_{i=1}^{5}(y_i - ax_i - b)^2$$

- Obrázok.

Všeobecná MNŠ

- Nech je medzi veličinami y a x vzťah

$$y = \varphi(x) = c_1\varphi_1(x) + \cdots + c_k\varphi_k(x) = \sum_{i=1}^{k} c_i\varphi_i(x),$$

- kde $c_1, \dots, c_k \in \mathbb{R}$ a $\varphi_1, \dots, \varphi_k$ sú tzv. bázové funkcie, teda funkčný vzťah $y = \varphi(x)$ sa dá vyjadriť ako lineárna kombinácia bázových funkcií.
- V predošlom príklade bolo $k = 2$, $c_1 = a$, $c_2 = b$, $\varphi_1(x) = x$ a $\varphi_2(x) \equiv 1$.
- Pre n rôznych hodnôt x_i veličiny x máme predpísaných n hodnôt y_i veličiny y, $i = 1, \dots, n$.
- Typicky je n omnoho väčšie ako k, teda daných bodov (x_i, y_i) je omnoho viac ako parametrov c_i.

Všeobecná MNŠ

- V ideálnom prípade by existovali koeficienty $c_1, \ldots, c_k$ tak, že pre každé $i \in \{1, \ldots, n\}$ by platilo $y_i = \varphi(x_i)$, teda každý bod (x_i, y_i) by ležal na grafe funkcie $y = \varphi(x)$.
- Systém rovníc $y_i = \varphi(x_i)$, $i \in \{1, \ldots, n\}$ má tvar

$$\begin{aligned} c_1\varphi_1(x_1) + \cdots + c_k\varphi_k(x_1) &= y_1, \\ &\vdots \\ c_1\varphi_1(x_n) + \cdots + c_k\varphi_k(x_n) &= y_n. \end{aligned}$$

- Je to systém n lineárnych rovníc pre k neznámych koeficientov $c_1, \ldots, c_k$. V praxi je beznádejné, aby mal riešenie. Preto hľadáme tie „najlepšie“ koeficienty $c_1, \ldots, c_k$ v zmysle metódy najmenších štvorcov.

Všeobecná MNŠ

- Maticový zápis systému:

$$Ac = f,$$

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_k(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_k(x_n) \end{pmatrix} \quad c = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_k \end{pmatrix} \quad f = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$Ac = f \quad \Leftrightarrow \quad c_1 \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1) \\ \vdots \\ \varphi_1(x_n) \end{pmatrix} + \cdots + c_k \begin{pmatrix} \varphi_k(x_1) \\ \vdots \\ \varphi_k(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Geometrická interpretácia

- Definujeme priestor $\mathrm{Im}(A)$ generovaný stĺpcami matice A:

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}(A) &= \{Ac \mid c \in \mathbb{R}^k\} \\ &= \{c_1 \cdot s_1(A) + \cdots + c_k \cdot s_k(A) \mid c_1, \ldots, c_k \in \mathbb{R}\} \end{aligned}$$

- $\mathrm{Im}(A)$ je k-rozmerná nadrovina v n-rozmernom priestore $\mathbb{R}^n$, ktorej smerové vektory sú stĺpce matice A, teda $s_1(A), \ldots, s_k(A)$.
- Hľadáme bod f^* v nadrovine $\mathrm{Im}(A)$, ktorý je nabližšie k bodu f spomedzi všetkých bodov nadroviny $\mathrm{Im}(A)$. Inými slovami, minimalizujeme veľkosť $|f - f^*|$ vektora $f - f^*$.
- Tento bod má tú vlastnosť, že vektor $f - f^*$ je kolmý na nadrovinu $\mathrm{Im}(A)$.
- Zároveň, vzhľadom k tomu, že $f^* \in \mathrm{Im}(A)$, existuje vektor koeficentov c^*, taký, že $Ac^* = f^*$.

Výpočet

- Vektor $f - f^*$ je kolmý na nadrovinu $\mathrm{Im}(A)$ práve vtedy, keď je kolmý na všetky jej smerové vektory:

$$\begin{aligned} s_1(A)^T \cdot (f - f^*) &= s_1(A)^T \cdot (f - Ac^*) = 0, \\ &\vdots \\ s_k(A)^T \cdot (f - f^*) &= s_k(A)^T \cdot (f - Ac^*) = 0. \end{aligned}$$

- To môžeme v maticovom tvare vyjadriť nasledujúcim spôsobom:

$$A^T \cdot (f - Ac^*) = 0,$$

- pričom nula na pravej strane označuje nulový vektor $(0, \ldots, 0)^T$.

Výpočet

- Rovnicu $A^T \cdot (f - Ac^*) = 0$ upravíme:

$$\begin{aligned} A^T \cdot (f - Ac^*) &= 0, \\ A^T f - A^T A c^* &= 0, \\ A^T A c^* &= A^T f. \end{aligned}$$

- Matica $A^T A$ je invertibilná práve vtedy, keď má A plnú hodnosť. To sa dá zabezpečiť rozumnou voľbou bázových funkcií. Stačí aby boli tzv. lineárne nezávislé na uzloch x_i. Takže hodnosť matice A a tým pádom aj invertibilita matice $A^T A$ závisí len od vlastností bázových funkcií, nie od dát (x_i, f_i).

$$c^* = (A^T A)^{-1} A^T f$$

Riešenie

- Koeficienty c^* podľa ich konštrukcie minimalizujú hodnotu
$$|f - Ac| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k} c_j\varphi_j(x_i)\right)^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \varphi(x_i))^2}.$$
- Podľa vlastností funkcie $\sqrt{\bullet}$ je tento problém ekivalentý minimalizácii výrazu
$$|f - Ac|^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=1}^{k} c_j\varphi_j(x_i)\right)^2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \varphi(x_i))^2.$$
- Odtiaľ pochádza názov metódy - hľadáme koeficienty c tak, aby sme minimalizovali súčet druhých mocnín (štvorcov) odchýliek aproximovaných hodnôt od skutočných/predpísaných hodnôt.
- Matica $(A^TA)^{-1}A^T$ sa nazýva Mooreova-Penroseova pseudoinverzia matice A.

Dôkaz

- Ukážeme, že c^* naozaj minimalizuje výraz $|f - Ac|^2$.
- Nech $\widetilde{c} \in \mathbb{R}^k$ je ľubovoľné. Označme rozdiel $\widetilde{c} - c^*$ symbolom Δc, takže $\widetilde{c} = c^* + \Delta c$. Ukážeme, že $|f - A\widetilde{c}|^2 \geq |f - Ac^*|^2$:

$$
\begin{aligned}
|f - A\widetilde{c}|^2 &= (f - A\widetilde{c})^T \cdot (f - A\widetilde{c}) \\
&= (f - A(c^* + \Delta c))^T \cdot (f - A(c^* + \Delta c)) \\
&= (f - Ac^* - A\Delta c)^T \cdot (f - Ac^* - A\Delta c)) \\
&= ((f - Ac^*) - A\Delta c)^T \cdot ((f - Ac^*) - A\Delta c)) \\
&= ((f - Ac^*)^T - (A\Delta c)^T) \cdot ((f - Ac^*) - A\Delta c)) \\
&= (f - Ac^*)^T \cdot (f - Ac^*) - (f - Ac^*)^T \cdot A\Delta c \\
&- (A\Delta c)^T \cdot (f - Ac^*) + (A\Delta c)^T \cdot A\Delta c
\end{aligned}
$$

Dôkaz

- Pripomeňme, že c^* má tú vlastnosť, že vektor $f - Ac^*$ je kolmý na nadrovinu $\mathrm{Im}(A)$. Vzhľadom k tomu, že $A\Delta c$ leží v nadrovine $\mathrm{Im}(A)$ a výrazy $(f - Ac^*)^T \cdot A\Delta c$ a $(A\Delta c)^T \cdot (f - Ac^*)$ sú skalárne súčiny vektora $f - Ac^*$ s vektorom $A\Delta c$ (skalárny súčin je symetrický), sú obidva rovné nule.

$$
\begin{aligned}
|f - A\widetilde{c}|^2 &= (f - Ac^*)^T \cdot (f - Ac^*) + (A\Delta c)^T \cdot A\Delta c \\
&= |f - Ac^*|^2 + |A\Delta c|^2
\end{aligned}
$$

- Opäť sme využili vzťah medzi veľkosťou vektora a skalárnym súčinom: $|u|^2 = u^T \cdot u$. Keďže $|A\Delta c|^2 \geq 0$, môžeme z predošlej nerovnosti usúdiť
$$|f - A\widetilde{c}|^2 \geq |f - Ac^*|^2 .$$
- Dôkaz je tým hotový.

Štatistika

- Zo štatistického hľadiska sa snažíme minimalizovať odhad rozptylu náhodnej veličiny $Y - \varphi(X)$.
- Rozptyl je číselná charakterisitka vyjadrujúca mieru variability náhodnej veličiny - mieru s akou sa odkláňa od svojej strednej hodnoty.
- V našom prípade očakávame, že $Y - \varphi(X) \approx 0$, teda že náhodná veličina $Y - \varphi(X)$ je blízka konštantnej náhodnej veličine 0, ktorej rozptyl je prirodzene 0.

Príklady

- Príklady na kalibračnú krivku spektrometra a na materiálové konštanty skla v študijných materiáloch.

MASARYKOVA UNIVERZITA