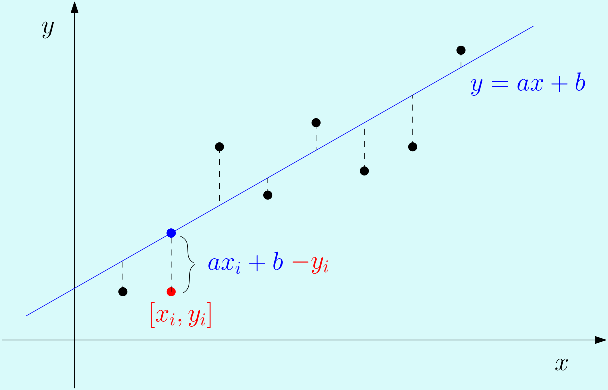
Metoda nejmenších čtverců

Metoda nejmenších čtverců využívá optimalizace pro nalezení přímky (nebo obecnější křivky), která je vhodnou aproximací naměřených závislých dat. Velice často při měření hodnot potřebujeme získat informaci o této závislosti ať už pro predikci nebo např. pro odhad chyb přístroje apod.

Odvodíme nejjednodušší případ, budeme hledat přímku $y = ax + b$ tak, aby naměřeným dvojicím dat $[x_1, y_1]$, …, $[x_n, y_n]$ co nejlépe odpovídala.



Minimalizujeme tedy vzdálenosti skutečně naměřených hodnot od hodnot na aproximující přímce. Přesněji použijeme nikoliv vzdálenost, tedy absolutní hodnotu rozdílu těchto hodnot, ale její čtverec, tedy druhou mocninu. Odtud název metody - metoda nejmenších čtverců. (Důvod je ten, že výpočet je podstatně jednodušší…)

$$\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)^2 \longrightarrow min$$

Uvědomme si, že známe x_i a y_i, to, co neznáme jsou parametry přímky: a a b. Minimalizovat tedy budeme vzhledem k těmto proměnným. Hledáme tedy stacionární body funkce dvou proměnných, nalezneme derivace podle obou proměnných a položíme je rovny nule:

$$\begin{aligned}
(\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)^2)'_a &= \sum_{i=1}^{n}2(ax_i + b - y_i)x_i = 0 \\
(\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)^2)'_b &= \sum_{i=1}^{n}2(ax_i + b - y_i) = 0
\end{aligned}$$

Roznásobením a sloučením vhodných sčítanců dostaneme soustavu:

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

Tato soustava má vždy jediné řešení, protože

$$D = \det \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{pmatrix} = n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2 > 0.$$

Jde o tzv. Jensenovu nerovnost, ostrá nerovnost je dána tím, že měříme alespoň ve dvou různých hodnotách x, z jednoho měření nebo měření v jednom x žádný závěr o závislosti y na x samozřejmě nedostaneme.

Podle Cramerova pravidla je řešením soustavy

$$a = \frac{\det\begin{pmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n} y_i & n \end{pmatrix}}{D}, \quad b = \frac{\det\begin{pmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n} x_i & \sum\limits_{i=1}^{n} y_i \end{pmatrix}}{D}$$

a je skutečně minimem, protože hessián $4D > 0$ a navíc
$(\sum\limits_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)^2)''_{aa} = 2\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 > 0.$

1. příklad: Najděte přímku aproximující body $[0, 5]$, $[1, 3]$, $[3, 3]$, $[5, 2]$, $[6, 1]$.
Řešení.