

6.5. Legkisebb négyzetek módszere

Legyen $n, N \in \mathbb{N}$, $n \ll N$, adottak az $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}$ alappontok és az $y_1, \dots, y_N \in \mathbb{R}$

függvényértékek (pl. mérési eredmények). Keressük azt a $P_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$

polinomot, melyre a

$$\sum_{i=1}^N (y_i - P_n(x_i))^2 \text{ kifejezés minimális.}$$

A fenti feltételnek eleget tevő P_n polinomot az (x_i, y_i) ($i = 1, \dots, N$) értékeket négyzetesen legjobban közelítő n -ed fokú polinomnak nevezzük.

A feladat megoldásához az

$$F(a_0, \dots, a_n) := \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{j=0}^n a_j x_i^j \right)^2 : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$$

függvényt kell minimalizálnunk. A többváltozós függvények szélsőértékéről tanultak szerint az $F'(a_0, \dots, a_n) = 0$ feltételnek eleget tevő a_j -ket keressük. A parciális deriváltakra

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial a_j}(a_0, \dots, a_n) &= \sum_{i=1}^N 2(y_i - P_n(x_i)) \left(-\frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) \right) = 0 \quad (j = 0, \dots, n) \\ \sum_{i=1}^N P_n(x_i) \frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) &= \sum_{i=1}^N y_i \frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) \quad (j = 0, \dots, n) \end{aligned}$$

Mivel $\frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) = (x_i)^j$, a fenti egyenlet a következő alakba írható:

$$\sum_{i=1}^n (x_i)^j \sum_{k=0}^n a_k (x_i)^k = \sum_{k=0}^n a_k \sum_{i=1}^N (x_i)^{j+k} = \sum_{i=1}^N y_i (x_i)^j \quad (j = 0, \dots, n).$$

Ezzel a_k -kra egy lineáris egyenletrendszeret kaptunk.

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_N & \dots & x_N^n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times (n+1)}, \quad \underline{b} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N \text{ és } \underline{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

Ekkor a fenti a_k -kra felírt lineáris egyenletrendszer az alábbi alakba írható:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n a_k (A \text{ j.oszlopa}) (A \text{ k.oszlopa}) &= (A \text{ j.oszlopa}) \cdot \underline{b} \quad (j = 0, \dots, n) \\ \sum_{k=0}^n ((A^T \text{ j.sora}) (A \text{ k.oszlopa}) \cdot a_k) &= (A^T \text{ j.sora}) \cdot \underline{b} \quad (j = 0, \dots, n), \text{ azaz} \\ A^T A \underline{a} &= A^T \underline{b}. \end{aligned}$$

A kapott egyenletrendszert **Gauss-féle normálegyenleteknek** nevezzük.

Megjegyzés.

1. Ha az $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}$ alappontok különbözők, akkor az A mátrix teljes rangú, az $A^T A$ mátrix invertálható, így az $A^T A \underline{a} = A^T \underline{b}$ egyenletrendszer egyértelműen megoldható.
2. Az F'' mátrix vizsgálatával ellenőrizhető, hogy a kapott megoldás az F függvény minimum helye.
3. $F(\underline{a}) = \|A\underline{a} - \underline{b}\|_2^2$ alakba is írható.
4. Ha $N = n+1$, akkor interpolációs feladatot kapunk, ekkor $A \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ és $\det(A) \neq 0$. A Gauss-féle normálegyenletek ekvivalens az $A\underline{a} = \underline{b}$ egyenletrendszer megoldásával.

6.16. Tétel. Ha az $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}$ alappontok különbözők, akkor az $A^T A \underline{a} = A^T \underline{b}$ egyértelműen egyenletrendszer megoldható. Az $(x_i, y_i) (i=1, \dots, N)$ értékeket négyzetesen legjobban közelítő n -ed fokú polinom $P_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$.

Bizonyítás. Nézzük meg, hogy a Hilbert térbeli approximáció elméletével hogyan határozható meg a négyzetesen legjobban közelítő legfeljebb n -ed fokú polinom.

Legyen $H = \mathbb{R}^N$, $w = (w_1, \dots, w_N)$, $w_i > 0$ súlyok.

A skaláris szorzat $\langle f, g \rangle_w = \sum_{i=1}^N f_i g_i w_i$, $f, g \in H$ -ra. Most $w_i = 1$ ($i=1, \dots, N$).

A H' altér a H tér $n+1$ dimenziós altere, $H' = \langle 1, (x_i), (x_i)^2, \dots, (x_i)^n \rangle \subset \mathbb{R}^N$.

Ekkor $P_n = (P_n(x_i))_{i=1}^N = \sum_{j=0}^n a_j ((x_i)^j)_{i=1}^N$ és $f = (f_i)_{i=1}^N = (f(x_i))_{i=1}^N = (y_i)_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N$.

Az $\|f - P_n\|_w^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - P_n(x_i))^2$ minimumát a $G\underline{c} = \underline{b}$ lineáris egyenletrendszer

megoldásával kapjuk, ahol $G \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$, $\underline{c}, \underline{b} \in \mathbb{R}^{n+1}$.

Elemei: $g_{kj} = \langle (x_i)^k, (x_i)^j \rangle = (x_i)^{k+j}$, $c_j = a_j$ és $b_j = \langle (y_i), (x_i)^j \rangle = y_i (x_i)^j$.

Láthatjuk, hogy az $A^T A \underline{a} = A^T \underline{b}$ lineáris egyenletrendszert kaptuk.

Kidolgozott példák

1. Példa. Írjuk fel az $n=1$ speciális esetet. Az $(x_i, y_i) (i=1, \dots, N)$ pontokra illesszünk elsőfokú polinomot. (Lineáris regressziónak is nevezik.)

Megoldás.

$$P_1(x) = a_1 x + a_0, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{pmatrix}, \quad \underline{b} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}.$$

A Gauss-féle normálegyenletek $A^T A \underline{a} = A^T \underline{b}$ megoldásával kapjuk a keresett polinom együtthatóit, ahol

$$A^T A = \begin{pmatrix} N & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{pmatrix}, \quad A^T \underline{b} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N y_i \\ \sum_{i=1}^N x_i y_i \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \underline{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}.$$

2. Példa. Írjuk fel a következő pontokat négyzetesen legjobban közelítő egyenest: (2,2), (4,5), (8,5) !

A) Megoldás. $A^T A = \begin{pmatrix} 3 & 14 \\ 14 & 84 \end{pmatrix}$, $A^T \underline{b} = \begin{pmatrix} 12 \\ 64 \end{pmatrix}$. Az $A^T A \underline{a} = A^T \underline{b}$ Gauss-féle normálegyenlet megoldása: $\underline{a} = \begin{pmatrix} 2 \\ \frac{3}{7} \end{pmatrix}$, vagyis a keresett polinom: $P_1(x) = \frac{3}{7}x + 2$.

B) Megoldás. A Hilbert térbeli approximáció elméletével oldjuk meg a feladatot.

$$H = \mathbb{R}^3, \quad f = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 5 \end{pmatrix}, \quad H' = \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix} \right\rangle, \quad b_1 = \left\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = 12, \quad b_2 = \left\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix} \right\rangle = 64,$$

$$G_{11} = \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = 3, \quad G_{12} = G_{21} = \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix} \right\rangle = 14 \quad \text{és} \quad G_{22} = \left\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix} \right\rangle = 84.$$

$G \underline{c} = \underline{b} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 3 & 14 \\ 14 & 84 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 64 \end{pmatrix}$. Láthatjuk, hogy ugyanazt a lineáris egyenletrendszert kaptuk, mint az A) megoldásnál.

3. Példa. Mit tehetünk, ha nem polinommal kell közelítenünk? Például $f(x) = \ln(cx + d)$ alakú függvénnyel.

Megoldás. f -et linearizáljuk. Legyen $\tilde{f}(x) := \exp(f(x)) = cx + d$ és $\tilde{y}_i := \exp(y_i)$ ($i = 1, \dots, N$). Az $(x_i, \tilde{y}_i)$ ($i = 1, \dots, N$) pontokra felírt négyzetesen legjobban közelítő egyenes: $cx + d$. Így a keresett c és d értéket megkaptuk.