DISKRÉTNÍ METODA NEJMENŠÍCH ČTVERCŮ

- použití: v případech, kdy je nevhodná interpolace
- využití: prokládání dat křivkami, řešení přeurčených systémů lineárních rovnic
- nahrazení požadavku $F(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$ slabším požadavkem

$$(F(x_0) - f(x_0))^2 + (F(x_1) - f(x_1))^2 + \ldots (F(x_n) - f(x_n))^2 \to \min$$

- obecná formulace úlohy: Pro dané vektory $\overrightarrow{\varphi} \in \mathbb{R}^k$ a $\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(2)}, \ldots, \overrightarrow{\varphi}^{(n)} \in \mathbb{R}^k$, $n < k$ najděte koeficienty $c_1, c_2, \ldots, c_n$ tak, že pro vektor $\overrightarrow{\varphi}^* = c_1\overrightarrow{\varphi}^{(1)} + \cdots + c_n\overrightarrow{\varphi}^{(n)} = X\overrightarrow{c}$, kde $X = \left(\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(2)}, \ldots, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\right)_{k\times n}$, je norma $\|\overrightarrow{\varphi} - \overrightarrow{\varphi}^*\|_2$ minimální.
- konstrukce: neznámé koeficienty $c_1, c_2 \ldots, c_n$ dostáváme jako řešení soustavy lineárních rovnic, tzv. *normálních rovnic*:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \langle\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(1)}\rangle & \langle\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(2)}\rangle & \cdots & \langle\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\rangle \\ \langle\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(2)}\rangle & \langle\overrightarrow{\varphi}^{(2)}, \overrightarrow{\varphi}^{(2)}\rangle & \cdots & \langle\overrightarrow{\varphi}^{(2)}, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle\overrightarrow{\varphi}^{(1)}, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\rangle & \langle\overrightarrow{\varphi}^{(2)}, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\rangle & \cdots & \langle\overrightarrow{\varphi}^{(n)}, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\rangle \end{pmatrix}}_{X^TX} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}}_{\overrightarrow{c}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \langle\overrightarrow{\varphi}, \overrightarrow{\varphi}^{(1)}\rangle \\ \langle\overrightarrow{\varphi}, \overrightarrow{\varphi}^{(2)}\rangle \\ \vdots \\ \langle\overrightarrow{\varphi}, \overrightarrow{\varphi}^{(n)}\rangle \end{pmatrix}}_{X^T\overrightarrow{\varphi}} \quad (1)$$

- *Pozn. 1.* Při návrhu aproximace bychom měli aproximační funkci vybírat tak, aby vektory $\overrightarrow{\varphi}^{(i)}$ byly lineárně nezávislé, v opačném případě by měla soustava (1) nekonečně mnoho řešení.
  Pozn. 2. Za předpokladu, že jsou vektory $\overrightarrow{\varphi}^{(i)}$, $i = 1, \ldots, n$ lineárně nezávislé, matice soustavy (1) je symetrická a pozitivně definitní $\to$ soustava (1) lze efektivně řešit např. Choleského metodou.

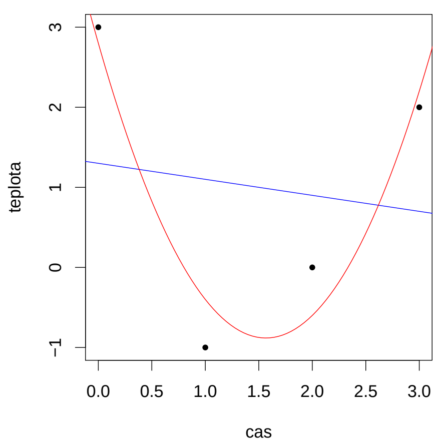
Příklad 1. Pro zadané hodnoty najděte vztah popisující závislost teploty na čase zjištěnou měřením zaznamenaným v tabulce. Aproximujte

a) lineárním,

b) kvadratickým polynomem.

Vypočítejte normu vektoru chyb výsledné aproximace v daných uzlech.

i	0	1	2	3
čas	0	1	2	3
teplota	3	-1	0	2



Řešení.

Příklad 2. Metodou nejmenších čtverců řešte přeurčenou soustavu lineárních rovnic

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ x_1 - x_2 &= 1 \\ x_1 + 2x_2 &= -1. \end{aligned}$$

Řešení.

$$\vec{\varphi}^{(1)} = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix},\ \vec{\varphi}^{(2)} = \begin{pmatrix}1\\-1\\2\end{pmatrix},\ \vec{\varphi} = \begin{pmatrix}2\\1\\-1\end{pmatrix} \Rightarrow \text{matice plánu: } X = \begin{pmatrix}\vec{\varphi}^{(1)} & \vec{\varphi}^{(2)}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\\1 & 2\end{pmatrix}$$

- součin $X^T X$:

$$X^T X = \begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\1 & -1 & 2\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\\1 & 2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}3 & 2\\2 & 6\end{pmatrix}$$

- součin $X^T \vec{\varphi}$:

$$X^T \vec{\varphi} = \begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\1 & -1 & 2\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}2\\1\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\\-1\end{pmatrix}$$

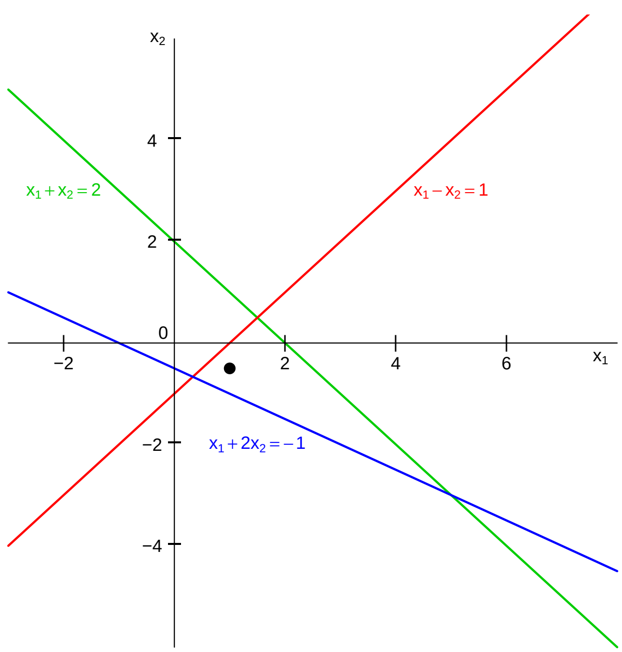
- systém normálních rovnic $X^T X \vec{c} = X^T \vec{\varphi}$:

$$\left(\begin{array}{cc|c}3 & 2 & 2\\2 & 6 & -1\end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{cc|c}1 & \frac{2}{3} & \frac{2}{3}\\0 & \frac{14}{3} & -\frac{7}{3}\end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{cc|c}1 & 0 & 1\\0 & 1 & -\frac{1}{2}\end{array}\right) \quad \Rightarrow \vec{c} = \begin{pmatrix}1\\-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

- odhad $\vec{\varphi}^*$:

$$\vec{\varphi}^* = X\vec{c} = \begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\\1 & 2\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}1\\-\frac{1}{2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\\frac{3}{2}\\0\end{pmatrix}$$

- chyba aproximace: $\|\vec{\varphi} - \vec{\varphi}^*\|_2 = \sqrt{\frac{9}{4} + \frac{1}{4} + 1} = \sqrt{\frac{7}{2}} \doteq 1.8708$



Příklad 3. Funkci $f(x) = x^2$ aproximujte v uzlech $x_i = -2 + i,\ i = 1, 2, 3, 4$ lineární kombinací funkcí $1,\ \mathrm{e}^x,\ \mathrm{e}^{-x}$. Vypočítejte normu vektoru chyb výsledné aproximace v daných uzlech.

Řešení.

i	1	2	3	4
x_i	-1	0	1	2
y_i	1	0	1	4

Dané funkce: $f_1(x) = 1,\ f_2(x) = \mathrm{e}^x,\ f_3(x) = \mathrm{e}^{-x}$

x_i	-1	0	1	2
$f_1(x_i)$	1	1	1	1
$f_2(x_i)$	0.3679	1	2.7183	7.3891
$f_3(x_i)$	2.7183	1	0.3679	0.1353

$$\Rightarrow \vec{\varphi}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},\ \vec{\varphi}^{(2)} \doteq \begin{pmatrix} 0.3679 \\ 1 \\ 2.7183 \\ 7.3891 \end{pmatrix},\ \vec{\varphi}^{(3)} \doteq \begin{pmatrix} 2.7183 \\ 1 \\ 0.3679 \\ 0.1353 \end{pmatrix},\ \vec{\varphi} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \text{matice plánu: } X \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0.3679 & 2.7183 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2.7183 & 0.3679 \\ 1 & 7.3891 & 0.1353 \end{pmatrix}$$

- součin $X^T X$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.3679 & 1 & 2.7183 & 7.3891 \\ 2.7183 & 1 & 0.3679 & 0.1353 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0.3679 & 2.7183 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2.7183 & 0.3679 \\ 1 & 7.3891 & 0.1353 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 4 & 11.4752 & 4.2215 \\ 11.4752 & 63.1225 & 4 \\ 4.2215 & 4 & 8.5427 \end{pmatrix}$$

- součin $X^T \vec{\varphi}$:

$$X^T \vec{\varphi} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.3679 & 1 & 2.7183 & 7.3891 \\ 2.7183 & 1 & 0.3679 & 0.1353 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 6 \\ 32.6424 \\ 3.6275 \end{pmatrix}$$

- systém normálních rovnic $X^T X \vec{c} = X^T \vec{\varphi}$:

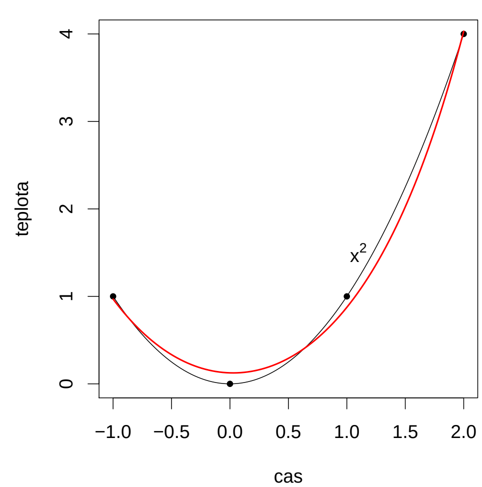
$$\left(\begin{array}{ccc|c} 4 & 11.4752 & 4.2215 & 6 \\ 11.4752 & 63.1225 & 4 & 32.6424 \\ 4.2215 & 4 & 8.5427 & 3.6275 \end{array}\right)$$

- řešení systému normálních rovnic:

$$\vec{c} \doteq \begin{pmatrix} -1.3413 \\ 0.7132 \\ 0.7535 \end{pmatrix}$$

- rovnice modelu: $y = -1.3413 + 0.7132\mathrm{e}^x + 0.7535\mathrm{e}^{-x}$
- odhadnuté hodnoty:

$$\vec{\varphi}^* = X\vec{c} \doteq \begin{pmatrix} 0.9693 \\ 0.1254 \\ 0.8746 \\ 4.0305 \end{pmatrix}$$



- chyba aproximace: $\|\vec{\varphi} - \vec{\varphi}^*\|_2 \doteq 0.1825$

Řešený příklad z praxe.
U 15 podniků řepařské oblasti v České republice byl sledován průměrný hektarový výnos [q/ha] cukrovky ve vztahu ke spotřebě hnojiva K_2O [kg/ha]. Hodnoty jsou dány v tabulce. Odhadněte parametry následujících modelů

Zdroj: [1]

a) $y = c_1 + c_2 x$,

b) $y = c_1 + c_2 x + c_3 x^2$.

c) $y = c_1 + c_2 \sqrt{x}$,

a porovnejte jejich vhodnost.

spotřeba K_2O [kg/ha]	20	58	96	134	172	210	248	286	324	362	400	438	476	514	552
výnosy cukrovky [q/ha]	180	231	270	341	352	352	444	494	543	519	532	521	529	510	479

Řešení.

a) $\boxed{\text{model } M_1 : y = c_1 + c_2 x}$

- $\overrightarrow{\varphi}^{(1)} = (1,\ 1,\ \ldots,\ 1)^T$
  $\overrightarrow{\varphi}^{(2)} = (20,\ 58,\ 96,\ 134,\ 172,\ 210,\ 248,\ 286,\ 324,\ 362,\ 400,\ 438,\ 476,\ 514,\ 552)^T$
  $\overrightarrow{\varphi} = (180,\ 231,\ 270,\ 341,\ 352,\ 352,\ 444,\ 494,\ 543,\ 519,\ 532,\ 521,\ 529,\ 510,\ 479)^T$
- matice plánu $X = \left(\overrightarrow{\varphi}^{(1)} \quad \overrightarrow{\varphi}^{(2)}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 58 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 552 \end{pmatrix}$
- součin $X^T X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 20 & 58 & \cdots & 552 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 58 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 552 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 & 4\,260 \\ 4\,290 & 1\,631\,290 \end{pmatrix}$
- součin $X^T \overrightarrow{\varphi} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 20 & 58 & \cdots & 552 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 180 \\ 231 \\ \vdots \\ 479 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6\,297 \\ 2\,057\,632 \end{pmatrix}$
- systém normálních rovnic $X^T X \overrightarrow{c} = X^T \overrightarrow{\varphi}$:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 15 & 4\,260 & 6\,297 \\ 4\,290 & 1\,631\,290 & 2\,057\,632 \end{array}\right)$$

- řešení systému normálních rovnic: $\overrightarrow{c} \doteq \begin{pmatrix} 238.2276 \\ 0.6349 \end{pmatrix}$
- rovnice modelu: $y = 238.2276 + 0.6349x$
- aproximace:

$$\overrightarrow{\varphi}^* = X\overrightarrow{c} = \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 58 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 552 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 238.2276 \\ 0.6349 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 250.9256 \\ 275.0518 \\ 299.1780 \\ 323.3042 \\ 347.4304 \\ 371.5566 \\ 395.6828 \\ 419.8090 \\ 443.9352 \\ 468.0614 \\ 492.1876 \\ 516.3138 \\ 540.4400 \\ 564.5662 \\ 588.6924 \end{pmatrix}$$

- chyba aproximace: $\|\overrightarrow{\varphi} - \overrightarrow{\varphi}^*\|_2 \doteq 213.387$

b) $\boxed{\text{model } M_2 : y = c_1 + c_2 x + c_3 x^2}$

- $\overrightarrow{\varphi}^{(1)} = (1,\ 1,\ \dots,\ 1)^T$
  $\overrightarrow{\varphi}^{(2)} = (20,\ 58,\ 96,\ 134,\ 172,\ 210,\ 248,\ 286,\ 324,\ 362,\ 400,\ 438,\ 476,\ 514,\ 552)^T$
  $\overrightarrow{\varphi}^{(3)} = (400,\ 3\,364,\ 9\,216,\ 17\,956,\ 29\,584,\ 44\,100,\ 61\,504,\ 81\,796,\ 104\,976,\ 131\,044,\ 160\,000,\ 191\,844,\ 226\,576,\ 264\,196,\ 304\,704)^T$
  $\overrightarrow{\varphi} = (180,\ 231,\ 270,\ 341,\ 352,\ 352,\ 444,\ 494,\ 543,\ 519,\ 532,\ 521,\ 529,\ 510,\ 479)^T$
- matice plánu $X = \left(\overrightarrow{\varphi}^{(1)} \quad \overrightarrow{\varphi}^{(2)} \quad \overrightarrow{\varphi}^{(3)}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 400 \\ 1 & 58 & 3\,364 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 552 & 304\,704 \end{pmatrix}$
- součin $X^T X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 20 & 58 & \cdots & 552 \\ 400 & 3\,364 & \cdots & 304\,704 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 20 & 400 \\ 1 & 58 & 3\,364 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 552 & 304\,704 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 & 4\,290 & 1\,631\,260 \\ 4\,290 & 1\,631\,260 & 697\,811\,400 \\ 1\,631\,260 & 697\,811\,400 & 318\,289\,528\,432 \end{pmatrix}$
- součin $X^T \overrightarrow{\varphi} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 20 & 58 & \cdots & 552 \\ 400 & 3\,364 & \cdots & 304\,704 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 180 \\ 231 \\ \vdots \\ 479 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6\,297 \\ 2\,057\,632 \\ 81\,374\,8576 \end{pmatrix}$
- systém normálních rovnic $X^T X \overrightarrow{c} = X^T \overrightarrow{\varphi}$:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 15 & 4\,290 & 1\,631\,260 & 6\,297 \\ 4\,290 & 1\,631\,260 & 697\,811\,400 & 2\,057\,632 \\ 1\,631\,260 & 697\,811\,400 & 318\,289\,528\,432 & 81\,374\,8576 \end{array}\right)$$

- řešení systému normálních rovnic: $\overrightarrow{c} \doteq \begin{pmatrix} 124.2269 \\ 1.8239 \\ -0.0021 \end{pmatrix}$
- rovnice modelu: $y = 124.2269 + 1.8239x - 0.0021x^2$
- aproximace:

$$\overrightarrow{\varphi}^* = c_1 \overrightarrow{\varphi}^{(1)} + c_2 \overrightarrow{\varphi}^{(2)} = X \overrightarrow{c} = \begin{pmatrix} 1 & 20 & 400 \\ 1 & 58 & 3\,364 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 552 & 304\,704 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 124.2269 \\ 1.8239 \\ -0.0021 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 159.8649 \\ 222.9487 \\ 279.9677 \\ 330.9219 \\ 375.8113 \\ 414.6359 \\ 447.3957 \\ 474.0907 \\ 494.7209 \\ 509.2863 \\ 517.7869 \\ 520.2227 \\ 516.5937 \\ 506.8999 \\ 491.1413 \end{pmatrix}$$

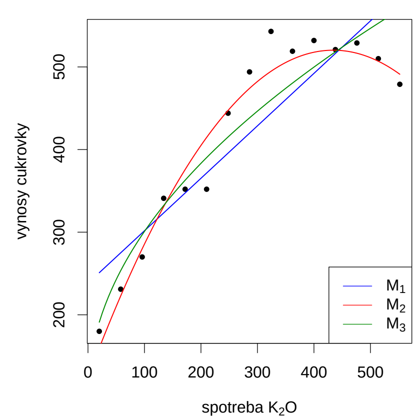
- chyba aproximace: $\|\overrightarrow{\varphi} - \overrightarrow{\varphi}^*\|_2 \doteq 92.2393$

c) $\boxed{\text{model } M_3 : y = c_1 + c_2\sqrt{x}}$

- $\overrightarrow{\varphi}^{(1)} = (1,\ 1, \ldots,\ 1)^T$
  $\overrightarrow{\varphi}^{(2)} = (4.4721,\ 7.6158,\ 9.7980,\ 11.5758,\ 13.1149,\ 14.4914,\ 15.7480,\ 16.9115,\ 18,\ 19.0263,\ 20,\ 20.9284,\ 21.8174,\ 22.6716,\ 23.4947)^T$
  $\overrightarrow{\varphi} = (180,\ 231,\ 270,\ 341,\ 352,\ 352,\ 444,\ 494,\ 543,\ 519,\ 532,\ 521,\ 529,\ 510,\ 479)^T$
- matice plánu $X = \left(\overrightarrow{\varphi}^{(1)} \quad \overrightarrow{\varphi}^{(2)}\right) \doteq \begin{pmatrix} 1 & 4.4721 \\ 1 & 7.6158 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 23.4947 \end{pmatrix}$
- součin $X^T X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 4.4721 & 7.6158 & \cdots & 23.4947 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 4.4721 \\ 1 & 7.6158 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 23.4947 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 & 239.6653 \\ 239.6653 & 4\,290 \end{pmatrix}$
- součin $X^T \overrightarrow{\varphi} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 4.4721 & 7.6158 & \cdots & 23.4947 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 180 \\ 231 \\ \vdots \\ 479 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 6\,297 \\ 109\,771.0954 \end{pmatrix}$
- systém normálních rovnic $X^T X \overrightarrow{c} = X^T \overrightarrow{\varphi}$:
$$\left(\begin{array}{cc|c} 15 & 239.6653 & 6\,297 \\ 239.6653 & 4\,290 & 109\,771.0954 \end{array}\right)$$
- řešení systému normálních rovnic: $\overrightarrow{c} \doteq \begin{pmatrix} 102.1293 \\ 19.8821 \end{pmatrix}$
- rovnice modelu: $y = 102.1293 + 19.8821\sqrt{x}$
- aproximace:
$$\overrightarrow{\varphi}^* = c_1\overrightarrow{\varphi}^{(1)} + c_2\overrightarrow{\varphi}^{(2)} = X\overrightarrow{c} = \begin{pmatrix} 1 & 4.4721 \\ 1 & 7.6158 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 23.4947 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 102.1293 \\ 19.8821 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 191.0448 \\ 253.5469 \\ 296.9333 \\ 332.2812 \\ 362.8806 \\ 390.2483 \\ 415.2329 \\ 438.3661 \\ 460.0071 \\ 480.4121 \\ 499.7713 \\ 518.2308 \\ 535.9055 \\ 552.8877 \\ 569.2529 \end{pmatrix}$$
- chyba aproximace: $\|\overrightarrow{\varphi} - \overrightarrow{\varphi}^*\|_2 \doteq 162.4549$

- POROVNÁNÍ VÝSLEDKŮ

	rovnice modelu	chyba
M_1	$y = 238.2276 + 0.6349\,x$	213.3870
M_2	$y = 124.2269 + 1.8239\,x - 0.0021\,x^2$	92.2393
M_3	$y = 102.1293 + 19.8821\,\sqrt{x}$	162.4549



Zdroj:

[1] https://myloview.cz/fototapeta-omalovanka-kreslena-repa-stastna-zeleninova-postava-symbol-c-6A903E8 (XI 2018)