Aproximace metodou nejmenších čtverců. Motivace.

Jedním ze základních úkolů numerické matematiky je nalézt k zadané funkci $f(x)$ vhodnou aproximující funkci $g(x)$. Například proto, že hodnoty funkce $f(x)$ známe pouze přibližně nebo mohou být navíc zatíženy chybou. Tato situace nastává nejčastěji při zpracování dat z fyzikálního experimentu nebo počítačové simulace.

Při hledání aproximační funkce se omezujeme na určitou skupinu funkcí, například na algebraické polynomy

$$g(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

Z vybrané množiny funkcí $g(x)$ je třeba vybrat jednu (tj. určit $a_0, \ldots, a_n$), která bude naši funkci $f(x)$ nejlépe aproximovat podle nějakého kritéria.

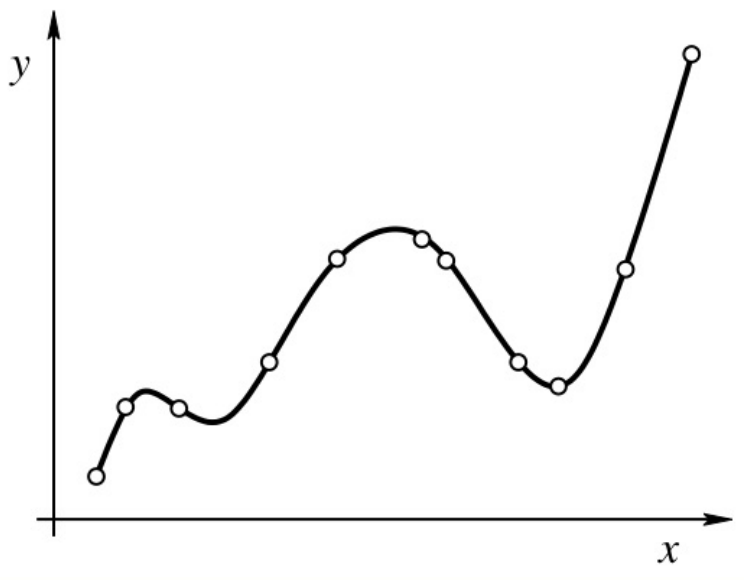
Předpokládejme, že máme funkci $f(x)$ zadánu tabulkou,

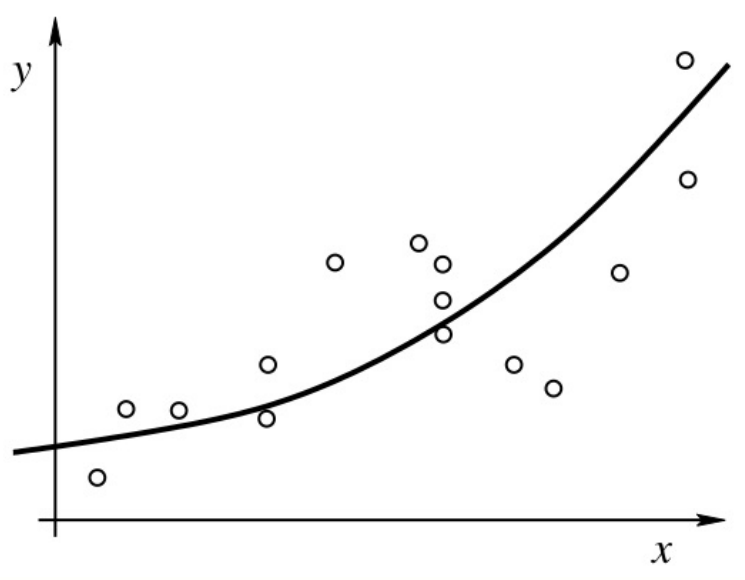
tj. v bodech $x_0, x_1, \ldots, x_n$ máme zadány hodnoty $y_0, y_1, \ldots, y_n$.

Funkce $g(x)$ **nemusí těmito body procházet**. V k-tém bodě bude **odchylka** $\varepsilon_i \equiv g(x_k) - yk$. Kvalitu aproximace určuje celková chyba aproximace E, která se získá z těchto jednotlivých odchylek, např. $E = \sum \varepsilon_i^2$, tj. celková chyba je součet druhých mocnin všech odchylek.

Interpolace a aproximace

1. **Interpolace** - Interpolační funkce prochází zadanými body. Je nutné, aby uzly x_i byly od sebe různé.
2. **Aproximace** - Aproximační funkce nemusí procházet zadanými body. Není nutné aby zadané uzly byly od sebe různé. Je možné aby více různých bodů se shodnou x-ovou souřadnicí mělo různou y-ovou souřadnici.





Metoda nejmenších čtverců

Je dána tabulka hodnot

i	1	2	3	...	n
x_i	x_1	x_2	x_3	...	x_n
y_i	y_1	y_2	y_3	...	y_n

- Vysvětlete princip metody nejmenších čtverců při aproximaci dané tabulkou hodnot polynomem nejvýše **1. stupně**.
  Hledáme **přímku**, $p_1(x) = a_0 + a_1 x$, pro kterou platí, že součet vzdáleností bodů $[x_i,\ y_i]$ od **této** přímky je nejmenší ze všech součtů vzdáleností bodů od jiných přímek.
- Zapište kvadratickou odchylku $\delta^2(p(x))$ polynomu $p(x)$ nejvýše prvního stupně od dané tabulky hodnot.
  $$\delta^2 = \sum_{i=1}^{n} (p(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i - y_i)^2$$
- Uved'te jaká podmínka má platit pro kvadratickou odchylku polynomu nejvýše 1. stupně $p^*(x)$, který danou tabulku hodnot aproximuje nejlépe ve smyslu nejmenších čtverců.
  $\delta^2 \to \min$, tj. hledáme minimum funkce δ^2 dvou proměnných a_0, a_1

Metoda nejmenších čtverců: odvození soustavy rovnic 1

- Zdůvodněte jak se odvodí soustava normálních rovnic.
  Hledáme minimum funkce δ^2 dvou proměnných a_0, a_1.
  Minimum nastane pro takové a_0, a_1, pro které parciální derivace

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial a_0} = 0 \quad \frac{\partial \delta^2}{\partial a_1} = 0$$

  Soustava normálních rovnic pro případ polynomu 1. stupně.

Vyjádříme parciální derivace:

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{n} 2(a_0 + a_1 x_i - y_i) = 2\left(a_0 \sum_{i=1}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i - \sum_{i=1}^{n} y_i\right)$$

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^{n} 2(a_0 + a_1 x_i - y_i)\, x_i = 2\left(a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i\right)$$

a položíme je rovny nule

$$\begin{aligned} a_0 \sum_{i=1}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 &= \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i \end{pmatrix}$$

Aproximace polynomem nejvýše **2. stupně**

Hledáme **křivku 2. řádu**, $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$, pro kterou platí, že součet vzdáleností bodů $[x_i,\ y_i]$ od **této** křivky je nejmenší ze všech součtů vzdáleností bodů od jiných křivek 1. nebo 2. řádu.

$$\delta^2 = \sum_{i=1}^{n} (p_2(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i)^2$$

Minimum nastane pro takové a_0, a_1, a_2, pro které parciální derivace jsou nulové.

Vyjádříme parciální derivace a položíme je rovny nule

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{n} 2(a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i) = 2\left(a_0 \sum_{i=1}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} y_i\right)$$

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^{n} 2(a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i)\, x_i = 2\left(a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + - \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i\right)$$

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial a_2} = \sum_{i=1}^{n} 2(a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i)\, x_i^2 = 2\left(a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 - \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i^2\right)$$

Soustava rovnic

$$\begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i^2 \end{pmatrix}$$

Příklad

Dána tabulka hodnot:

x	-2	-1	-1	0	0	4
y	-7	-1.8	-2.2	1.1	0.9	-7

a) Určete polynom nejvýše 2. stupně, který ve smyslu metody nejmenších čtverců nejlépe aproximuje data daná tabulkou hodnot.

b) Vypočítejte kvadratickou odchylku.

c) Výsledky zobrazte.

a) Hledáme $\mathbf{p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2}$. Neznámé $\mathbf{a_0, a_1, a_2}$ určíme ze soustavy rovnic:

$$\begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i^2 \end{pmatrix}$$

kde $n = 6$

$$\sum_{i=1}^{6} x_i = 0, \sum_{i=1}^{6} x_i^2 = 22, \sum_{i=1}^{6} x_i^3 = 54, \sum_{i=1}^{6} x_i^4 = 274$$

$$\sum_{i=1}^{6} y_i = -16, \sum_{i=1}^{6} x_i y_i = -10, \sum_{i=1}^{6} x_i^2 y_i = 144$$

Tedy: $$\begin{pmatrix} 6 & 0 & 22 \\ 0 & 22 & 54 \\ 22 & 54 & 274 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -16 \\ -10 \\ -144 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$ **p(x)=1+2x - x²**

pokračování řešení

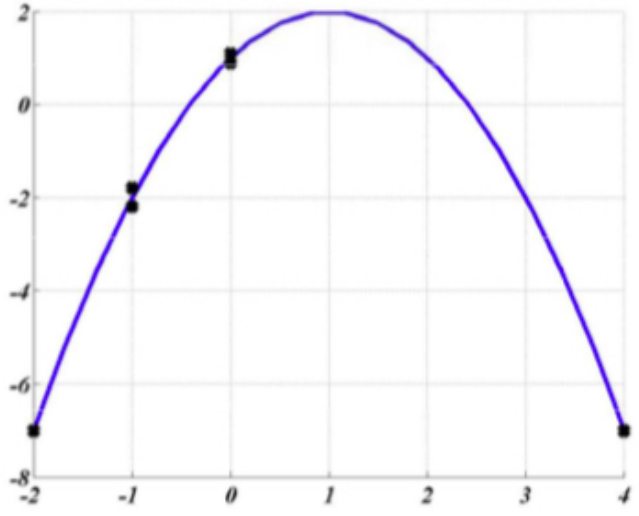
b) K zadané tabulce přidáme hodnoty nalezeného polynomu v zadaných bodech, vypočteme odchylky p(x)-y a jejich druhé mocniny. Součet čísel v posledním řádku je druhá mocnina kvadratické odchylky : δ^2. Výslednou δ získáme odmocněním.

x	-2	-1	-1	0	0	4
y	-7	-1.8	-2.2	1.1	0.9	-7
p(x)	-7	-2	-2	1	1	-7
(p(x)-y)	0	-0.2	0.2	-0.1	0.1	0
$(p(x)-y)^2$	0	0.04	0.04	0.01	0.01	0

$p(x)=1+2x - x^2$

$\delta^2 = 0.1$, $\delta = 0.3162$

c) Zobrazení



Příklady

Pro tabulky dat

- určete polynom zadaného stupně, který ve smyslu metody nejmenších čtverců nejlépe aproximuje data daná tabulkou,
- vypočítejte kvadratickou odchylku,
- výsledky zobrazte.

1. | x_i | -0.5 | -0.5 | 0 | 0 | 1 |
   |---|---|---|---|---|---|
   | y_i | -2.1 | -1.9 | -1.1 | -0.9 | 1 |

   $p_1(x)$

2. | x_i | -2 | -1 | -1 | 0 | 0 | 1 | 1 | 2 |
   |---|---|---|---|---|---|---|---|---|
   | y_i | 9.9 | 4 | 4.1 | 0.1 | 0.2 | -2 | -2.5 | -1.8 |

   $p_2(x)$

3. | x_i | 0 | 0.5 | 1 | 1.5 | 2 |
   |---|---|---|---|---|---|
   | y_i | 1 | 1.5 | 3 | 5.5 | 9 |

   $p_2(x)$

4. | x_i | -2 | -1 | 0 | 1 | 2 |
   |---|---|---|---|---|---|
   | y_i | 7 | 2 | -0.5 | -2 | -0.5 |

   $p_2(x)$

Příklad 1

- *Určení polynomu.*

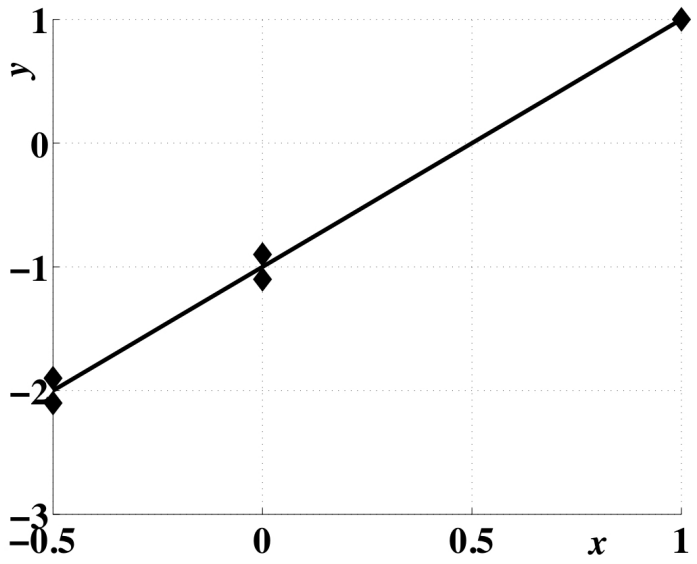
$$\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad p_1^*(x) = -1 + 2x$$

- *Určení kvadratické odchylky.*

x_i	-0.5	-0.5	0	0	1
y_i	-2.1	-1.9	-1.1	-0.9	1
$p(x_i)$	-2	-2	-1	-1	1
$(y(x_i) - p(x_i))^2$	0.01	0.01	0.01	0.01	0

$\delta^2(p_1^*) = 0.04$

$\delta = 0.2$



Příklad 2

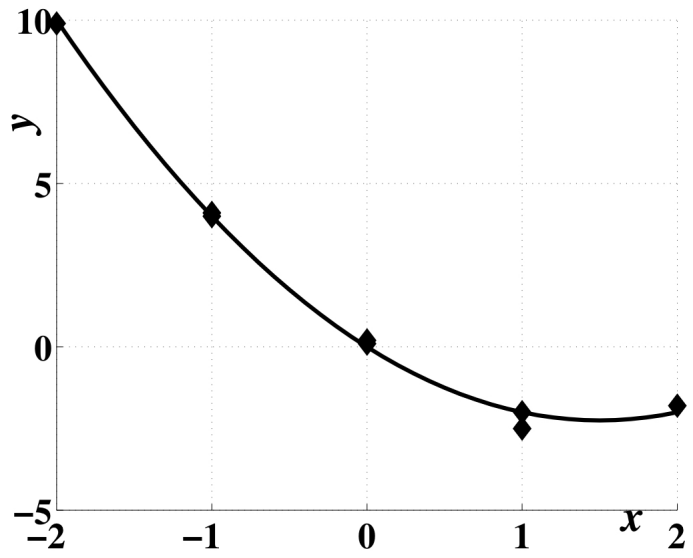
- *Určení polynomu.*

$$\begin{pmatrix} 8 & 0 & 12 \\ 0 & 12 & 0 \\ 12 & 0 & 36 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ -36 \\ 36 \end{pmatrix}, \quad p_2^*(x) = -3x + x^2$$

- *Určení kvadratické odchylky.*

x_i	-2	-1	-1	0	0	1	1	2
y_i	9.9	4	4.1	0.1	0.2	-2	-2.5	-1.8
$p(x_i)$	10	4	4	0	0	-2	-2	-2
$(y(x_i) - p(x_i))^2$	0.01	0	0.01	0.01	0.04	0	0.25	0.04

$\delta^2(p_2^*) = 0.36$, $\delta = 0.6$



Příklad 3

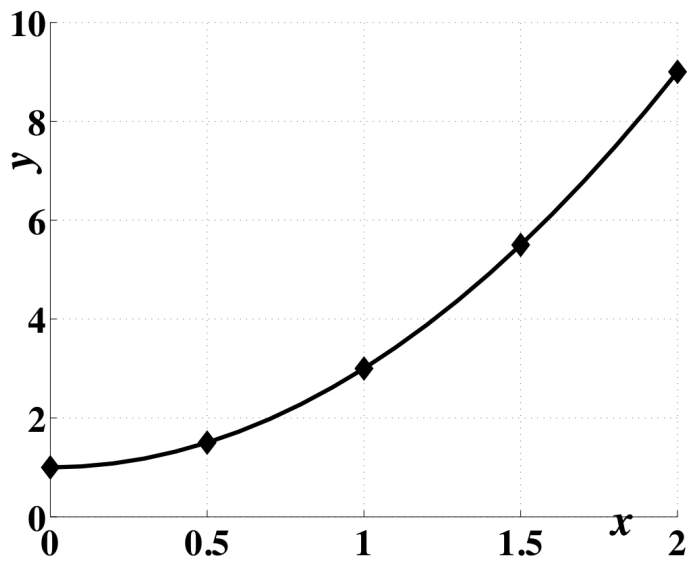
- *Určení polynomu.*

$$\begin{pmatrix} 5 & 5 & 7.5 \\ 5 & 7.5 & 12.5 \\ 7.5 & 12.5 & 22.125 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 30 \\ 51.75 \end{pmatrix}, \quad p_2^*(x) = 1 + 2x^2$$

- *Určení kvadratické odchylky.*

x_i	0	0.5	1	1.5	2
y_i	1	1.5	3	5.5	9
$p(x_i)$	1	1.5	3	5.5	9
$(y(x_i) - p(x_i))^2$	0	0	0	0	0

$$\delta^2(p_2^*) = 0$$
$$\delta = 0$$



Příklad 4

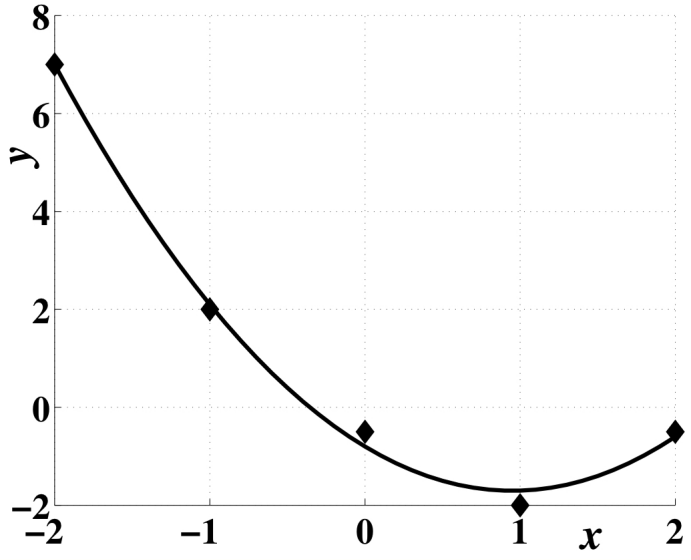
- *Určení polynomu.*

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -19 \\ 26 \end{pmatrix}, \qquad p_2^*(x) = -0.8 - 1.9x + x^2$$

- *Určení kvadratické odchylky.*

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	7	2	-0.5	-2	-0.5
$p(x_i)$	7	2.1	-0.8	-1.7	-0.6
$(y(x_i) - p(x_i))^2$	0	0.01	0.09	0.09	0.01

$$\delta^2(p_2^*) = 0.2$$
$$\delta = \sqrt{0.2}$$



MATLAB: funkce polyfit a polyval

Pro určení koeficientů polynomu můžeme použít funkci **polyfit**.

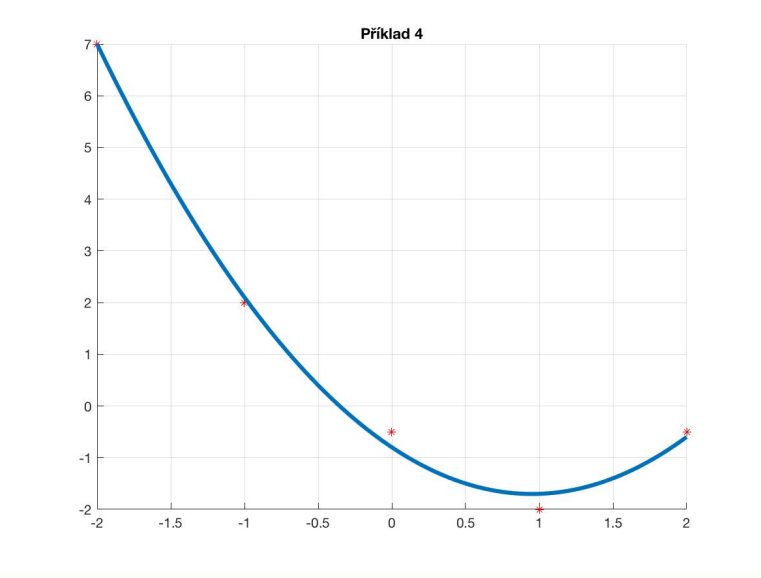
```
p = polyfit(x,y,n)
[p,S] = polyfit(x,y,n)
[p,S,mu] = polyfit(x,y,n)
```

Funkce vrací koeficienty polynomu `p` zadaného stupně `n`, který ve smyslu nejmenších čtverců nejlépe aproximuje tabulku hodnot `x,y`. Koeficienty jsou uspořádány od nejvyšší mocniny, tj. $(a_n, \ldots, a_0)$ vektor `p` obsahuje `n+1` čísel.

V proměnné `S` typu struktura jsou data, ze kterých je možné určit odhad chyby. V proměnné `mu` (vektor o 2 prvcích) jsou uložená data pro výpočet polynomu se středem v bodě 0.

Pro výpočet hodnot polynomu můžeme použít funkci **polyval**.

```
y = polyval(p,x)
[y,delta] = polyval(p,x,S)
y = polyval(p,x,[],mu)
[y,delta] = polyval(p,x,S,mu)
```

Příklad 4 v Matlabu

```
x=[ -2 -1 0 1 2];
y=[7 2 -0.5 -2 -0.5];
n=2;
p = polyfit(x,y,n);
xx=linspace(-2, 2);
yy=polyval(p, xx);
figure()
hold on
grid on
plot(x,y,'r*')
plot(xx,yy,'Linewidth',3)
title('Příklad 4')
```