Metoda najmanjih kvadrata

Predpostavimo da imamo dvije veličine: x i y (na primjer, masa i temperatura, pritisak i zapremina, prva i druga koordinata tačke u ravni itd.).

Tada postoje dvije mogućnosti. Prva je da su te veličine (u određenim uslovima) nezavisne, a druga je da su zavisne.

Nezavisnost znači da uz svaku očitanu vrijednost veličine x teoretski možemo očitati bilo koju vrijednost veličine y (takve su, na primjer, masa zlata i temperatura zlata pri uobičajenim masama i temperaturama; očitana masa zlata ne daje nam nikakvu informaciju o temperaturi).

Zavisnost pak znači da očitana vrijednost veličine x potpuno određuje (ili ograničuje) vrijednost veličine y.

Na primjer, ako se tačka kreće po kružnici u koordinatnoj ravni, onda očitana vrijednost varijable x uopšteno uslovljava dvije moguće vrijednosti varijable y.

Da bi bili još konkretniji zamislimo da se tačka kreće po jediničnoj kružnici sa središtem u ishodištu. Predpostavimo da smo očitali prvu koordinatu i da smo dobili x=0.8.

Tada postoje dvije mogućnosti za vrijednost veličine y: 0.6 i -0.6.

Uopšteno, u ovim uslovima veličina x može poprimiti bilo koju vrijednost između -1 i 1 (uključujući i njih). Isto je s veličinom y. Međutim, te su dvije veličine povezane relacijom: $x^2 + y^2 = 1$ (jednačina kružnice).

Zato je $y = \pm 1 - x^2$ pa svakoj vrijednosti veličine x odgovaraju dvije vrijednosti veličine y (osim ako je x=1 ili x=-1; tada je y=0).

U inženjerstvu je važan slučaj kad **svaka vrijednost veličine x, uslovljava tačno jednu vrijednost veličine y**. To se kraće zapisuje pomoću funkcija:

y = f(x),

gdje je f pravilo prema kojem v zavisi od x.

Najjednostavnija pravila zavisnosti (funkcije)

- 1. linearna zavisnost y = ax + b (to je f(x) := ax + b, a grafički je prikaz te zavisnosti pravac)
- 2. kvadratna zavisnost $y = ax^2+bx+c$ (grafički prikaz je parabola).
- 3. kubna zavisnost $y = ax^3+bx^2+cx+d$
- 4. recipročna zavisnost (obrnuta proporcionalnost) y = a/x (grafički prikaz je hiperbola)
- 4. eksponencijalna zavisnost $y = ae^{bx}$
- 5. potencijska zavisnost y=a·b^x

itd.

Uočite da ima više linearnih zavisnosti (kvadratnih zavisnosti i sl.). Linearna je zavisnost poznata (određena) onda ako znamo realne brojeve a,b (koeficijente) itd. Da naglasimo kako linearna funkcija zavisi od svojih koeficijenata pišemo:

f(x.a.b) := ax + b.

Slično, za kvadratnu funkciju:

 $f(x,a,b,c):=ax^2+bx+c$.

Brojeve a,b odnosno a,b,c zovemo i **parametrima**. To je i uopšteno, a ne samo za linearne ili kvadratne veze. Na primjer,

 $f(x,a,b) := ae^{bx}$

je familija funkcijskih veza (eksponencijalnog tipa) zavisna od parametara a,b.

Zamislimo eksperiment u kojem mijenjamo po volji **zapreminu** gasa, a pri svakoj konkretnoj vrijednosti zapremine očitavamo **pritisak**. Tu je uobičajeno da veličina x bude zapremina (nezavisna veličina, veličina koju po volji mijenjamo) a da veličina y bude pritisak (zavisna veličina, veličina koju dobijemo mjerenjem).

Primjer 1. Predpostavimo da smo mijenjali veličinu x i pri tom mjerili odgovarajuće vrijednosti veličine y. Rezultate zapišimo u obliku tablice.

X	1	2	3	4	5	6
У	2,1	5,1	8,2	11,0	14,5	17,4

Iz prvog pogleda na tablicu uočavamo da se povećavanjem veličine x, povećava i veličina y. Nas zanima pravilo prema kojem se to događa. Brzo uočavamo da smo veličinu x povećavali za jednu mjernu jedinicu. Pri tom se veličina y povećavala redom za: 3.0 pa za 3.1 pa za 2.8 pa za 2.5 pa za 2.9.

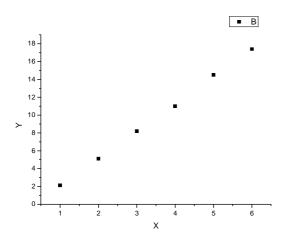
(vidimo da su te promjene, iako različite, ipak prilično bliske).

Kad god pri jednakim promjenama jedne veličine uočimo odprilike jednake promjene druge veličine, moramo posumljati u linearnu vezu među njima. Dakle:

$$y = ax + b$$
.

Drugi način uočavanja linearne veze je grafički. U tu svrhu podatke zapišimo u obliku uređenih parova i ucrtajmo ih u koordinatni sistem u kojem je x horizontalna osa, a y vertikalna:

$$(1; 2.1), (2; 5.1), (3; 8.2), (4; 11.0), (5; 14.5), (6; 17.4)$$



Uočavamo da su tačke odprilike na pravcu. Grafički uvid u oblik zavisnosti možemo provesti i onda ako razmaci među vrijednostima veličine x nisu jednaki (nisu ekvidistantni), dok je takav uvid računanjem promjene veličine y otežan (iako se i on može provesti). Sjetite se da su za crtanje pravca potrebne samo dvije tačke, a mi ih imamo 6. Lako se vidi da ne postoji pravac koji prolazi kroz sve te tačke. Zato od svih pravaca treba izabrati onaj koji *najbolje* prolazi pokraj tih točaka. Kriterij odabiranja tog pravca, tj. pripadajućih koeficijenata a,b daje *metoda najmanjih kvadrata*. Tako je i uopsteno, samo što je onda kad uočena zavisnost odudara od linearne, otežano biranje tipa zavisnosti. Često to i nije problem. Naime tip veze je u mnogim primjerima predviđen pripadajućim teorijama. Na primjer, veza između zapremine i pritiska gasa pri fiksiranoj temperaturi predviđena je u obliku

Van-der- Wallsove jednačine, Peng-Robinsonove jednačine i sl. (a mi samo moramo odrediti parametre koji se pojavljuju u tim jednačinama).

Uopšteno imamo n vrijednosti veličine x i n vrijednosti zavisne veličine y. To zadajemo tablicom:

X	\mathbf{x}_1	\mathbf{x}_2	 X _n
у	\mathbf{y}_1	y ₂	 y _n

Načelo na kojemu se zasniva metoda najmanjih kvadrata.

Metoda najmanjih kvadrata zasniva se na načelu da su najbolji oni parametri a,b za koje je suma kvadrata razlika između mjerenih vrijednosti y_i , i=1,2,...,n i izračunatih vrijednosti $f(x_i, a,b)$ minimalna.

Ima više matematičkih razloga za prihvaćanje ovog načela, a tu ih nećemo spominjati. Napomenimo da nije dobro razmatrati zbir razlika eksperimentalnih i teoretskih podataka jer se pozitivne i negativne razlike (**odstupanja**) poništavaju. Da bi uzeli u obzir i pozitivna i negativna odstupanja, matematičari su na početku razmatrali apsolutne vrijednosti razlika i tražili da njihova suma bude minimalna. To nije loš kriterij, ali su apsolutne vrijednosti nepogodne jer se ne mogu uvijek derivirati. Taj, ali i neki drugi razlozi, prevagnuli su u korist sume kvadrata.

Postupak određivanja parametara metodom najmanjih kvadrata.

Označimo i-to odstupanje kao $D_i := y_i - f(x_i, a, b)$

To je razlika izmedju mjerene (eksperimantalne) vrijednosti yi i teoretske vrijednosti $f(x_i, a, b)$, tj. vrijednosti funkcije f(x, a, b) za $x = x_i$.

Prema metodi najmanjih kvadrata, parametre odredjujemo tako da suma

$$D_1^2 + D_2^2 + \dots + D_n^2$$

bude minimalna.

Taj izraz zavisi od nepoznatih parametrima a, b. Zato pišemo:

$$F(a,b) := [y_1 - f(x_1, a, b)]^2 + [y_2 - f(x_2, a, b)]^2 + \dots + [y_n - f(x_n, a, b)]^2$$
ili kraće,

$$F(a,b) := \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i, a, b)]^2$$

(*F* zavisi od vrijednosti x_i, y_i, za i=1,2,...n, međutim te su vrijednosti poznate). Funkcija F često se naziva **funkcija cilja** (uopšteno, funkcija cilja može biti i neka druga pogodna funkcija, na primjer, odstupanja se mogu množiti nekim težinama).

Treba odrediti parametre a,b u kojima funkcija cilja F postiže minimum.

Uslovi lokalnog ekstrema (pomoću parcijalnih derivacija) za funkciju F su:

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0$$
 i $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$

Dakle,

$$\frac{\partial (\sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i, a, b)]^2)}{\partial a} = 0 \quad i \quad \frac{\partial (\sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i, a, b)]^2)}{\partial b} = 0$$

Koristeći osobine izvoda zbira (izvod zbira je zbir izvoda) dobijamo:

$$\sum_{i=1}^{n} 2[y_i - f(x_i, a, b)] \cdot \left(-\frac{\partial f(x_i, a, b)}{\partial a}\right) = 0 \quad i \quad \sum_{i=1}^{n} 2[y_i - f(x_i, a, b)] \cdot \left(-\frac{\partial f(x_i, a, b)}{\partial b}\right) = 0$$

Nakon sređivanja dobijamo sistem dvije jednačine sa dvije nepoznate a i b.

$$\sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i, a, b)] \cdot \frac{\partial f(x_i, a, b)}{\partial a} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i, a, b)] \cdot \frac{\partial f(x_i, a, b)}{\partial b} = 0 \quad (*)$$

Iz tog sistema odredjujemo nepoznate parametre a, b. Uopšteno sistem može imati više rješenja. Takođe, može se dogoditi da neka rješenja odgovaraju maksimumu ili sedlastoj tački, a ne minimumu. Može se dogoditi i to da neka rješenja nemaju fizička značenja. Na sreću, u najvažnijem slučaju, slučaju linearnih veza i njima srodnih, rješenje tog sistema je jedinstveno, tj. parametri se mogu odrediti jednoznačno.

Linearna regresija.

Određivanje parametara a,b za linearnu vezu (određivanje regresijskog pravca).

Tu je f(x,a,b):=ax+b, pa je

$$f(x_i,a,b) = ax_i + b$$

$$\frac{\partial f(x_i, a, b)}{\partial a} = x_i \quad i \quad \frac{\partial (x_i, a, b)}{\partial b} = 1$$

Ako to uvrstimo u sistem (*), dobijamo

$$\sum_{i=1}^{n} [y_i - ax_i - b] \cdot x_i = 0$$
$$\sum_{i=1}^{n} [y_i - ax_i - b] \cdot 1 = 0$$

nakon raspisivanja dobijemo sistem dviju linearnih jednačina sa dvije nepoznate:

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) \cdot a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \cdot b = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \cdot a + n \cdot b = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

U tom su sistemu parametri a,b nepoznanice, a brojevi

 $\sum_{i=1}^n x_i^2$, $\sum_{i=1}^n x_i$, n, $\sum_{i=1}^n x_i y_i$, $\sum_{i=1}^n y_i$ koeficijenti sistema (oni su poznati, jer se dobiju iz mjernih podataka).

Rješavanjem tog linearnog sistema dobijemo konačne formule (indekse ispuštamo!):

$$a = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \cdot \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$b = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \cdot \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (**)$$

Dobijeni pravac sa jednačinom y = ax+b zove se **regresijski pravac**.

Primjer 2. Procijenimo oblik veze, odredimo parametre i jednačinu regresijskog pravca ako je:

X	0	1	2	3	4
У	6	3	1	-2	-3

Tačke (0,6), (1,3), (2,1), (3,-2), (4,-3) predstavimo u koordinatnom sistemu.

Vidimo da su tačke približno na pravcu, pa tražimo linearnu vezu, tj. vezu oblika y=ax+b. Unaprijed vidimo da je a<0 i da je $b\approx 6$. Da bismo lakše računali a,b iz (**), izradimo ovakvu tablicu (u posljednjoj su koloni zbirovi elemenata u odgovarajućem redu):

x_i	0	1	2	3	4	10
y_i	6	3	1	-2	-3	5
x_i^2	0	1	4	9	16	30
$x_i y_i$	0	3	2	-6	-12	-13

Tu je jos n=5, pa iz (**) dobijemo:

$$a = \frac{5 \cdot (-13) - 10 \cdot 5}{5 \cdot 30 - 10^2} = -2,3$$

$$b = \frac{30 \cdot 5 - 10 \cdot (-13)}{5 \cdot 30 - 10^2} = 5,6$$

Dakle, tražena je linearna veza: y = -2.3 x + 5.6 (to je jednačina regresijskog pravca).

Napomena. Za veliki broj podataka provođenje metode najmanjih kvadrata može biti mukotrpno. Zato je dobro naučiti primjenu grafičkog kalkulatora ili nekog dostupnog kompjutorskog programa. Na primjer, naredba LinReg na grafičkom kalkulatoru, za podatke iz Primjera 1. daje nam (zaokruženo na tri decimale) a=3.071 i b = -1.033. Dobijena linearna veza može nam poslužiti za procjenu (približno određivanje) vrijednosti veličine y za vrijednosti x unutar područja mjerenja (**interpolacija**) ili izvan njega (**ekstrapolacija**)

Veze koje se svode na linearne.

U primjeni se često pojavljuju nelinearne veze medju dvjema veličinama koje se, promjenom mjerne skale, svode na linearne, na primjer:

1.
$$y = a \cdot x^b$$
,

je nelinearna veza, a svodi se na linearnu logaritmiranjem:

$$\log y = b \cdot \log x + \log a$$

(tu su log x i log y linearno povezane),

$$2. y = a \cdot b^x,$$

svodi se na linearnu

 $\log y = \log b \cdot x + \log a$

(tu su x i log y linearno povezane),

$$3. y = \frac{a}{b+x}$$

svodi se na linearni preko $\frac{1}{y} = \frac{b+x}{a}$, tj. $\frac{1}{y} = \frac{1}{a} \cdot x + \frac{b}{a}$

(tu su y i x linearno povezani), itd.