Taivaanmekaniikka
Lineaarinen pienimmän neliösumman sovitus

Anni Järvenpää

16. lokakuuta 2015

1 Lineaarinen pienimmän neliösumman menetelmä

Lineaarisen pienimmän neliösumman menetelmän tavoitteena on sovittaa n muotoa (x_i, y_i) olevasta pisteestä koostuvaan havaintoaineistoon suora, joka edustaa pisteitä mahdollisimman hyvin. Tyypillisesti sovituksen hyvyyttä mitataan pisteiden vertikaalisena etäisyytenä $|e|$ sovitetusta suorasta (merkitty sinisellä kuvassa 1). Pienimmän neliösumman menetelmässä näiden vertikaalisten poikkeamien neliöiden summa pyritään minimoimaan, siis etsimään funktion $f(x) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2 + ... + \beta_{m+1} x^m$ kertoimet $\beta_1 ... \beta_{m+1}$ siten, että virhe S on mahdollisimman pieni, kun S on määritelty yhtälön 1 mukaisesti. [3]

$$S = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 \tag{1}$$

Virheen minimiarvot löytyvät derivaatan nollakohdista:

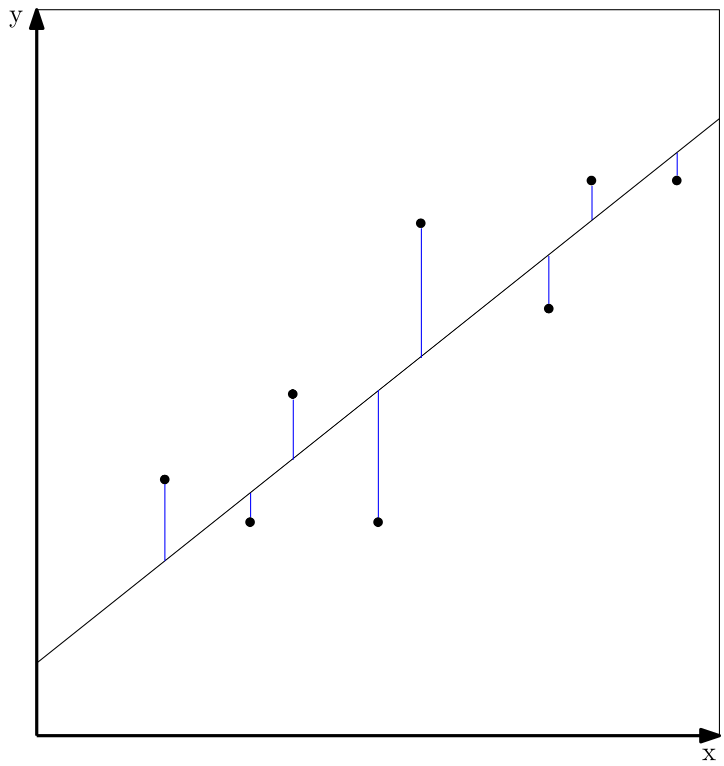
$$\begin{aligned}
\frac{\partial R^2}{\partial \beta_1} &= -2 \sum_{i=1}^{n} [y - (\beta_1 + \beta_2 x + ... + \beta_{m+1} x^m)] = 0 \\
\frac{\partial R^2}{\partial \beta_2} &= -2 \sum_{i=1}^{n} [y - (\beta_1 + \beta_2 x + ... + \beta_{m+1} x^m)] = 0 \\
&\vdots \\
\frac{\partial R^2}{\partial \beta_{m+1}} &= -2 \sum_{i=1}^{n} [y - (\beta_1 + \beta_2 x + ... + \beta_{m+1} x^m)] = 0
\end{aligned}$$

Näistä saadaan edelleen

$$\begin{aligned}
\beta_1 n + \beta_2 \sum_{i=1}^{n} x_i + ... + \beta_{m+1} \sum_{i=1}^{n} x_i^m &= \sum_{i=1}^{n} y_i \\
\beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + ... + \beta_{m+1} \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
\beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^m + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} + ... + \beta_{m+1} \sum_{i=1}^{n} x_i^{2m} &= \sum_{i=1}^{n} x_i^m y_i
\end{aligned}$$

eli matriisimuodossa

$$\begin{bmatrix}
n & \sum\limits_{n=1}^{n} x_i & ... & \sum\limits_{n=1}^{n} x_i^m \\
\sum\limits_{n=1}^{n} x_i & \sum\limits_{n=1}^{n} x_i^2 & ... & \sum\limits_{n=1}^{n} x_i^{m+1} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\sum\limits_{n=1}^{n} x_i^m & \sum\limits_{n=1}^{n} x_i^{m+1} & ... & \sum\limits_{n=1}^{n} x_i^{2m}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \\ \beta_{m+1} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n} y_1 \\ \sum\limits_{i=1}^{n} y_2 \\ \vdots \\ \sum\limits_{i=1}^{n} y_m \end{bmatrix}$$



Kuva 1: Pistejoukko, johon sovitettu suora mustalla ja pisteiden vertikaaliset etäisyydet suorasta pisteinä.

Voidaan myös huomata, että yhtälöön 1 voidaan päästä hyödyntämällä Vandermonden matriisia [2]

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} 1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m^2 & \dots & x_m^n \end{bmatrix} \tag{2}$$

ja kirjoittamalla tämän avulla

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m^2 & \dots & x_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}. \tag{3}$$

Nyt voidaan kertoa edellinen yhtälö puolittain vasemmalta Vandermonden matriisin transpoosilla $\boldsymbol{V}^T$, jolloin yhtälö saadaan seuraavaan muotoon:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_m^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^n & x_2^n & \dots & x_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m^2 & \dots & x_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_m^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^n & x_2^n & \dots & x_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{4}$$

Viitteet

[1] Least squares fitting–polynomial. http://mathworld.wolfram.com/LeastSquaresFittingPolynomial.html. Luettu: 15.10.2015.

[2] Vandermonde matrix. http://mathworld.wolfram.com/VandermondeMatrix.html. Luettu: 16.10.2015.

[3] Peter J. Bickel. *Mathematical statistics: basic ideas and selected topics.* Holden-Day, Oakland, CA, 1977.

A Liittyvä liite.

Liian laaja leipätekstiin.