Mazāko kvadrātu metode ir populāra regresijas analīzes metode, kas visbiežāk tiek pielietota, lai veiktu līknes piemeklēsanu dotiem punktiem. Līknes piemeklēšana tiek veikta, minimizējot distanču kvadrātu summu starp dotajiem punktiem un meklēto līkni.

Dots:

– n mezglu punkti ($n \geq 4$), apzīmēti ar p_i, sakārtoti matricā $\mathbf{P}$.

– katram punktam p_i parametrizācijas rezultātā piemeklēta t vērtība, apzīmēta ar s_i.

Vēlamies caur dotajiem punktiem izvilkt tuvāko trešās pakāpes Bezjē līkni $B(t)$, tas ir, atrast tādus līknes kontrolpunktus $\mathbf{c}_0$, $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{c}_2$, $\mathbf{c}_3$, sakārtotus matricā $\mathbf{C}$, lai distances starp punktiem p_i un līkni, ko raksturo minētie kontrolpunti, būtu pēc iespējas mazākas.

Bezjē līkne ir parametriska, savukārt mezgli tiek uzdoti ar koordinātām. Lai saistītu mezglu punktus ar līkni, tiek izmantotas parametrizācijas metodes. Arī distances d_i meklēsim starp katru punktu un tā piemeklēto s_i vērtību:

$$d_i = |(p_i - B(s_i))| = \sqrt{(p_i - B(s_i))^2}$$

Lai izvairītos no kvadrātsaknēm un moduļiem, apskatīsim distanču kvadrātus d_i^2:

$$d_i^2 = (p_i - B(s_i))^2$$

Vēlamies atrast tuvāko Bezjē līkni – tādu, kurai distanču d_i summa ir pēc iespējas mazāka:

$$\sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (p_i - B(s_i))^2$$

Pārrakstam minēto summu kā funkciju $\mathbf{D}$, kas atkarīga no Bezjē līknes kontrolpunktiem $\mathbf{c}_0$, $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{c}_2$, $\mathbf{c}_3$:

$$D(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3, \mathbf{c}_4) = \sum_{i=1}^{n} (p_i - B(s_i))^2$$

Izmantojot matricu pierakstu Bezjē līknēm, kur $\star 2$ apzīmē, ka katrs matricas elements jākāpina kvadrātā, iegūstam:

$$D(\mathbf{C}) = (\mathbf{P} - \mathbf{SMC})^{\star 2}$$
$$D(\mathbf{C}) = (\mathbf{P} - \mathbf{SMC})^T(\mathbf{P} - \mathbf{SMC})$$

Funkcijai $D(\mathbf{C})$ vēlamies atrast mazāko vērtību, t. i. funkcijas minimumu. Lai to izdarītu, jāatvasina funkcija.

Varam ievērot, ka matrica $(\mathbf{P} - \mathbf{SMC})$ ir ar dimensijām $n \times 1$, tātad tas ir vektors. Divu vektoru $\mathbf{a}$ un $\mathbf{b}$ skalārais reizinājums $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ uzrakstāms kā matricu reizinājums $\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b}$. Tāpāt $(\mathbf{P} - \mathbf{SMC})^T(\mathbf{P} - \mathbf{SMC})$ ir vektora $(\mathbf{P} - \mathbf{SMC})$ skalārais reizinājums pašam ar sevi:

$$D(\mathbf{C}) = \langle \mathbf{P} - \mathbf{SMC}, \mathbf{P} - \mathbf{SMC} \rangle$$

Turklāt, vektoriem reālo skaitļu laukos darbojas distributīvais un komutatīvais likums, tātad:

$$D(\mathbf{C}) = \langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle - 2\langle \mathbf{P}, \mathbf{SMC} \rangle + \langle \mathbf{SMC}, \mathbf{SMC} \rangle$$

Šo summu var atvasināt pa saskaitājamiem.

1. $\langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle$ atvasinājums:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{P}, \mathbf{P} \rangle}{\partial \mathbf{C}} = 0 \qquad\qquad\qquad\qquad \text{, jo } \mathbf{P} \text{ nesatur } \mathbf{C}$$

2. $\langle \mathbf{P}, \mathbf{SMC} \rangle$ atvasinājums:

   Varam ievērot, ka

$$\langle \mathbf{P}, \mathbf{SMC} \rangle = \mathbf{P}^T\mathbf{SMC} = \langle \mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P}, \mathbf{C} \rangle$$

   kā arī vektoriem $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$

$$\frac{\partial \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle}{\partial x_i} = \frac{\partial (y_1x_1 + y_2x_2 + ... + y_ix_i + ... + y_nx_n)}{\partial x_i} = y_i$$

   Izmantojot ievērotās sakarības, iegūstam:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{P}, \mathbf{SMC} \rangle}{\partial c_i} = \frac{\partial \langle \mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P}, \mathbf{C} \rangle}{\partial c_i} = \mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{P}$$

3. $\langle \mathbf{SMC}, \mathbf{SMC} \rangle$ atvasinājums:

   Varam ievērot, ka

$$\langle \mathbf{SMC}, \mathbf{SMC} \rangle = \mathbf{C}^T\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{SMC} = \langle \mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{SMC}, \mathbf{C} \rangle$$

   kā arī vektoram $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ un matricai $\mathbf{A} \subset \mathbb{R}^{n \times n}$

$$\frac{\partial \langle \mathbf{Ax}, \mathbf{x} \rangle}{\partial x_i} = (\mathbf{A}_i + \mathbf{A}_i^T)\mathbf{x}$$

   Pilnais izvedums šajai identitātei redzams 2.1. pielikumā.

   Izmantojot minēto identitāti un veicot ekvivalentus pārveidojumus, iegūstam:

$$\begin{aligned}
\tfrac{\partial}{\partial \mathbf{c}_i} \langle \mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{SMC}, \mathbf{C} \rangle &= (\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{M} + (\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{M})^T)\mathbf{C} \\
&= (\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{M} + \mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{M})\mathbf{C} \\
&= 2(\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{M})\mathbf{C} \\
&= 2\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{MC}
\end{aligned}$$

   Tātad esam ieguvuši trešā funkcijas saskaitāmā atvasinājumu:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{SMC}, \mathbf{SMC} \rangle}{\partial \mathbf{c}_i} = 2\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{MC}$$

Apvienojot saskaitāmo parciālos atvasinājumus, iegūstam

$$\frac{\partial D}{\partial \mathbf{c}_i} = -2\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{P} + 2\mathbf{M}^T\mathbf{S}_i^T\mathbf{S}_i\mathbf{M}\mathbf{C}$$

Savukārt apvienojot i-tos locekļus, iegūstam

$$\frac{\partial D}{\partial \mathbf{C}} = -2\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P} + 2\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{C}$$

Lai atrastu funkcijas $D(\mathbf{C})$ minimumu, pielīdzinām tās atvasinājumu nullei.

$$\begin{aligned}
-2\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P} + 2\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{C} &= 0 \\
\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P} - \mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{C} &= 0 \\
\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{C} &= \mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P} \\
\mathbf{C} &= (\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{S}\mathbf{M})^{-1}\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P}
\end{aligned}$$

$\mathbf{M}$ - trīsstūra matrica, kurai uz diagonāles ir četri nenulles elementi $\Rightarrow rank(\mathbf{M}) \geq 4$.

$$\left.\begin{aligned} rank(\mathbf{M}) &\geq 4 \\ \mathbf{M} &\subset \mathbb{R}^{4\times 4} \end{aligned}\right\} \Rightarrow rank(\mathbf{M}) = 4$$

Matricai $\mathbf{M}$ ir pilns rangs, tātad tā ir inversējama. Tāpat arī matrica $\mathbf{M}^T$ ir inversējama, tāpēc varam no iekavām iznest minētās matricas.

$$\begin{aligned}
\mathbf{C} &= \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{S}^T\mathbf{S})^{-1}(\mathbf{M}^T)^{-1}\mathbf{M}^T\mathbf{S}^T\mathbf{P} \\
\mathbf{C} &= \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{S}^T\mathbf{S})^{-1}\mathbf{I}\mathbf{S}^T\mathbf{P} \\
\mathbf{C} &= \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{S}^T\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{P}
\end{aligned}$$

Esam atraduši kritisko punktu. Varam ievērot, ka funkcijai neeksistē maksimums - ja kontrolpunktus novieto patvaļīgi tālu no dotajiem mezglu punktiem, funkcijas $D(\mathbf{C})$vērība tiecas uz bezgalību. Secinām, ka atrastais ekstrēms ir minimums.

Tātad, izmantojot mazāko kvadrātu metodi, punktiem $\mathbf{P}$ tuvāko Bezjē līkni definē kontrolpunkti $\mathbf{C}$, kas izsakāmi kā

$$\mathbf{C} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{S}^T\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{P}$$