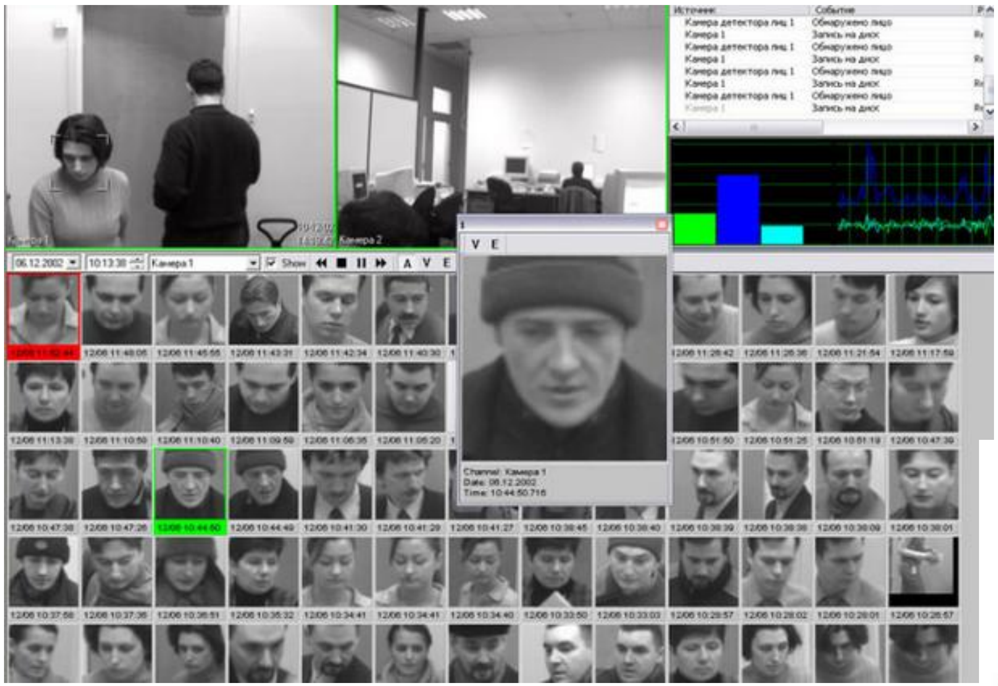
Аппроксимация по методу наименьших квадратов

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

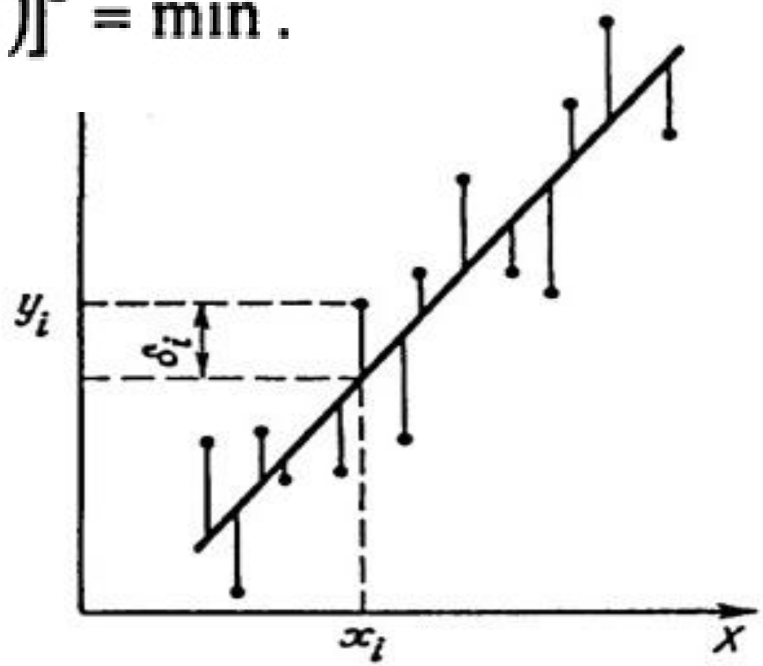
- -- в задачах эконометрики, например, для определения кривых спроса и предложения и состояния рыночного равновесия
- -- в задачах фильтрации, когда необходимо отделить полезный сигнал от наложенного на него шума
- -- для решения линейных дифференциально-алгебраических уравнений
- -- для поиска по лицам, картам, отпечаткам пальцев
- -- для обучения нейронных сетей
- -- при исследовании процессов, протекающих в живых системах


Источник
Событие
Камера детектора лиц 1
Обнаружено лицо
Камера 1
Запись на диск
Камера детектора лиц 1
Обнаружено лицо
Камера 1
Запись на диск
Камера детектора лиц 1
Обнаружено лицо
Камера 1
Запись на диск
Камера детектора лиц 1
Обнаружено лицо
Камера 1
Запись на диск
Show
Channel: Камера 1
Date: 06.12.2002
Time: 10:44:50.716

Аппроксимация экспериментальных данных

Метод наименьших квадратов (МНК), идея которого принадлежит А.Лежандру, а теоретическое обоснование К.Гауссу. В соответствии с этим методом, оценки параметров a_i определяют из условия минимума суммы квадратов отклонений измеренных значений y_i от соответствующей ординаты рассмотренной кривой

$$\delta^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - f(x_i;\, a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m) \right]^2 = \min .$$



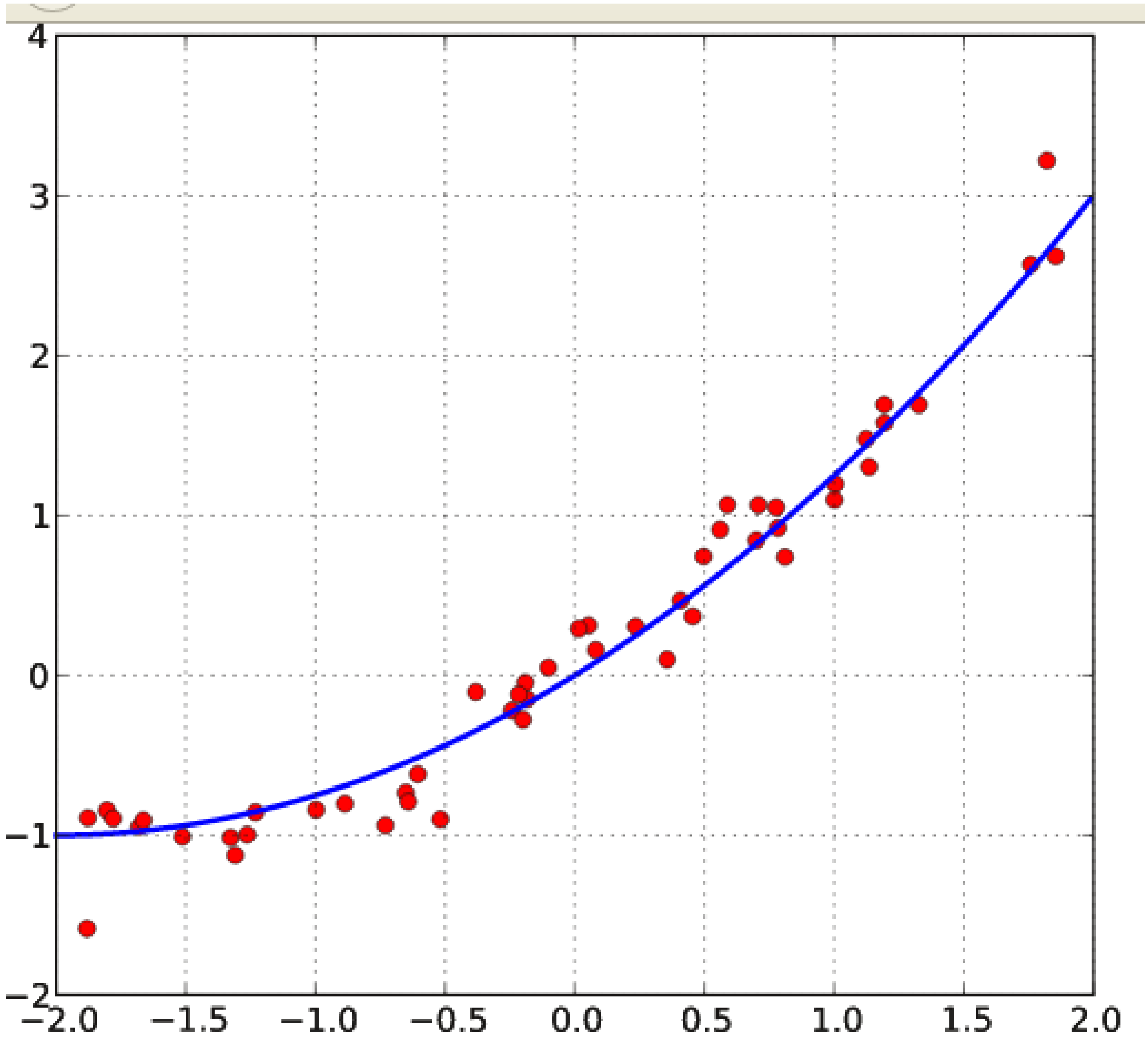
Теорема Вейерштрасса.

Если функция f(x) непрерывна на отрезке [a; b], то для любого **ε** > 0 существует многочлен **ф(x)** степени **m** с коэффициентами

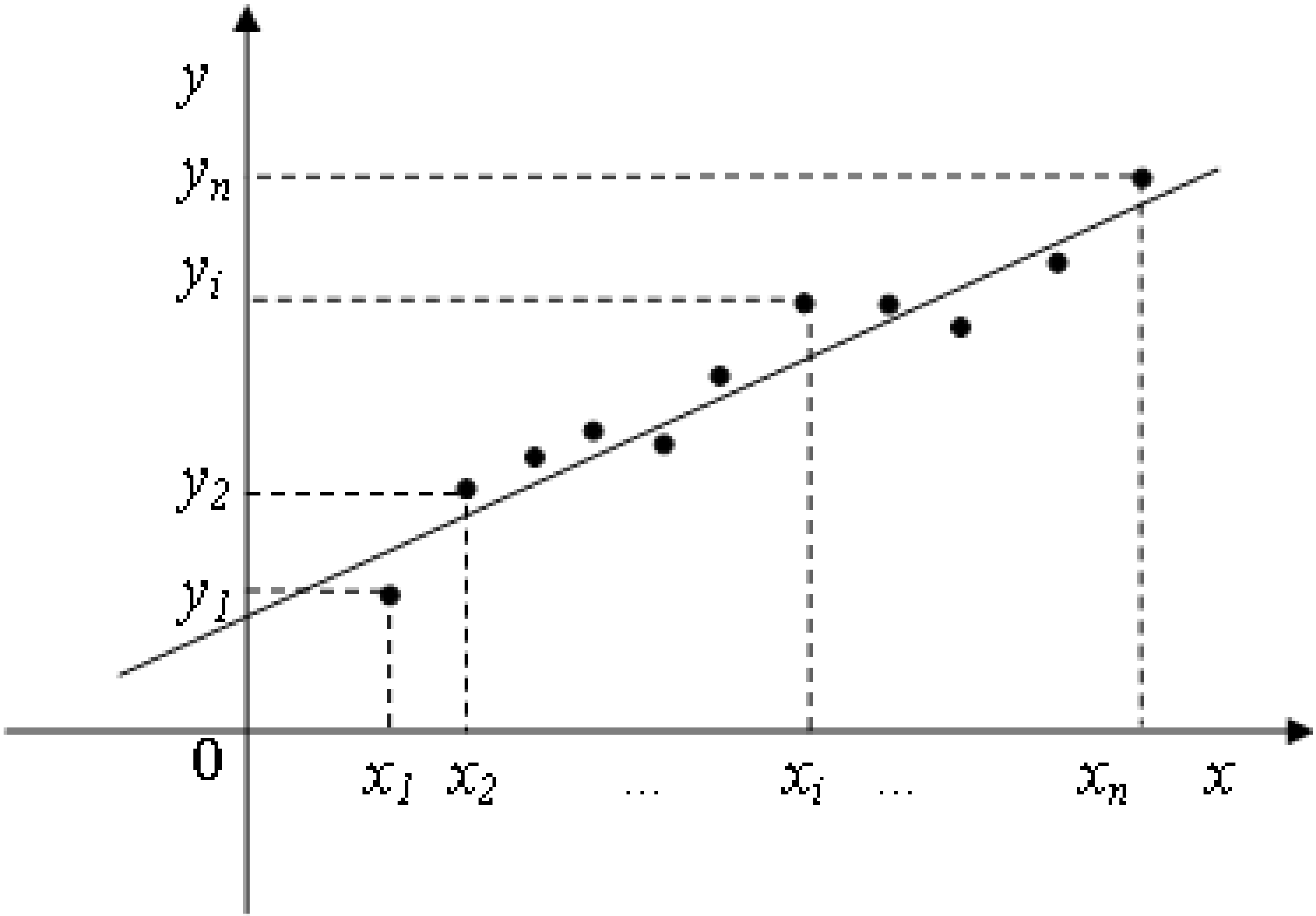
a = [a0 , a1 , a2 , …, am],

абсолютное отклонение которого от функции **f(x)** на отрезке [a; b] меньше **ε**.

- Теорема говорит о том, что любую функцию можно как угодно точно аппроксимировать многочленом, но она ничего не говорит ни о способах нахождения этого многочлена, ни о количестве точек, ни об их расположении.
- Многочлены не являются единственным способом аппроксимации.
- Иногда удобно использовать тригонометрические, логарифмические и другие функции.



4
3
2
1
0
−1
−2
−2.0
−1.5
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0


y
y_n
y_i
y_2
y_1
0
x_1
x_2
…
x_i
…
x_n
x

Критерий метода наименьших квадратов

Основной мерой отклонения аппроксимирующей функции ф(x) от исходной функции f(x) при аппроксимации является величина, равная сумме квадратов разностей между значениями аппроксимирующей и исходной функций

$$\sum_{i=1}^{n} (\varphi(\mathrm{x})_i - f(x_i))^2 \to \min$$

Суть метода

- Пусть необходимо установить функциональную зависимость между двумя эмпирическими данными *x* и *y*, значения которых занесены в следующую таблицу:

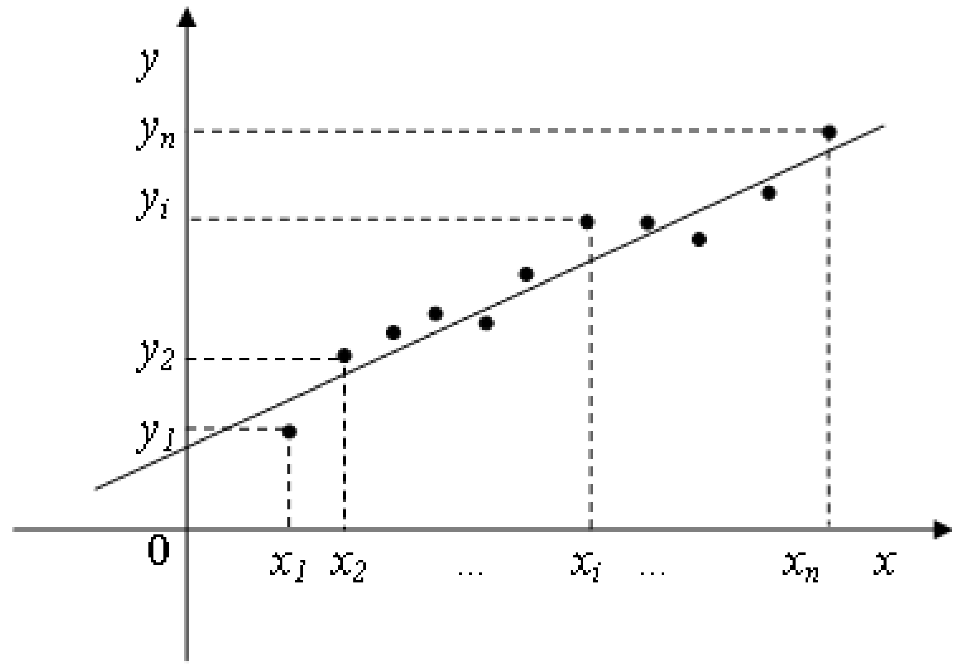
x	x_1	x_2	$\dots$	x_i	$\dots$	x_n
y	y_1	y_2	$\dots$	y_i	$\dots$	y_n

Данные о количестве пропусков занятий (*x*) студентом в течение учебного семестра и результатах (*y*, %) написания экзаменационного теста.

x_i,	**1**	**2**	**4**	**6**	**8**	**10**	**12**	**13**	**15**	**17**
y_i	**85**	**75**	**70**	**60**	**50**	**40**	**20**	**15**	**10**	**5**

Суть метода

- Если точки расположены так, то можно предположить, что между *x* и *y* существует линейная зависимость, выражающаяся формулой:



$$y = f(x) = ax + b$$

Суть метода

- Так как точки не обязательно лежат на одной прямой, то, подставляя вместо *x* и *y* значения координат этих точек в выражение

$$y-(ax+b)$$

получаем равенства:

$$\left.\begin{aligned} y_1-(ax_1+b)&=\delta_1 \\ y_2-(ax_2+b)&=\delta_2 \\ y_n-(ax_n+b)&=\delta_n \end{aligned}\right\} \quad \textbf{погрешности}$$

Суть метода

- Сущность метода наименьших квадратов заключается в подборе коэффициентов *a* и *b* таким образом, чтобы сумма квадратов погрешностей была как можно меньшей:

$$S = \delta_1^2 + \delta_2^2 + ... + \delta_n^2 = \sum_{i=1}^{n} \delta_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2 \quad \longrightarrow \quad \mathbf{min}$$

Суть метода

- В равенстве находится сумма именно квадратов погрешностей, так как в случае суммирования самих погрешностей сумма может оказаться малой за счет разных знаков погрешностей.
- Так как в равенстве x_i и y_i – заданные числа, а и *b* – неизвестные, то сумму *S* можно рассмотреть как функцию двух переменных *a* и *b*:

$$S = S(a,b)$$

Необходимое условие существования экстремума функции двух переменных:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial a} = 0, \\ \dfrac{\partial S}{\partial b} = 0; \end{cases}$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))(-x_i) = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))\,x_i,$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))(-1) = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b)).$$

Приравнивая эти частные производные к нулю, получаем линейную систему двух уравнений с двумя переменными *a* и *b*:

$$\begin{cases} -2\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))\,x_i=0, \\ -2\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))=0. \end{cases}$$

$$-\sum_{i=1}^{n}y_i x_i+a\sum_{i=1}^{n}x_i^2+b\sum_{i=1}^{n}x_i=0$$

$$-\sum_{i=1}^{n}y_i+a\sum_{i=1}^{n}x_i+bn=0$$

Система называется *нормальной системой*.

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i, \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum_{i=1}^{n} y_i. \end{cases}$$

$$a = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i\, y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2},$$

$$b = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i\right).$$

Алгоритм

- 1. Ввести два одномерных массива x и y перечислением элементов
- 2. Вычислить суммы (какие?)
- 3. Вычислить a и b по формулам
- 4. Создать одномерный массив аргумента аппроксимирующей функции, например, x1, содержащий числа в пределах изменения x, но их количество должно быть гораздо больше (50-100 чисел)

- 5. Рассчитать значения аппроксимирующей функции y1 для каждого значения x1
- 6. Построить график исходной функции в виде точек, не соединенные отрезками прямых и помеченные маркером и график аппроксимирующей функции

Подбор параметров параболы второго порядка методом наименьших квадратов

В опыте зарегистрированы значения (x_i, y_i), i = 1, 2, 3, …, n, сведенные в таблицу. Требуется методом наименьших квадратов подобрать параметры квадратичной функции-параболы второго порядка

$$y = ax^2 + bx + c,$$

соответствующей наблюдаемой экспериментальной зависимости.

Итак, эмпирическую формулу ищем в виде

$$y = f(x, a, b, c).$$

Для отклонений имеем выражения

$$\Delta y_i = (a + bx_i + c) - y_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

отсюда

$$\sum_{i=1}^{n} (\Delta y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[(ax_i^2 + bx_i + c) - y_i \right]^2 = S(a,b,c).$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\Delta y_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[\left(a x_i^2 + b x_i + c\right) - y_i\right]^2 = S(a,b,c).$$

Подбор параметров параболы второго порядка методом наименьших квадратов

Необходимые условия экстремума дают

$$\left.\begin{aligned}
\frac{\partial S(a,b,c)}{\partial a} &= 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2\left[(ax_i^2+bx_i+c)-y_i\right]=0,\\
\frac{\partial S(a,b,c)}{\partial b} &= 2\sum_{i=1}^{n} x_i\left[(ax_i^2+bx_i+c)-y_i\right]=0,\\
\frac{\partial S(a,b,c)}{\partial c} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[(ax_i^2+bx_i+c)-y_i\right]=0.
\end{aligned}\right\}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)_{x_i}=x_i^2,\quad \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)_{x_i}=x_i,\quad \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{x_i}=1.$$

Подбор параметров параболы второго порядка методом наименьших квадратов

Аналогично тому, как это сделано для аппроксимации прямой, получим систему нормальных уравнений:

$$\left.\begin{aligned}
&a\sum_{i=1}^{n} x_i^4 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i,\\
&a\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,\\
&a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i + cn = \sum_{i=1}^{n} y_i.
\end{aligned}\right\}$$

Решая систему, находим искомые коэффициенты *a*, *b*, *c*, и тем самым определяем искомую эмпирическую функцию.

Алгоритм

- 1. Ввести два одномерных массива x и y перечислением элементов
- 2. Вычислить суммы (какие?)
- 3. Решить систему уравнений матричным методом (суть метода?)

- Для этого нужно создать матрицу коэффициентов перед неизвестными A и вектор свободных членов B
- Вычислить обратную матрицу Z
- Вычислить вектор корней системы (a, b, c) матричным умножением Z на B

- 4. Создать одномерный массив аргумента аппроксимирующей функции, например, x1, содержащий числа в пределах изменения x, но их количество должно быть гораздо больше (50-100 чисел)
- 5. Рассчитать значения аппроксимирующей функции y1 для каждого значения x1
- 6. Построить график исходной функции в виде точек, не соединенные отрезками прямых и помеченные маркером и график аппроксимирующей функции

numpy.linalg

Описание подмодуля

import numpy. linalg as lnp

или

from numpy. linalg import *

dot(a,b) - матричное умножение

inv(m) - нахождение обратной матрицы

- Пример умножения с использованием np.dot

```
A=np.array([[5.,3.,-7.],[11.,8.,6.]])
B=np.array([2.,4.,7.])
W=np.dot(A,B)
print(W)
print(A)
print(B)
```

```
[-27.  96.]

[[ 5.  3. -7.]
 [11.  8.  6.]]
[2. 4. 7.]
```

Фрагмент программы вычисления обратной матрицы

```
import numpy as np
from numpy.linalg import*
a = np.array([[4, 2],[3, 5]])
b=inv(a)
print(a)
print(b)
```

Командное окно

```
[[4 2]
 [3 5]]
[[ 0.35714286  -0.14285714]
 [-0.21428571   0.28571429]]
```

$$f(x) := b0\cdot x^3 + b1\cdot x^2 + b2\cdot x + b3$$

$$\sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^6\cdot b0 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^5\cdot b1 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^4\cdot b2 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^3\cdot b3 = \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^3\cdot y_i$$

$$\sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^5\cdot b0 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^4\cdot b1 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^3\cdot b2 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^1\cdot b3 = \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^2\cdot y_i$$

$$\sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^4\cdot b0 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^3\cdot b1 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^2\cdot b2 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)\cdot b3 = \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)\cdot y_i$$

$$\sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^3\cdot b0 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)^2\cdot b1 + \sum_{i=0}^{8}\left(x_i\right)\cdot b2 + 10\cdot b3 = \sum_{i=0}^{8} y_i$$

$$F = \sum_{i=0}^{n} \left(\varphi(x_i) - y_i \right)^2 \rightarrow Min$$

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 \cdot x + \ldots + a_k \cdot x^k$$

$$F = \sum_{i=0}^{n} \left(a_0 + a_1 \cdot x + \ldots + a_k \cdot x^k - y_i \right)^2 \rightarrow Min$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a_0} = 2 \cdot \sum\limits_{i=0}^{n} \left(a_0 + a_1 \cdot x_i + \ldots + a_k \cdot x_i^{\ k} - y_i \right) = 0 \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_1} = 2 \cdot \sum\limits_{i=0}^{n} x_i \cdot \left(a_0 + a_1 \cdot x_i + \ldots + a_k \cdot x_i^{\ k} - y_i \right) = 0 \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_k} = 2 \cdot \sum\limits_{i=0}^{n} x_i^{\ k} \cdot \left(a_0 + a_1 \cdot x_i + \ldots + a_k \cdot x_i^{\ k} - y_i \right) = 0 \end{cases}$$

$$
\begin{cases}
n + \sum_{i=0}^{n} x_i + \ldots + \sum_{i=0}^{n} x_i^{\,k} = \sum_{i=0}^{n} y_i \\
\sum_{i=0}^{n} x_i + \sum_{i=0}^{n} x_i^{\,2} + \ldots + \sum_{i=0}^{n} x_i^{\,k+1} = \sum_{i=0}^{n} x_i \cdot y_i \\
\vdots \\
\sum_{i=0}^{n} x_i^{\,k} + \sum_{i=0}^{n} x_i^{\,k+1} + \ldots + \sum_{i=0}^{n} x_i^{\,2\cdot k} = \sum_{i=0}^{n} x_i^{\,k} \cdot y_i
\end{cases}
$$

Аппроксимация гиперболической функцией

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

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

$$F(a,b) = \sum^{n} (y_i - (a + b/x_i))^2$$

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial F(a,b)}{\partial a} &= 0 \\ \frac{\partial F(a,b)}{\partial b} &= 0\end{aligned}\right\}$$

- Система уравнений имеет вид:

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

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