Yıldız Teknik Üniversitesi
Kimya-Metalurji Fakültesi
Matematik Mühendisliği

MTM2521 Nümerik Analiz 1

Dr. Öğr. Üyesi Fatih Aylıkcı

En Küçük Kareler Yöntemi

Veriler deneylerden elde edilse de tipik olarak ölçüm hataları sebebiyle kayda değer miktarda rastgele sapma içerir. Eğri uydurma görevi, 'ortalama olarak' veri noktalarına uyan pürüzsüz bir eğri bulmaktır. Bu eğri, sapmayı artırmamak için basit bir biçime (örneğin düşük dereceli bir polinoma) sahip olmalıdır.

$$f(x) = f(x, a_1, a_2, ..., a_m)$$

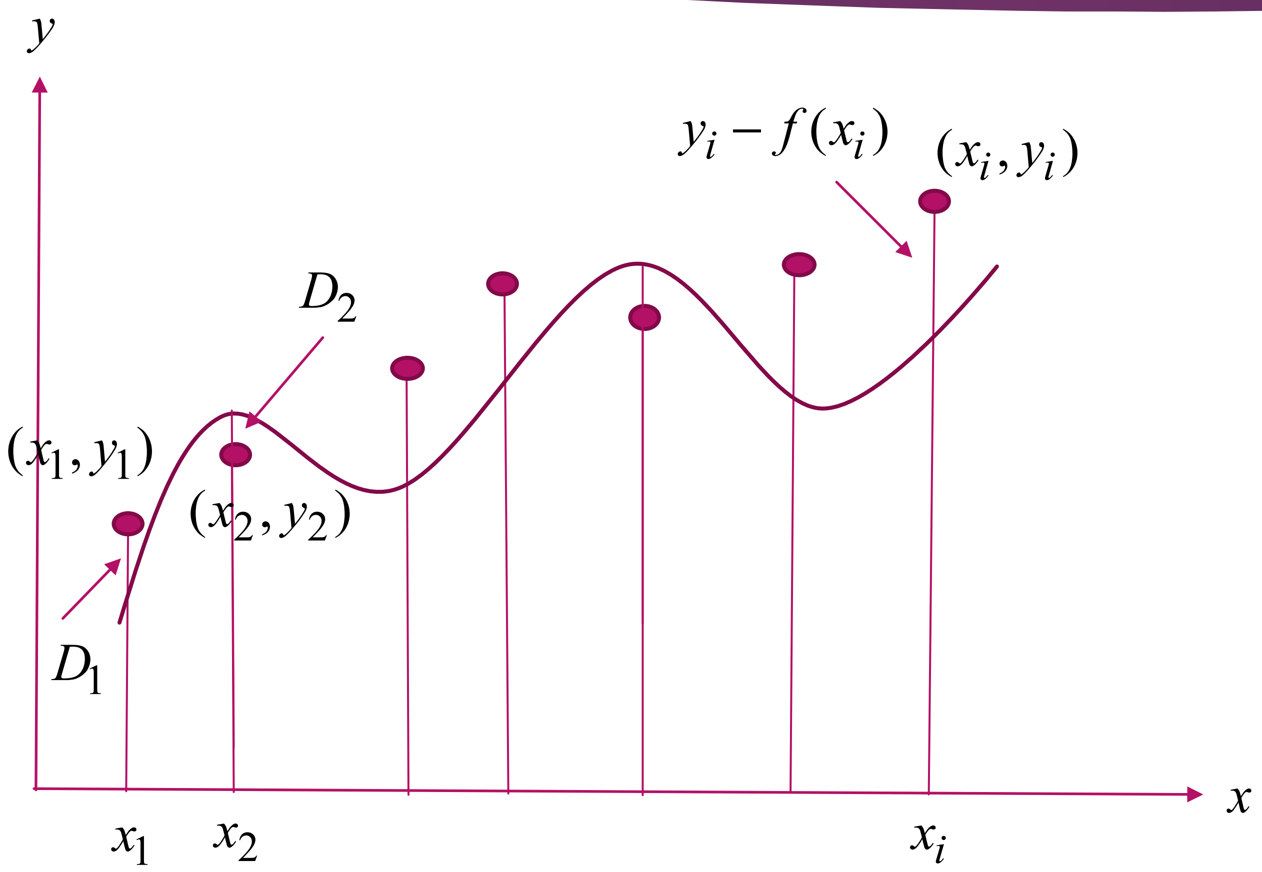
fonksiyonu

$$(x_i, y_i), i = 1, 2, ..., n$$

n veri noktasına uyan bir fonksiyon olsun. Gösterim, $a_j,\ j = 1, 2, ..., m\ (m < n)$ parametrelerini içeren x'in bir fonksiyonuna sahip olduğumuzu ifade eder. f(x)'in formu önceden, genellikle verilerin elde edildiği deneyle ilişkili teoriden belirlenir. Uyumun ayarlanmasının tek yolu parametrelerdir.

Peki, matematiksel olarak en iyi uyumla (best fit) ne kastediliyor?

En Küçük Kareler Yöntemi



Hataları minimize etmek için

$$S(a_1, a_2, ..., a_m) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \quad k = 1, 2, ..., m$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Eğer uydurulmuş fonksiyon verilen $f_j(x)$ fonksiyonlarının lineer bir kombinasyonu olarak seçilirse;

$$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \ldots + a_m f_m(x)$$

O zaman f(x) lineerdir. Tipik bir örnek olarak

$$f_1(x) = \text{sabit},\ f_2(x) = x,\ f_3(x) = x^2,\ \ldots,\ f_m(x) = x^{m-1}$$

olan polinom verilebilir.
Verilerin uydurma eğri üzerindeki yayılımı

$$\sigma = \sqrt{\frac{S}{n-m}}$$

standart sapması ile ölçülür.
Eğer n=m veya n=p-1 (m: uygun parametre sayısı, p: polinom derecesi) ise S=0'dır ve bu aslında bir eğri uydurma olmaz, bu bir interpolasyondur.

En Küçük Kareler Yöntemi

Bir doğru uydurma: $f(x) = a + bx$

Minimize fonksiyonu: $S(a,b) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i)^2$

Sonra;

1. $$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} -2(y_i - a - bx_i) = 2\left(-\sum_{i=1}^{n} y_i + na + b\sum_{i=1}^{n} x_i\right) = 0$$

2. $$\frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} -2(y_i - a - bx_i)x_i = 2\left(-\sum_{i=1}^{n} x_i y_i + a\sum_{i=1}^{n} x_i + b\sum_{i=1}^{n} x_i{}^2\right) = 0$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$ ve $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ ortalama değerleri olmak üzere

1 ve 2 denklemleri, 2n'e bölündükten sonra

1. $a + \bar{x}b = \bar{y}$

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

denklemlerine dönüşür.

En Küçük Kareler Yöntemi

Buradan, a ve b çözüm parametreleri;

$$a = \frac{\bar{y}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \bar{x}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2}, \quad b = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

Fakat bu çözüm yuvarlama hatalarına karşı hassas olabilir. Daha iyi çözüm;

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{n} x_i (x_i - \bar{x})}, \quad a = \bar{y} - \bar{x}b$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Örnek:

x	0	1	2	2.5	3
y	2.9	3.7	4.1	4.4	5

Tablodaki verilere uyan bir doğru uydurunuz ve standart sapmayı hesaplayınız.

Çözüm:

Ortalamalar;

$$\bar{x} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} x_i = \frac{0+1+2+2.5+3}{5} = 1.7$$

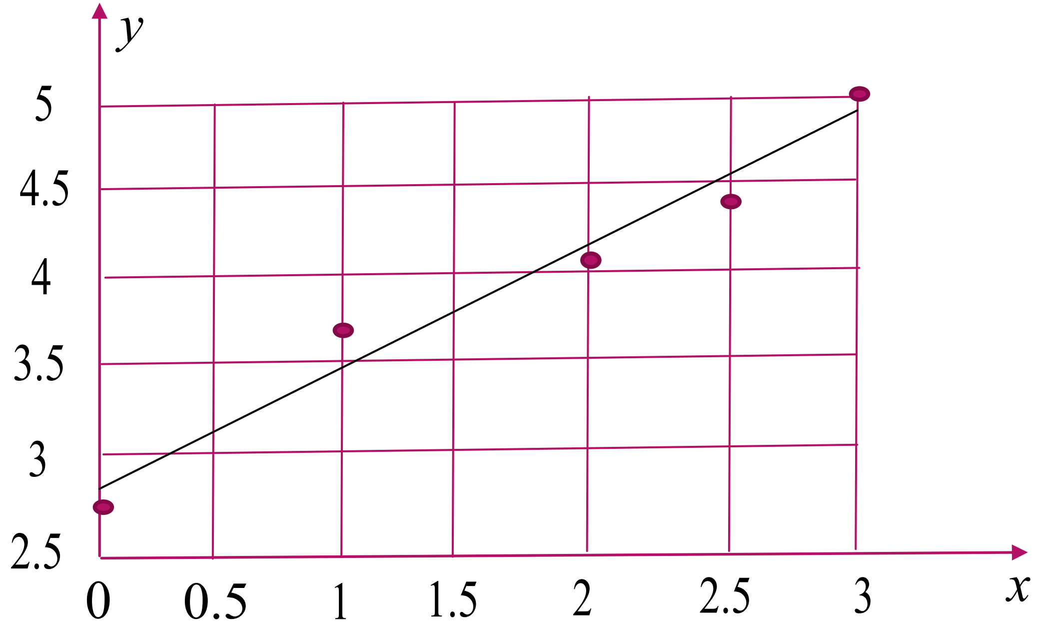
$$\bar{y} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} y_i = \frac{2.9+3.7+4.1+4.4+5}{5} = 4.02$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$b=\frac{\sum_{i=1}^{n} y_i(x_i-\bar{x})}{\sum_{i=1}^{n} x_i(x_i-\bar{x})}=\frac{2.9(-1.7)+3.7(-0.7)+4.1(0.3)+4.4(0.8)+5(1.3)}{0(-1.7)+1(-0.7)+2(0.3)+2.5(0.8)+3(1.3)}=\frac{3.73}{5.8}=0.6431$$

$$a=\bar{y}-\bar{x}b=4.02-1.7(0.6431)=2.927$$

$$\Rightarrow f(x)=2.927+0.6431x$$



En Küçük Kareler Yöntemi

Rezidülerin kareleri toplamı;

$$S = \sum_{i=1}^{5} (y_i - f(x_i))^2 = (-0.027)^2 + (0.130)^2 + (-0.113)^2 + (-0.135)^2 + (0.144)^2 = 0.0694$$

Standart Sapma;

$$\sigma = \sqrt{\frac{S}{n-m}} = \sqrt{\frac{0.0694}{5-2}} = 0.152$$

n: Veri noktası sayısı, m: Uydurulmuş parametre sayısı

En Küçük Kareler Yöntemi

Lineer form uydurma: $$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \ldots + a_m f_m(x) = \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x)$$

Minimizasyon: $$S = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i) \right]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = -2 \left[\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i) \right) f_k(x_i) \right] = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, m$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{m} \left[\sum_{i=1}^{n} f_j(x_i) f_k(x_i) \right] a_j = \sum_{i=1}^{n} f_k(x_i) y_i, \quad k = 1, 2, \ldots, m$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$A_{kj} = \sum_{i=1}^{n} f_j(x_i) f_k(x_i), \quad b_k = \sum_{i=1}^{n} f_k(x_i) y_i$$

olmak üzere matris formda;

$$Aa = b$$

yazılabilir.

Polinom uydurma: $f(x) = \sum_{j=1}^{m} a_j x^{j-1}, \; f_j(x) = x^{j-1}, \; j = 1, 2, \ldots, m$

Lineer form için çözüm kullanılırsa;

$$Aa = b \Rightarrow A_{kj} = \sum_{i=1}^{n} {x_i}^{j+k-2}, \; b_k = \sum_{i=1}^{n} {x_i}^{k-1} y_i$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Yani;

$$A=\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{2} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_i^{m} \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^{2} & \sum_{i=1}^{n} x_i^{3} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^{m-1} & \sum_{i=1}^{n} x_i^{m} & \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_i^{2m-2} \end{bmatrix} \qquad b=\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^{m-1} y_i \end{bmatrix}$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Örnek:

x	0	0.25	0.5	0.75	1
y	1	1.284	1.6487	2.117	2.7183

Verilen data noktaları için 2. dereceden en küçük kareler polinomunu belirleyiniz.

Çözüm:

$$f(x)=\sum_{j=1}^{3} a_j x^{j-1},\ A_{kj}=\sum_{i=1}^{n} x_i^{\,j+k-2},\ b_k=\sum_{i=1}^{n} x_i^{\,k-1} y_i,\quad k=1,2,3$$

$$A_{kj}a_j=b_k$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$A_{11} = n = 5$$

$$A_{12} = A_{21} = \sum_{i=1}^{n} x_i = 0 + 0.25 + 0.5 + 0.75 + 1 = 2.5$$

$$A_{13} = A_{22} = A_{31} = \sum_{i=1}^{n} x_i^{\ 2} = 0 + 0.0625 + 0.25 + 0.5625 + 1 = 1.875$$

$$A_{23} = A_{32} = \sum_{i=1}^{n} x_i^{\ 3} = 0 + 0.0156 + 0.125 + 0.4219 + 1 = 1.5625$$

$$A_{33} = \sum_{i=1}^{n} x_i^{\ 4} = 0 + 0.0039 + 0.0625 + 0.3164 + 1 = 1.3828$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$b_1 = \sum_{i=1}^{n} y_i = 1 + 1.284 + 1.6487 + 2.117 + 2.7183 = 8.768$$

$$b_2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 0 + 0.321 + 0.8244 + 1.5877 + 2.7183 = 5.4514$$

$$b_3 = \sum_{i=1}^{n} {x_i}^2 y_i = 0 + 0.0803 + 0.4122 + 1.1908 + 2.7183 = 4.4015$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.768 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix}$$

$$a_1 = 1.0051,\ a_2 = 0.8642,\ a_3 = 0.8437$$

$$f(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 = 1.0051 + 0.8642x + 0.8437x^2$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Verilerin Ağırlıklandırılması:
Verilerin doğruluğuna güvenin noktadan noktaya değiştiği durumlar vardır. Örneğin, ölçümleri alan cihaz belirli bir veri aralığında daha hassas olabilir. Bazen veriler, her biri farklı koşullar altında gerçekleştirilen çeşitli deneylerin sonuçlarını temsil eder. Bu koşullar altında her bir veri noktasına bir güven faktörü veya ağırlık atamak isteyebilir ve W_i 'lerin ağırlık olduğu

$$r_i = W_i(y_i - f(x_i))$$

ağırlıklı rezidülerin karelerinin toplamını en aza indirgeyebiliriz. Dolayısıyla minimize edilecek fonksiyon;

$$S(a_1, a_2, ..., a_m) = \sum_{i=1}^{n} W_i^2 (y_i - f(x_i))^2$$

Bu prosedür, uydurma (fitting) fonksiyon f(x)'i daha yüksek ağırlığa sahip veri noktalarına yaklaştırır.

En Küçük Kareler Yöntemi

Ağırlıklandırılmış lineer regresyon:

$$f(x) = a + bx$$

$$\Rightarrow S(a,b) = \sum_{i=1}^{n} W_i^2 (y_i - a - bx_i)^2 \qquad \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n} W_i^2 (y_i - a - bx_i) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n} W_i^2 (y_i - a - bx_i) x_i = 0$$

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

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

En Küçük Kareler Yöntemi

Ağırlıklı ortalamalar:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} W_i^2 x_i}{\sum_{i=1}^{n} W_i^2}, \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} W_i^2 y_i}{\sum_{i=1}^{n} W_i^2}$$

Çözüm ağırlıksız olanla benzerdir:

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} W_i^2 y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{n} W_i^2 x_i (x_i - \bar{x})}, \quad a = \bar{y} - \bar{x} b$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Üstel fonksiyon uydurma: $f(x) = ae^{bx}$

Her iki tarafın doğal logaritması alınırsa;

$$F(x) = \ln f(x) = \ln a + bx$$

biçiminde doğru için eğri uydurmaya benzetilir.

En Küçük Kareler Yöntemi

Örnek:

x	1.2	2.8	4.3	5.4	6.8	7.9
y	7.5	16.1	38.9	67	146.6	266.2

tablosundaki verilere uygun en küçük kareler yöntemi kullanılarak $f(x) = ae^{bx}$ *formunda bir fonksiyon elde ediniz.*

Çözüm:

x	1.2	2.8	4.3	5.4	6.8	7.9
z=ln(y)	2.015	2.779	3.661	4.205	4.988	5.584

Ortalamalar: $\bar{x} = \frac{1}{6}\sum_{i=1}^{6} x_i = 4.733, \ \bar{z} = \frac{1}{6}\sum_{i=1}^{6} z_i = 3.872$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{6} z_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{6} x_i (x_i - \bar{x})} = \frac{16.716}{31.153} = 0.5366, \quad A = \bar{z} - \bar{x} b = 1.3323 = \ln a \Rightarrow a = e^{A} = 3.790$$

$$\Rightarrow f(x) = 3.790 e^{0.5366x}$$

Standart sapma:

$$S = \sum_{i=1}^{6} (y_i - f(x_i))^2 = 17.59$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{S}{6-2}} = 2.10$$

En Küçük Kareler Yöntemi

Buna benzer metod aşağıdaki fonksiyonlar için de uygulanabilir:

$f(x)$	$F(x)$	F tarafından uydurulacak veriler
axe^{bx}	$\ln(f(x)/x) = \ln a + bx$	$[x_i, \ln(y_i/x_i)]$
ax^b	$\ln f(x) = \ln a + b\ln x$	$[\ln x_i, \ln y_i]$

En Küçük Kareler Yöntemi

Ağırlıklı ortalamalar kullanılarak üstel fonksiyon uydurma:
Aynı örneği kullanalım:

$z = \ln y$ için $\ln(ae^{bx}) = \ln a + bx$ uyduralım. Ağırlıklar $W_i = y_i$ olsun.

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{6} {y_i}^2 x_i}{\sum_{i=1}^{6} {y_i}^2} = \frac{737.5 \times 10^3}{98.67 \times 10^3} = 7.474$$

$$\bar{z} = \frac{\sum_{i=1}^{6} {y_i}^2 z_i}{\sum_{i=1}^{6} {y_i}^2} = \frac{528.2 \times 10^3}{98.67 \times 10^3} = 5.353$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{6} y_i^{\,2} z_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{6} y_i^{\,2} x_i (x_i - \bar{x})} = \frac{35.39\times 10^3}{65.05\times 10^3} = 0.544, \quad A = \ln a = \bar{z} - b\bar{x} = 1.287 \Rightarrow a = e^A = 3.622$$

Böylece uydurulmuş fonksiyon: $f(x) = 3.622e^{0.544x}$

Standart sapma: $S = \sum_{i=1}^{6} (y_i - f(x_i))^2 = 4.186$

$$\Rightarrow \sigma = \sqrt{\frac{S}{6-2}} = 1.023$$

DİKKAT: Ağırlıklı ortalamalar kullanıldığında daha küçük bir standart sapma elde edildi.

En Küçük Kareler Yöntemi

Örnek:

x	0.5	1	2	4
y	0.625	0.5	4	32

tablosundaki verilere uygun en küçük kareler yöntemi kullanılarak $y = ab^x$ *formunda bir fonksiyon elde ediniz.*

Çözüm: $y = ab^x \Rightarrow \ln y = \ln a + x \ln b \Rightarrow Y = A + xB$

x	0.5	1	2	4
y	0.625	0.5	4	32
Y=ln(y)	-0.47	-0.6931	1.3863	3.4657

Ortalamalar: $\bar{x} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} x_i = 1.875, \quad \bar{Y} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} y_i = 0.9222$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$B=\frac{\sum_{i=1}^{4}Y_i(x_i-\bar{x})}{\sum_{i=1}^{4}x_i(x_i-\bar{x})}=\frac{8.7907}{7.1875}=1.2231=\ln b\Rightarrow b=e^{B}=3.3976$$

$$A=\bar{Y}-\bar{x}B=-1.3710=\ln a\Rightarrow a=e^{A}=0.2538$$

$$\Rightarrow y=0.2538\times 3.3976^{x}$$

Standart sapma: $\sigma=1.5221$

En Küçük Kareler Yöntemi

\# *Ağırlık* $W_i = y_i$ *olsun.*

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{4} y_i^2 x_i}{\sum_{i=1}^{4} y_i^2} = 3.9672, \quad \bar{Y} = \frac{\sum_{i=1}^{4} y_i^2 Y_i}{\sum_{i=1}^{4} y_i^2} = 3.4313$$

$$B = \frac{\sum_{i=1}^{4} y_i^2 Y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{4} y_i^2 x_i (x_i - \bar{x})} = 1.0565 = \ln b \Rightarrow b = e^B = 2.8763$$

$$A = \bar{Y} - B\bar{x} = -0.7601 = \ln a \Rightarrow a = e^A = 0.4676$$

$$\Rightarrow y = 0.4676 \times 2.8763^x$$

Standart sapma: $\sigma = 0.6163$

En Küçük Kareler Yöntemi

Örnek:

x	-0.5	-0.19	0.02	0.2	0.35	0.5
y	-3.558	-2.874	-1.995	-1.04	-0.068	0.677

tablosundaki verilere uygun en küçük kareler yöntemi kullanılarak $y = a\sin(\pi x/2) + b\cos(\pi x/2)$ *formunda bir fonksiyon elde ediniz.*

Çözüm: $S(a,b) = \sum_{i=1}^{6} (y_i - a\sin(\pi x_i/2) - b\cos(\pi x_i/2))^2$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=1}^{6} \sin(\pi x_i/2)(y_i - a\sin(\pi x_i/2) - b\cos(\pi x_i/2)) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=1}^{6} \cos(\pi x_i/2)(y_i - a\sin(\pi x_i/2) - b\cos(\pi x_i/2)) = 0$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$\frac{\partial S}{\partial a}=\sum_{i=1}^{6}\sin(\pi x_i/2)(y_i-a\sin(\pi x_i/2)-b\cos(\pi x_i/2))=0$$

$$\sum_{i=1}^{6}\sin(\pi x_i/2)y_i=a\sum_{i=1}^{6}\sin^2(\pi x_i/2)+b\sum_{i=1}^{6}\sin(\pi x_i/2)\cos(\pi x_i/2)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b}=\sum_{i=1}^{6}\cos(\pi x_i/2)(y_i-a\sin(\pi x_i/2)-b\cos(\pi x_i/2))=0$$

$$\sum_{i=1}^{6}\cos(\pi x_i/2)y_i=a\sum_{i=1}^{6}\cos(\pi x_i/2)\sin(\pi x_i/2)+b\sum_{i=1}^{6}\cos^2(\pi x_i/2)$$

En Küçük Kareler Yöntemi

x	-0.5	-0.19	0.02	0.2	0.35	0.5	TOPLAM
y	-3.558	-2.874	-1.995	-1.04	-0.068	0.677	
$\sin^2(\pi x/2)$	0.5	0.0865	0.001	0.0955	0.273	0.5	**1.4559**
$\cos^2(\pi x/2)$	0.5	0.9135	0.999	0.9045	0.727	0.5	**4.5441**
$\sin(\pi x/2)\cos(\pi x/2)$	-0.5	-0.281	0.0314	0.2939	0.4455	0.5	**0.4897**
$\sin(\pi x/2)y$	2.5159	0.8451	-0.0627	-0.3214	-0.0355	0.4787	**3.4201**
$\cos(\pi x/2)y$	-2.5159	-2.7469	-1.994	-0.9891	-0.058	0.4787	**-7.8252**

$$\sum_{i=1}^{6}\sin(\pi x_i/2)y_i = a\sum_{i=1}^{6}\sin^2(\pi x_i/2) + b\sum_{i=1}^{6}\sin(\pi x_i/2)\cos(\pi x_i/2)$$

$$\sum_{i=1}^{6}\cos(\pi x_i/2)y_i = a\sum_{i=1}^{6}\cos(\pi x_i/2)\sin(\pi x_i/2) + b\sum_{i=1}^{6}\cos^2(\pi x_i/2)$$

$$\Rightarrow 1.4559a + 0.4897b = 3.4201$$

$$0.4897a + 4.5441b = -7.8252$$

En Küçük Kareler Yöntemi

$$1.4559a + 0.4897b = 3.4201$$

$$0.4897a + 4.5441b = -7.8252 \qquad \Rightarrow y = 3.0385\sin(\pi x/2) - 2.0495\cos(\pi x/2)$$

Çözüm: $a = 3.0385,\ b = -2.0495$

Standart sapma: $S = \sum_{i=1}^{6}(y_i - f(x_i))^2 = 0.0136 \quad \Rightarrow \sqrt{\dfrac{S}{n-m}} = \sqrt{\dfrac{0.0136}{6-2}} = 0.0583$