Numerikus módszerek C

11. előadás: Az általánosított inverz és approximációs tulajdonsága

Krebsz Anna

ELTE IK

Tartalomjegyzék

Tartalomjegyzék

Definíció: A legkisebb négyzetek módszerének alapfeladata

Adottak az $x_1, \ldots, x_N \in [a; b]$ különböző alappontok, $y_1, \ldots, y_N \in \mathbb{R}$ függvényértékek vagy mérési eredmények. Olyan $p_n \in P_n$ polinomot keresünk ($n + 1 \leq N$, általában $N \gg n$), melyre

$$\sum_{i=1}^{N} (y_i - p_n(x_i))^2 \quad \text{minimális.}$$

A p_n polinomot *négyzetesen legjobban közelítő polinomnak* nevezzük.

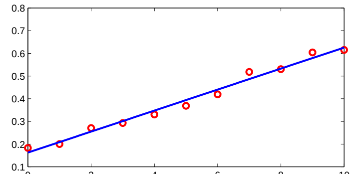
Legkisebb négyzetek módszere

Definíció: A legkisebb négyzetek módszerének alapfeladata

Adottak az $x_1, \ldots, x_N \in [a;b]$ különböző alappontok, $y_1, \ldots, y_N \in \mathbb{R}$ függvényértékek vagy mérési eredmények. Olyan $p_n \in P_n$ polinomot keresünk ($n+1 \leq N$, általában $N \gg n$), melyre

$$\sum_{i=1}^{N} (y_i - p_n(x_i))^2 \quad \text{minimális.}$$

A p_n polinomot *négyzetesen legjobban közelítő polinomnak* nevezzük.



Írjuk fel a $p_n(x_i) = y_i$, $(i = 1, \ldots, N)$ LER-t mátrix alakban, ahol

$$p_n(x) := a_n x^n + \ldots + a_1 x + a_0.$$

Írjuk fel a $p_n(x_i) = y_i$, $(i = 1, \ldots, N)$ LER-t mátrix alakban, ahol

$$p_n(x) := a_n x^n + \ldots + a_1 x + a_0.$$

Vezessük be hozzá a következő jelöléseket:

$$A := \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \ldots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_N & \ldots & x_N^n \end{bmatrix}_{N\times(n+1)} \qquad a := \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}_{n+1\times 1} \qquad y := \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}_{N\times 1}.$$

Írjuk fel a $p_n(x_i) = y_i$, $(i = 1, \ldots, N)$ LER-t mátrix alakban, ahol

$$p_n(x) := a_n x^n + \ldots + a_1 x + a_0.$$

Vezessük be hozzá a következő jelöléseket:

$$A := \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \ldots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_N & \ldots & x_N^n \end{bmatrix}_{N\times(n+1)} \qquad a := \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}_{n+1\times 1} \qquad y := \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}_{N\times 1} \quad .$$

A kapott $A \cdot a = y$ LER klasszikus értelemben nem oldható meg, $N > n+1$ esetén több egyenletünk van, mint ismeretlenünk. Különböző alappontok esetén $\operatorname{rang}(A) = n+1$, vagyis teljes rangú LER-t kaptunk, amit általánosított értelemben meg tudunk oldani.

Túlhatározott teljes rangú esetben az általánosított megoldásra a Gauss-féle normálegyenleteket kapjuk:

$$a^{+} = A^{+}y = (A^{T}A)^{-1} \cdot A^{T}y \quad \Leftrightarrow \quad A^{T}A \cdot a^{+} = A^{T}y.$$

Túlhatározott teljes rangú esetben az általánosított megoldásra a Gauss-féle normálegyenleteket kapjuk:

$$a^{+} = A^{+}y = (A^{T}A)^{-1} \cdot A^{T}y \quad \Leftrightarrow \quad A^{T}A \cdot a^{+} = A^{T}y.$$

A szimmetrikus LER alakja:

$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^n y_i \end{bmatrix}.$$

Túlhatározott teljes rangú esetben az általánosított megoldásra a Gauss-féle normálegyenleteket kapjuk:

$$a^+ = A^+ y = (A^T A)^{-1} \cdot A^T y \quad \Leftrightarrow \quad A^T A \cdot a^+ = A^T y.$$

A szimmetrikus LER alakja:

$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^n y_i \end{bmatrix}.$$

Alkalmazzuk az approximációs tulajdonságot a LER-re:

$$\|A \cdot a^+ - y\|_2 \leq \|A \cdot a - y\|_2, \quad \forall\, a \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

$$\|A \cdot a - y\|_2^2 = \sum_{i=1}^{N} (p_n(x_i) - y_i)^2 \;\; \rightarrow \;\; \text{minimalizálása},$$

így a^+ a négyzetesen legjobban közelítő polinom együtthatóit adja.

Megjegyzések:

Megjegyzések:

- Ha A teljes rangú, akkor $A^T A$ mindig szimmetrikus és invertálható.

Megjegyzések:

- Ha A teljes rangú, akkor $A^T A$ mindig szimmetrikus és invertálható.
- A LER alakja $n = 1$ esetben:

$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}.$$

Megjegyzések:

- Ha A teljes rangú, akkor $A^T A$ mindig szimmetrikus és invertálható.
- A LER alakja $n = 1$ esetben:

$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}.$$

- Ha $n = 1$ esetben $\sum x_i = 0$, akkor diagonális LER-t kapunk, melynek megoldása:

$$a_0 = \frac{1}{N} \sum y_i, \quad a_1 = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}.$$

  A közgazdászok előszeretettel használják (lásd statisztika, regressziószámítás).

Megjegyzések:

- Ha A teljes rangú, akkor $A^T A$ mindig szimmetrikus és invertálható.
- A LER alakja $n = 1$ esetben:
$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}.$$
- Ha $n = 1$ esetben $\sum x_i = 0$, akkor diagonális LER-t kapunk, melynek megoldása:
$$a_0 = \frac{1}{N} \sum y_i, \quad a_1 = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}.$$
A közgazdászok előszeretettel használják (lásd statisztika, regressziószámítás).
- A négyzetesen legjobban közelítő egyenes mindig átmegy az $\left(\frac{1}{N} \sum x_i, \frac{1}{N} \sum y_i \right)$ (átlagokból álló) ponton. ($n = 1$-re a Gauss-féle normálegyenletek első sora épp ezt jelenti.)

Legkisebb négyzetek módszere szélsőérték feladatként megoldva:
A négyzetesen legjobban közelítő polinomot $p_n(x) := a_n x^n + \ldots + a_1 x + a_0$ alakban keressük. Írjuk fel a minimalizálandó függyvényt:

$$F(a_0, a_1, \ldots, a_n) := \sum_{i=1}^{N} (y_i - p_n(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \sum_{j=0}^{n} a_j (x_i)^j \right)^2 .$$

Legkisebb négyzetek módszere szélsőérték feladatként megoldva:
A négyzetesen legjobban közelítő polinomot $p_n(x) := a_n x^n + \ldots + a_1 x + a_0$ alakban keressük. Írjuk fel a minimalizálandó függvényt:

$$F(a_0, a_1, \ldots, a_n) := \sum_{i=1}^{N} (y_i - p_n(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \sum_{j=0}^{n} a_j (x_i)^j \right)^2 .$$

A többváltozós valós függvény szélsőértékét keressük a derivált segítségével:

$$F'(a_0, a_1, \ldots, a_n) = 0$$
$$\frac{\partial F}{\partial a_k}(a_0, a_1, \ldots, a_n) = 0 \;\; (k = 0, \ldots, n).$$

$$k = 0, 1, \ldots, n : \qquad \frac{\partial F}{\partial a_k}(a_0, a_1, \ldots, a_n) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} 2 \cdot (y_i - p_n(x_i)) \cdot \underbrace{\left(-\frac{\partial p_n}{\partial a_k}(x_i)\right)}_{-(x_i)^k} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} 2 \cdot (y_i - p_n(x_i)) \cdot \left(-(x_i)^k\right) = 0 \quad \Big| : 2$$

$$\sum_{i=1}^{N} p_n(x_i) \cdot (x_i)^k = \sum_{i=1}^{N} y_i (x_i)^k$$

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=0}^{n} a_j (x_i)^j \cdot (x_i)^k = \sum_{j=0}^{n} \sum_{i=1}^{N} a_j (x_i)^{j+k} = \sum_{i=1}^{N} y_i (x_i)^k$$

A belső szummából a_j-t kiemelve:

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \sum_{i=1}^{N} (x_i)^{j+k} = \sum_{i=1}^{N} y_i (x_i)^k$$

A belső szummából a_j-t kiemelve:

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \sum_{i=1}^{N} (x_i)^{j+k} = \sum_{i=1}^{N} y_i (x_i)^k$$

A kapott LER a Gauss-féle normálegyenletek:

$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^n y_i \end{bmatrix}.$$

A belső szummából a_j-t kiemelve:

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \sum_{i=1}^{N} (x_i)^{j+k} = \sum_{i=1}^{N} y_i (x_i)^k$$

A kapott LER a Gauss-féle normálegyenletek:

$$\begin{bmatrix} N & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^n y_i \end{bmatrix}.$$

Belátható, hogy a kapott $(a_0, a_1, \ldots, a_n)$ esetén $F''(a_0, a_1, \ldots, a_n)$ pozitív definit mátrix, így minimum helyet kaptunk.