Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ

Департамент компьютерной инженерии

Домашняя работа по курсу

Информатика и программирование

Тема: Оптимизация функции методом наименьших квадратов.

Выполнила:
Студентка группы БИВ-162:
Дагаева Мария

Проверил:
Паволоцкий Александр
Владимирович

Москва, 2016

Содержание

1 Задание

Реализовать задачу оптимизации функции методом наименьших квадратов.

2 Теоретическая часть

Главная наша задача — по набору точек (x_i, y_i) отыскать функцию $f(x)$, удовлетворяющую $f(x_i) = y_i$. Поиск такой функции — задача, чье решение не всегда существует и единственно, но, пользуясь методом наименьших квадратов (МНК), можно найти достаточно близкую функцию, являющуюся многочленом.
Метод наименьших квадратов [3] заключается в минимизации (оптимизации) функции $F = \sum_i (y_i - f(x_i))^2$, где (x_i, y_i) — заданные точки, $f(x)$ — функция, которую мы хотим найти.
В данном случае, целевой функцией оптимизации будет F, так как чтобы найти $f(x)$, достаточно близко приближающую данные нам точки (x_i, y_i), необходимо, чтобы F была минимальна.
Решим задачу для $f(x)$ — многочлена n-й степени. В таком случае f можно представить как $f(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0$. Тогда $(a_n, a_{n-1}, \ldots, a_0)$ — набор переменных, от которых зависит функция F.
Очевидно, что F непрерывна и ограничена снизу; в таком случае экстремум достигается, когда частные производные равны 0, следовательно, для нахождения экстремума достаточно решить систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial a_n} = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial a_{n-1}} = 0 \\ \ldots \\ \frac{\partial F}{\partial a_0} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \sum_i -2(y_i - f(x_i))\frac{\partial f}{\partial a_n} = 0 \\ \sum_i -2(y_i - f(x_i))\frac{\partial f}{\partial a_{n-1}} = 0 \\ \ldots \\ \sum_i -2(y_i - f(x_i))\frac{\partial f}{\partial a_0} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \sum_i -2(y_i - f(x_i)){x_i}^n = 0 \\ \sum_i -2(y_i - f(x_i)){x_i}^{n-1} = 0 \\ \ldots \\ \sum_i -2(y_i - f(x_i)) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow$$

$$\begin{cases} \sum_i -2(y_i - (a_n {x_i}^n + \cdots + a_0)){x_i}^n = 0 \\ \sum_i -2(y_i - (a_n {x_i}^n + \cdots + a_0)){x_i}^{n-1} = 0 \\ \ldots \\ \sum_i -2(y_i - (a_n {x_i}^n + \cdots + a_0)) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \sum_i a_n {x_i}^{2n} + \cdots + a_0 {x_i}^n = \sum_i y_i {x_i}^n \\ \sum_i a_n {x_i}^{2n-1} + \cdots + a_0 {x_i}^{n-1} = \sum_i y_i {x_i}^{n-1} \\ \ldots \\ \sum_i a_n {x_i}^n + \cdots + a_0 = \sum_i y_i \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} a_n \sum_i {x_i}^{2n} + a_{n-1} \sum_i {x_i}^{2n-1} + \cdots + a_0 \sum_i {x_i}^n = \sum_i y_i {x_i}^n \\ a_n \sum_i {x_i}^{2n-1} + a_{n-1} \sum_i {x_i}^{2n-1} + \cdots + a_0 \sum_i {x_i}^{n-1} = \sum_i y_i {x_i}^{n-1} \\ \ldots \\ a_n \sum_i {x_i}^n + a_{n-1} \sum_i {x_i}^{n-1} + \cdots + a_0 \sum_i 1 = \sum_i y_i \end{cases}$$

Это система $n+1$ линейных уравнений на $n+1$ переменных, $\Rightarrow$, ее можно записать в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} \sum_i {x_i}^{2n} & \sum_i {x_i}^{2n-1} & \dots & \sum_i {x_i}^{n} \\ \sum_i {x_i}^{2n-1} & \sum_i {x_i}^{2n-2} & \dots & \sum_i {x_i}^{n-1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \sum_i {x_i}^{n} & \sum_i {x_i}^{n-1} & \dots & \sum_i 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ a_{n-1} \\ \vdots \\ a_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i {x_i}^{n} \\ \sum_i y_i {x_i}^{n-1} \\ \vdots \\ \sum_i y_i \end{pmatrix}$$

Таким образом, задача поиска функции f сводится к решению системы уравнений.

Для этого проще всего использовать метод Гаусса: привести матрицу к верхнетреугольному виду, меняя строки местами или вычитая из одной строки другую, умноженную на скаляр (такие преобразования равносильны, то есть при них не меняется пространство решений), после чего последовательно выразить переменные a_i через правую часть уравнения. Решение существует и единственно тогда и только тогда, когда после приведения к верхнетреугольному виду на главной диагонали матрицы нет нулей (критерий существования и единственности — обратимость матрицы, так как, домножая уравнение на обратную матрицу, мы получаем ответ, а одно из равносильных условий обратимости — ненулевой определитель. При преобразованиях в методе Гаусса определитель постоянен, а для верхнетреугольной матрицы он равен произведению чисел на главной диагонали). [2]

Заметим, что при $n = 1$ матрица обратима, если точки $x_1, \dots, x_m$ различны, то есть, для набора, состоящего хотя бы из двух различных точек (с различными координатами по оси Ox), всегда найдется решение.

3 Решение задачи (описание работы)

На вход программа получает набор, состоящий из хотя бы двух различных точек с координатами (x_i, y_i) и желаемую степень n многочлена $f(x)$.
На выходе имеется функция $f(x)$, наиболее близкая к заданному набору точек, степени n, если это возможно.

Чтобы найти функцию f заданной степени, программа вычисляет коэффициенты системы уравнений согласно значениям (x_i, y_i) и считает методом Гаусса ее решение, для каждого i находя строку с ненулевым элементом в i-том столбце, ставя ее на i-тое место и вычитая из всех нижестоящих строк, домножая на некоторое число так, чтобы весь i-тый столбец был нулевым ниже i-того элемента. Если на главной диагонали есть хотя бы один 0, и решения не существует/неоднозначно, решения для выбранной степени не существует. Изначально программа ищет решение для заданной пользователем степени, но если такого нет, то начинает искать решения для степеней многочлена от 1 до заданной (если пользователь не задал желаемую степень, до m — количества заданных точек) и выбирает из существующих наилучшее, считая для каждого решения $F = \sum_i (y_i - f(x_i))^2$ и выбирая решение с наименьшим F (согласно МНК). Хотя бы одно решение существует — линейная функция $f(x)$ найдется всегда, если выполнены условия на вход.
Найдя наилучшее решение, программа выводит формулу уравнения, форматируя коэффициенты до 4 знака после запятой и строит график функции $f(x)$.

Список литературы

[1] https://docs.python.org/2/library/tkinter.html

[2] Э. Б. Винберг, “Курс алгебры”

[3] https://ru.wikipedia.org/wiki/Метод_наименьших_квадратов