Kap. 4 Aproximácia funkcií – Metóda najmenších štvorcov

Pri aproximácii neznámej funkcie f metódou najmenších štvorcov sú rovnako ako v predchádzajúcej kapitole dané podmienky $y_i = f(x_i)$ v bodoch x_i, i = 0, 1, ..., n, ale na rozdiel od interpolácie nežiadame, aby boli presne rešpektované. Namiesto toho chceme, aby sa aproximujúca funkcia (aproximant) F(x), ktorú vyberáme z vopred stanovenej triedy funkcií, čo naviac "približovala" k funkcii f v zmysle nejakého kritéria aproximácie. Tu sa budeme zaoberať prípadom, keď kritérium aproximácie bude súčet štvorcov odchýliek. Ako triedu aproximantov najprv zvolíme triedu polynómov stupňa najviac k, k < n. Nájsť aproximujúcu funkciu

$$F_k(x) = \sum_{i=0}^{k} \beta_i x^i$$

znamená určiť koeficienty β_i, i = 0, 1, ..., k tak, aby minimalizovali kriteriálnu funkciu

$$SSO = \sum_{i=0}^{n} (F(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^{n} (\sum_{j=0}^{k} \beta_j x^j - y_i)^2$$

To sa dá urobiť buď analyticky, t.j. tak, že nájdeme minimum funkcie SSO vzhľadom na premenné β_i, ako sme to robili v prípade regresnej priamky 2-rozmerného dátového súboru, alebo geometricky. Ukážeme si teraz tento prístup.

Minimalizovať funkciu SSO znamená minimalizovať euklidovskú normu zvyškového vektora $\overline{e}$ so zložkami $e_i = F(x_i) - y_i$, t.j. $||A\overline{\beta} - \overline{y}||$, kde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^k \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^k \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^k \end{pmatrix}, \qquad \overline{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \dots \\ \beta_k \end{pmatrix}, \qquad \overline{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Dá sa dokázať, že vektor $\overline{\beta}$ bude minimalizovať SSO práve vtedy, keď zvyškový vektor $\overline{e}$ bude kolmý na všetky stĺpcové vektory matice A, t.j. keď

$$A\overline{e} = A'(A\overline{\beta} - \overline{y}) = \overline{0}$$

To znamená, že vektor $\overline{\beta}$ pre aproximant F je riešením sústavy lineárnych rovníc

$$A'A\overline{\beta} = A'\,\overline{y}$$

To je tá istá sústava, ktorá vyjde z analytického prístupu a dá sa o nej dokázať, že má vždy jediné riešenie.

Tento postup sa dá zovšeobecniť aj na prípad, keď aproximant F je lineárnou kombináciou akéhokoľvek lineárne nezávislého systému funkcií.