Pienimmän neliösumman sovitus

Sovituksen kriteerit

Havaintopisteet $(x_i, y_,)$, $i = 1, \ldots, n$. Halutaan esittää pistejoukko käyränä $y = f(x)$. Pisteessä x_i käyrän pystysuora poikkeama havaitusta arvosta on $y_i - f(x_i)$. Koko sovituksen virhe R voidaan määritellä monella tavalla:

1) Virheiden itseisarvojen summa:

$$R_0 = \sum_{i=1}^{n} |y_i - f(x_i)|$$

Riippuu lineaarisesti yksittäisistä virheistä; ei ole niille kovin herkkä.

2) Virheiden neliöiden summa:

$$R_2^2 = \sum_{i=1}^{n} |y_i - f(x_i)|^2$$

Edellistä herkempi suurille virheille.

3) Virheiden maksimiarvo:

$$R_\infty = \max\{|y_i - f(x_i)|\}$$

Estää suuret poikkeamat datapisteistä.

Ei minimoi lainkaan pienempiä virheitä, ja yksittäinenkin kovin virheellinen piste voi vääristää sovitusta tuntuvasti.

Etäisyydet tunnetaan L_0-, L_2- ja L_∞-normeina, jotka ovat erikoistapauksia L_p-normista:

$$R_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n} |y_i - f(x_i)|^p}$$

Periaatteessa sovitus voidaan tehdä minimoimalla mitä tahansa normia. Usein pienimmän neliösumman menetelmä antaa parhaan tuloksen.

Sovitettava funktio f sisältää muuttujan lisäksi joukon vakioita (parametreja) a_k, $k = 1, \ldots, K$.

Residuaali R on sovitettavan funktion parametrien funktio: $R = R(a_1, \ldots, a_K)$. Etsitään sellaiset parametrien arvot, joilla R tulee mahdollisimman pieneksi.

Oletetaan, että f on derivoituva parametrien suhteen. Residuaalin R minimissä on

$$\frac{\partial R}{\partial a_1} = 0, \ldots, \frac{\partial R}{\partial a_K} = 0.$$

Tästä saadaan yhtälöryhmä sovitettavassa funktiossa esiintyville parametreille.

Jos funktio f voidaan esittää joidenkin kantafunktioiden f_i lineaarikombinaationa

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i f_i(x),$$

saadaan lineaarinen yhtälöryhmä riippumatta siitä, mitä muotoa kantafunktiot f_i ovat.

Esimerkiksi

$$\begin{aligned} f(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2, \\ f(x) &= a_1 \sin x + a_2 \cos x, \\ f(x) &= a_0 + a_1 e^x + a_2 e^{3x}. \end{aligned}$$

Johdetaan esimerkin vuoksi ratkaisu, kun sovitettava funktio on muotoa

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

eli kantafunktiot ovat 1 ja x.

Minimoitava suure on

$$R = \sum_{i=1}^{N} (y_i - a - bx_i)^2.$$

Osittaisderivaatat ovat

$$\frac{\partial R}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^{N} (y_i - a - bx_i),$$
$$\frac{\partial R}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^{N} (y_i - a - bx_i) x_i.$$

Saadaan normaaliyhtälöt:

$$aN + b \sum x_i = \sum y_i,$$
$$a \sum x_i + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i.$$

eli

$$aN + bS_x = S_y,$$
$$aS_x + bS_{xx} = S_{xy},$$

missä

$$S_x = \sum_{i=1}^{N} x_i,$$
$$S_y = \sum_{i=1}^{N} y_i,$$
$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{N} x_i^2,$$
$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i.$$

Datapisteiden koordinaatit ovat yleensä mittaustuloksia, joilla kullakin on oma virheensä.

Kirjoitetaan minimoitavan suure muotoon

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

missä σ_i on havainnon y_i virhe.

Jos kaikki virheett σ_i ovat samoja, tämä poikkeaa aikaisemmasta versiosta vain vakiokertoimella, jolloin normaaliyhtälöiden ratkaisut eivät muutu.

Kun y:n virheet otetaan huomioon, pienimmän neliösumman suoran normaaliyhtälöt ovat:

$$\begin{aligned} aS + bS_x &= S_y, \\ aS_x + bS_{xx} &= S_{xy}, \end{aligned}$$

missä

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}, \\ S_x &= \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2}, \\ S_y &= \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{\sigma_i^2}, \\ S_{xx} &= \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}, \\ S_{xy} &= \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}. \end{aligned}$$

Normaaliyhtälöiden ratkaisu on

$$\begin{aligned} a &= \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{D}, \\ b &= \frac{S S_{xy} - S_x S_y}{D}, \end{aligned}$$

missä

$$D = S S_{xx} - (S_x)^2.$$

Yleisessä tapauksessa normaaliyhtälöt ovat

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \frac{\partial f(x_i)}{\partial a_k} = 0, \quad k = 1, \ldots, K.$$

Parametrien virhearviot

Virheen kasaantumislain mukaisesti on

$$\sigma_{a_k}^2 = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 \left(\frac{\partial a_k}{\partial y_i} \right)^2 .$$

Sovelletaan tätä suoran tapaukseen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial a}{\partial y_i} &= \frac{S_{xx} - S_x x_i}{\sigma_i^2 D}, \\
\frac{\partial b}{\partial y_i} &= \frac{S x_i - S_x}{\sigma_i^2 D},
\end{aligned}$$

josta

$$\begin{aligned}
\sigma_a^2 &= \sum \sigma_i^2 \left(\frac{S_x x - S_x x_i}{\sigma_i^2 D} \right)^2 \\
&= \frac{1}{D^2} \left[\sum \frac{S_{xx}^2}{\sigma_i^2} + \sum \frac{S_x^2 x_i^2}{\sigma_i^2} - 2 \sum \frac{S x S_{xx} x_i}{\sigma_i^2} \right] \\
&= \frac{1}{D^2} \left[S S_{xx}^2 + S_x^2 S_{xx} - 2 S_x^2 S_{xx} \right] \\
&= \frac{1}{D^2} \left[S_{xx} (S S_{xx} - S_x^2) \right] \\
&= \frac{S_{xx}}{D}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_b^2 &= \sum \sigma_i^2 \left(\frac{S x_i - S_x}{\sigma_i^2 D} \right)^2 \\
&= \frac{1}{D^2} \left[\sum \frac{S^2 x_i^2}{\sigma_i^2} + \sum \frac{S_x^2}{\sigma_i^2} - 2 \sum \frac{S x_i S_x}{\sigma_i^2} \right] \\
&= \frac{1}{D^2} \left[S^2 S_{xx} + S S_x^2 - 2 S S_x^2 \right] \\
&= \frac{1}{D^2} \left[S (S S_{xx} - S_x^2) \right] \\
&= \frac{S}{D}.
\end{aligned}$$

Suoran parametrien hajonnat ovat

$$\begin{aligned}
\sigma_a &= \sqrt{\frac{S_{xx}}{D}}, \\
\sigma_b &= \sqrt{\frac{S}{D}}.
\end{aligned}$$

Matriisiformalismi

Olkoot kantafunktiot $\phi_1, \ldots, \phi_K$, jolloin sovitettava funktio on

$$y(\mathbf{x}) = a_1\phi_1(\mathbf{x}) + \cdots + a_K\phi_K(\mathbf{x}).$$

Selitettävän muuttujan y arvoista muodostetaan pystyvektori

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Muuttujan x arvojen x_i avulla lasketaan matriisi

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_K(\mathbf{x}_1) \\ \phi_1(\mathbf{x}_2) & \phi_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_K(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{x}_n) & \phi_2(\mathbf{x}_n) & \cdots & \phi_K(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}.$$

Ratkaistavat kertoimet muodostavat pystyvektorin

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_K \end{pmatrix}.$$

Jotta sovitettava funktio kuvaisi dataa, täytyy olla

$$\mathbf{Aa} = \mathbf{y}.$$

Tämä yhtälö voidaan ratkaista täsmällisesti vain, jos $\mathbf{A}$ on neliömatriisi, eli havaintoja on yhtä monta kuin kantafunktioita.

Yleisessä tapauksessa voidaan etsiä vektori $\mathbf{a}$, joka antaa minimiarvon normille $\| \mathbf{Aa} - \mathbf{y} \|$.

Residuaalin neliö on

$$R^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \sum_{k=1}^{K} a_k \phi_k(x_i) \right)^2 .$$

Residuaalin minimissä on

$$\frac{\partial R^2}{\partial a_l} = 2 \sum_i \phi_l(x_i) \left(y_i - \sum_k a_k \phi_k(x_i) \right) = 0, l = 1, ..., K,$$

eli

$$\sum_i \phi_l(x_i) \sum_k a_k \phi_k(x_i) = \sum_i y_i \phi_l(x_i), l = 1, ..., K,$$

josta summausjärjestystä vaihtamalla

$$\sum_k \left(\sum_i \phi_k(x_i) \phi_l(x_i) \right) a_k = \sum_i \phi_l(x_i) y_i .$$

Vasemman puolen sulkulauseke on matriisin $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ alkio kl ja oikea puoli on matriisin $\mathbf{A}^T\mathbf{y}$ alkio l:

$$\sum_k (\mathbf{A}^T\mathbf{A})_{kl} a_k = (\mathbf{A}^T\mathbf{y})_l$$

eli

$$[(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{a}]_l = (\mathbf{A}^T\mathbf{y})_l, l = 1, ..., K.$$

Tämä vastaa yhtälöä

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{a} = \mathbf{A}^T\mathbf{y}$$

eli

$$\mathbf{C}\mathbf{a} = \mathbf{d},$$

missä $\mathbf{C} = \mathbf{A}^T\mathbf{A}$ ja $\mathbf{d} = \mathbf{A}^T\mathbf{y}$.

Tämä K:n yhtälön ryhmä on normaaliyhtälöiden matriisimuoto.

Edellä ei otettu huomioon mittausten hajontoja. Yleisessä tapauksessa niitä kuvaa kovarianssimatriisi

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{nn} \end{pmatrix},$$

missä $\sigma_{ii} = \sigma_i^2$. Normaaliyhtälöt ovat

$$\mathbf{Ca} = \mathbf{d},$$

missä

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \Sigma^{-1} \mathbf{A},$$
$$\mathbf{d} = \mathbf{A}^T \Sigma^{-1} \mathbf{y},$$

ja Σ^{-1} on kovarianssimatriisin käänteismatriisi.

Jos mittaukset ovat riippumattomia, kovarianssimatriisi on

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}.$$

Tämän käänteismatriisi on

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 1/\sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/\sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1/\sigma_n^2 \end{pmatrix}.$$

Oletetaan jatkossa, että mittaukset ovat riippumattomia.

Matriisi $\mathbf{C}$ on symmetrinen. Jos mittaukset ovat riippumattomia, on

$$C_{ij} = \sum_{l=1}^{n} \frac{\phi_i(\mathbf{x}_l)\phi_j(\mathbf{x}_l)}{\sigma_l^2}.$$

$$d_i = \sum_{l=1}^{n} \frac{\phi_i(\mathbf{x}_l) y_l}{\sigma_l^2}.$$

Käänteismatriisi $\mathbf{C}^{-1}$ on kovarianssimatriisi, jonka lävistäjältä löytyvät kertoimien varianssit:

$$\sigma_{a_i} = \sqrt{\mathbf{C}_{ii}^{-1}}.$$

Jos $\mathbf{C}^{-1}$ on lävistäjämatriisi, parametrit ovat riippumattomia.

Esimerkki: Alkuperäinen aineisto (x, y, σ):

```
1 1 0.5
3 1 1.0
4 3 0.5
6 4 0.5
```

Sovitetaan tähtän suora, jolloin $\phi_1(x) = 1$, $\phi_2(x) = x$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.25 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.25 \end{pmatrix}, \Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix},$$

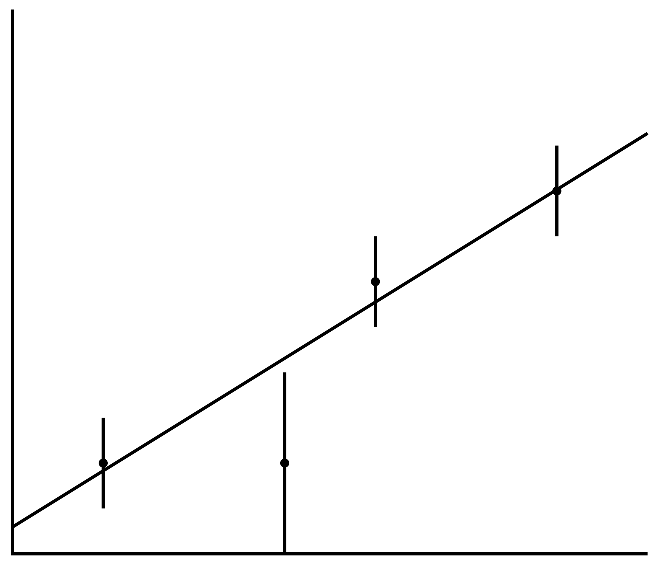
$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \Sigma^{-1} \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 13 & 47 \\ 47 & 221 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{A}^T \Sigma^{-1} \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 33 \\ 151 \end{pmatrix}$$

Saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{pmatrix} 13 & 47 \\ 47 & 221 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 33 \\ 151 \end{pmatrix},$$

jonka ratkaisu on $a = 0.295$, $b = 0.620$



Kerroinmatriisin käänteismatriisi on

$$\mathbf{C}^{-1} = \begin{pmatrix} 0.333 & -0.071 \\ -0.071 & 0.020 \end{pmatrix},$$

josta

$$\sigma_a = \sqrt{0.333} = 0.577, \quad \sigma_b = \sqrt{0.020} = 0.140.$$

Tasojen ja pintojen sovitus

Samalla menetelmällä voidaan sovittaa useamman muuttujan funktioita. Mitään oleellisia muutoksia tästä ei aiheudu; ainoa ero on, että kantafunktiot voivat riippua useammista muuttujista.

Esimerkki: kolmiulotteinen pistejoukko, johon sovitetaan taso. Olkoot pisteiden koordinaatit (x_i, y_i, z_i), $i = 1, \ldots, n$.

Tason yhtälö voidaan esittää esimerkiksi muodossa

$$z = a + bx + cy,$$

jolloin minimoitava residuaali on

$$R = \sum_{i=1}^{n} (z_i - a - bx_i - cy_i)^2.$$

Kyseessä on tavallinen lineaarinen pienimmän neliösumman ongelma, jossa etsitään vakiot a, b ja c.

Kantafunktiot

Jos kyseessä on aineiston empiirinen kuvailu, kantafunktiot voidaan valita aineistoon mahdollisimman hyvin sopivalla tavalla. Usein kantafunktiot kuitenkin ovat peräisin jostakin teoriasta, jolloin niitä ei tietenkään voi muuttaa.

Matriisi **C** on tavallisesti täysi. Ihanteellinen tapaus olisi, jos **C** olisi diagonaalimatriisi, jolloin kukin parametreista a_i voidaan ratkaista täysin muista riippumatta. Näin käy, jos kantafunktiot ϕ_j ovat ortogonaalisia.

Funktiot f ja g ovat ortogonaalisia, jos niiden skalaaritulo

$$\int_L f(x)g(x)\ dx$$

on nolla. Integrointiväli L riippuu käytetystä funktioluokasta. Esimerkiksi sini ja kosini ovat ortogonaalisia välillä $[0, 2\pi]$.

Kun tarkastellaan funktioita vain tietyissä pisteissä x_i, $i = 1, \ldots, n$, funktioiden f ja g skalaaritulo korvataan summalla

$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i)g(x_i).$$

Kertoimen C_{ij} lauseke on juuri kantafunktioiden ϕ_i ja ϕ_j skalaaritulo, joten se häviää, jos nämä funktiot ovat ortogonaalisia.

Diskreetissä tapauksessa skalaaritulon arvo riippuu paitsi funktioista myös käytetystä pistejoukosta. Esimerkiksi sini ja kosini ovat ortogonaalisia äärellisessä pistejoukossa edellyttäen, että pisteet ovat tasavälisiä. Sen sijaan mielivaltaiselle pistejoukolle summa $\sum \sin x_i \cos x_i$ ei yleensä häviä.

Polynomit

Kantafunktioina muuttujan x potenssien joukko, jolloin sovitettava funktio kokonaisuudessaan on polynomi

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n.$$

Polynomi voi käyttäytyä huonosti havaintopisteiden ulkopuolella.

Kun astelukua lisätään, polynomi saadaan kulkemaan kaikkien haluttujen pisteiden kautta, mutta niiden välillä se voi heilahdella voimakkaasti. **Usein korkein järkevä asteluku on noin 4–5.**

Jos aineistossa on pitkiä aukkoja, sovitettuun käyrään saattaa ilmaantua asiaankuulumattomia mutkia.

Polynomisovituksen kerroinmatriisi

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^K \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^K \\ & & & \vdots & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^K \end{pmatrix}$$

on ns. Vandermonden matriisi. Suurilla K:n arvoilla sen häiriöalttius tulee hyvin suureksi.

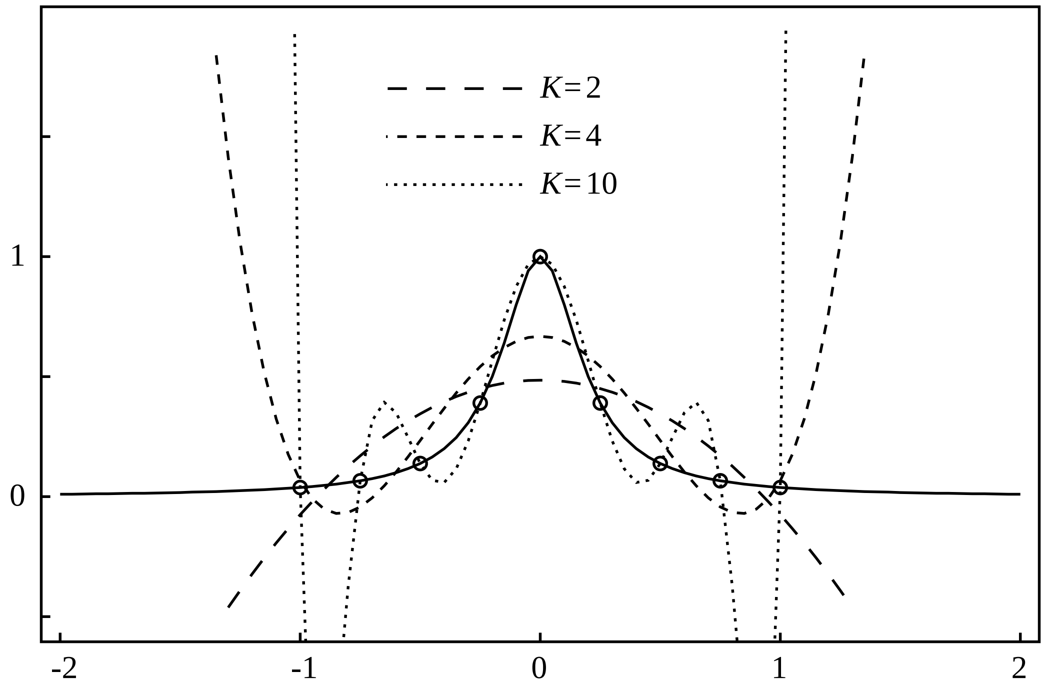
Regularisointimenetelmät "jäykistävät" sovitettavaa funktiota ja estävät sen liialliset heilahtelut. Esimerkiksi voidaan rajoittaa korkeimmanasteisten termien kertoimia, mikä merkitsee korkeampien derivaattojen pitämistä pieninä.

Regularisointi voidaan toteuttaa esimerkiksi korvaamalla minimoitava residuaali lausekkeella

$$\sum_i (y_i - P(x_i))^2 + \lambda \sum_i P''(x_i)^2,$$

missä λ on jokin vakio. Tämän lausekkeen minimointi johtaa ratkaisuun, jossa polynomien toiset derivaatat ovat pieniä, joten käyrässä ei esiinny jyrkkiä mutkia.

Kuvataan Rungen funktiota 9 pisteellä ja sovitetaan niihin eri asteisia polynomeja:



Fourier'n sarjat

Mikäli havaittu ilmiö on jaksollinen, tulokset on usein kätevää esittää Fourier'n sarjana:

$$f(x) = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} A_k \cos \frac{2\pi kx}{P} + \sum_{k=1}^{\infty} B_k \sin \frac{2\pi kx}{P},$$

missä P on jakson pituus.

Jos aineisto ei ole tasavälistä, kertoimien laskeminen on hankalaa. Helpoin tapa on ratkaista ongelma pienimmän neliösumman sovituksena. Kantafunktiona ovat $\sin kx$ ja $\cos kx$.

Mahdollisia ongelmia:

1) Lineaarisessa sovituksessa jakso on tunnettava etukäteen. Mikäli sekin halutaan sovittaa samanaikaisesti, joudutaan ratkaisemaan epälineaarinen tehtävä.

2) Jos aineisto ei ole tasavälinen, kantafunktiot eivät ole ortogonaalisia. Myös sarjan alkupään kertoimet muuttuvat, jos sarjaan lisätään uusia termejä. Jos sarjalle käytetään aineistosta riippuvaa katkaisukriteeriä (esimerkiksi lisätään termejä, kunnes R ei enää oleellisesti pienene), eri aineistoja ei enää voi luotettavasti vertailla keskenään. Mikäli eri aineistoja halutaan verrata, on jokainen aineisto esitettävä yhtä monella termillä.

3) Aineiston tulisi kattaa ainakin yksi kokonainen jakso, eikä siinä saisi olla pitkiä katkoja. Muuten kertoimien virheet voivat tulla hyvin suuriksi.

4) Jos mitattavassa suureessa esiintyy Nyquistin taajuutta korkeampia taajuuksia, ne voivat aiheuttaa mitattuihin arvoihin matalia taajuuksia, joita todellisuudessa ei ole olemassakaan.

5) Jos aineistossa esiintyy jyrkkiä hyppäyksiä, sarja suppenee niiden lähellä varsin hitaasti.

Epälineaariset sovitukset

Joissakin erikoistapauksissa tehtävä voidaan muuntaa lineaariseen muotoon.

$$f(x) = ae^{-bx},$$

Sovitetaankin funktion f logaritmi

$$\ln f(x) = a' - bx,$$

missä $a' = \ln a$. Tuloksena on lineaarinen tehtävä.

Mikäli sovitettavan funktion derivaatat parametrien suhteen pystytään laskemaan, voidaan parametreille johtaa yhtälöryhmä, kuten lineaarisessakin tapauksessa. Yhtälöryhmä on kuitenkin epälineaarinen.

Jos derivaattoja ei pystytä laskemaan analyyttisesti, tai jos tuloksena on kovin mutkikas yhtälöryhmä, on helpompaa käyttää jotakin minimointiohjelmaa.