PNS eli Pienimmän NeliöSumman menetelmä

Kari Peisa LapinAMK/2015

Lineaarisen yhtälöryhmän parhaan ratkaisun etsiminen pienimmän neliösumman menetelmällä (Least Square Solution)

P**ienimmän neliösumman menetelmää** käytetään etsittäessä **lineaariselle yhtälöryhmälle parasta mahdollista ratkaisua tapauksissa, joissa yksikäsitteistä tai lineaarisesti riippuvaa ratkaisua ei voida määrittää**. Tällainen tilanne syntyy esimerkiksi, kun on tehty useita mittauksia samojen tuntemattomien arvojen määrittämiseksi ja mittausepätarkkuuksista johtuen matemaattisen mallin mukainen yhtälöryhmä ei ole ratkeava.

Pienimmän neliösumman menetelmässä etsitään sellainen ratkaisu, jonka poikkeavuus kaikista mittaustuloksista on pienin mahdollinen. Sanonta pienin neliösumma johtuu siitä, että menetelmässä määritetään ratkaisun ja mittausjoukon minimipoikkeavuus ns. poikkeamien eli residuaalien neliöiden summan minimiarvona.

PNS-menetelmässä on myös kyse halutun funktiomallin sovittamisesta mittausaineistoon. Funktiomalli voi koostua useiden eri funktioiden lineaariyhdistelmästä

$$f(x) = a * f_1(x) + b * f_2(x) + \ldots$$

Menetelmässä etsitään parametreille a, b, ... arvot siten, että malli kulkee mahdollisimman läheltä kaikkia mittausdatan pisteitä (x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n)

Esimerkki lineaarisen mallin sovittamisesta (lineaarinen regressio)

On etsittävä suoralle

$$y = f(x) = k\,x + b \qquad (1)$$

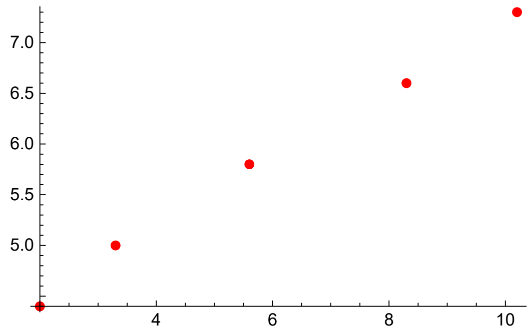
parametrit k ja b, kun mittaamalla on saatu viisi suoran pistettä $\{\{x_1, y_1\},\{x_2, y_2\},\{x_3, y_3\},\{x_4, y_4\},\{x_5, y_5\}\}$. Haluttu suora kulkee vain tietyllä tarkkuudella pistejoukon kautta. Sijoittamalla mitatut koordinaatit yhtälöön (1) sadaan yhtälöryhmä

$$\begin{pmatrix} k\,x_1 + b = y_1 \\ k\,x_2 + b = y_2 \\ k\,x_3 + b = y_3 \\ k\,x_4 + b = y_4 \\ k\,x_5 + b = y_5 \end{pmatrix},$$

jossa yksikään yhtälö ei välttämättä toteuta ratkaisusuoran yhtälöä. Pienimmän neliösumman menetelmällä voimme kuitenkin määrittää parametrit k ja b sellaiselle suoralle, jonka etäisyys koko pistejoukosta on minimoitu.

Olkoot mitatut koordinaatiston pisteet (data) esimerkiksi

```
((2.0, 4.4), (3.3, 5.0), (5.6, 5.8), (8.3, 6.6), (10.2, 7.3))
```



Tällöin saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{pmatrix} b + 2.\, k = 4.4 \\ b + 3.3\, k = 5. \\ b + 5.6\, k = 5.8 \\ b + 8.3\, k = 6.6 \\ b + 10.2\, k = 7.3 \end{pmatrix}$$

Grafiikastakin jo näkee ettei yo. lineaarisella yhtälöryhmällä voi olla yksikäsitteistä ratkaisua, koska pisteet eivät ole samalla suoralla

Yhtälöryhmän matriisimuotoinen esitys saadaan kerroinmatriisin ja vakiomatriisin avulla

$$\begin{pmatrix} 2. & 1 \\ 3.3 & 1 \\ 5.6 & 1 \\ 8.3 & 1 \\ 10.2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4.4 \\ 5. \\ 5.8 \\ 6.6 \\ 7.3 \end{pmatrix}$$

Seuraavissa osioissa tarkastellaan edellisen menetelmän toteutuksia eri laskentaympäristöissä ja joissakin esimerkkitilanteissa.

A. Pienimmän neliösumman menetelmä matriisioperaatioiden avulla

Menetelmä voidaan toteuttaa (tiettyjen reunaehtojen ollessa voimassa, joita ei tässä käsitellä) matriisioperaatioilla seuraavasti

Lineaarinen yhtälöryhmä

$A X == Y,$

A = yhtälöryhmän kerroinmatriisi $\begin{pmatrix} 2. & 1 \\ 3.3 & 1 \\ 5.6 & 1 \\ 8.3 & 1 \\ 10.2 & 1 \end{pmatrix}$,

X on tuntemattomien parametrien muodostama matriisi $\begin{pmatrix} k \\ b \end{pmatrix}$ **ja**

Y on tunnettujen arvojen muodostama matriisi $\begin{pmatrix} 4.4 \\ 5. \\ 5.8 \\ 6.6 \\ 7.3 \end{pmatrix}$

Kerrotaan yhtälö puolittain vasemmalta kerroinmatriisin transponoidulla matriisilla

$A^T A X == A^T Y$

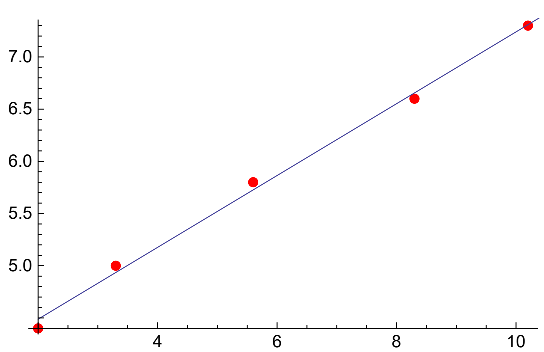
Kerrotaan yhtälö puolittain vasemmalta käänteismatriisilla $\left(A^T A\right)^{-1}$

$\left(A^T A\right)^{-1} \left(A^T A\right) X == \left(A^T A\right)^{-1} A^T Y$

Edellisestä saadaankin **pienimmän neliösumman ratkaisu**

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} k \\ b \end{pmatrix} = \left(A^T A\right)^{-1} A^T Y = \begin{pmatrix} 0.343612 \\ 3.79956 \end{pmatrix}$$

Alla lineaarisen mallin sovitus saaduilla parametrien k ja b arvoilla sekä alkuperäinen data



B. Pienimmän neliösumman menetelmä differentiaalilaskennan menetelmien avulla

Matriisimenetelmällä saatu PNS – ratkaisu

$$X = \left(A^T A\right)^{-1} A^T Y$$

on yhtäpitävä differentiaalilaskennan menetelmien avulla saatavan ratkaisun kanssa. Osoittautuu, että normin

$\|A X - Y\|$

osittaisderivaattojen nollakohdat toteutuvat, kun $A^T A X == A^T Y$. Normi voidaan määritellä esimerkiksi datapisteiden ja funktiomallin välisenä **virhefunktiona** (**MSE = Mean square error**), joka on datapisteiden ja mallin y – koordinaattien välisten etäisyyksien neliöiden keskiarvo. MSE on siten mallin parametreista a, b, ... riippuva monen muuttujan funktio.Esimerkin tapauksessa saadaan

$$\mathrm{MSE}(k, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^{5} (y_i - (k x_i + b))^2$$

$$= \frac{1}{5} \left((7.3 - b - 10.2\,k)^2 + (6.6 - b - 8.3\,k)^2 + (5.8 - b - 5.6\,k)^2 + (5. - b - 3.3\,k)^2 + (4.4 - b - 2.\,k)^2 \right)$$

Parametrien k ja b PNS-ratkaisut saadaan ratkaisemalla osittaisderivaattojen nollakohdista saatu yhtälöpari

$$\begin{cases} \partial_k \mathrm{MSE}(k, b) & = -74.808 + 11.76\,b + 87.672\,k = 0 \\ \partial_b \mathrm{MSE}(k, b) & = -11.64 + 2\,b + 11.76\,k = 0 \end{cases}$$

k = 0.3436, b = 3.7996

C. PNS laskentaympäristön sisäänrakennetun funktion avulla

Laskentaympäristöihin on yleensä sisäänrakennettu funktio, joka toteuttaa PNS-menetelmän. Esimerkiksi ***Mathematicassa*** (yksi) sisäänrakennettu funktio on nimeltään **LeastSquares[A,Y]**, missä matriisi A on edelläkin esiintyvä lineaarisen yhtälöryhmän klerroinmatriisi ja matriisi Y on datapisteiden y-koordinaateista muodostettu matriisi (kts. edellä)

***Mathematica* :**

```
LeastSquares[A, Y]
```

```
{{0.3436}, {3.7996}}
```

Funktion käyttäjälle jää tehtäväksi lähinnä muodostaa kerroinmatriisi A ja vakiomatriisi Y. *Mathematicassa* on myös muita sisäänrakennettuja funktioita, joilla PNS-menetelmä voidaan toteuttaa

Eri laskentaympäristöissä voi olla hyvin erilaisia PNS-menetelmän funktioita. Esimerkiksi Maximassa edelliseen esimerkkiin soveltuva funktion kutsu on muotoa

```
lsquares_estimates(data,[x,y],y=k*x+b,[k,b])
```

Parametri data on alkuperäisten pisteiden muodostama data matriisimuodoss

Funktio täytyy ladata ensin komennolla **load(lsquares)**.

Maxima:

```
load(lsquares);
```

C:\maxima–
5.38×.1\share\maxima\5.38×.1_5_gdf93b7b_dirty\share\lsquares\lsquares.mac

```
data:matrix([2.,4.8],[3.3,5.],[5.6,5.8],[8.3,6.7],[10.2,7.5]);
```

$$\begin{bmatrix} 2 & 4.8 \\ 3.3 & 5 \\ 5.6 & 5.8 \\ 8.3 & 6.7 \\ 10.2 & 7.5 \end{bmatrix}.$$

Datan jälkeisessä 2. argumentissa esitelllään muuttujat, sitten malli (yhtälö) ja lopuksi määritettävät parametrit.

```
lsquares_estimates(data,[x,y],y=k*x+b,[k,b]) ,numer;
```

$[[k = 0.3339811695603351, b = 3.99619072298523]]$

Excelissä on myös funktio **LINREG()** (eng. LINEST()), jolla PNS-menetelmä lineaarisen sovituksen tapauksessa voidaan toteuttaa.

D. PNS-menetelmä epälineaaristen mallien sovituksessa

Sisäänrakennetuilla funktioilla voidaan ratkaista mistä tahansa funktioista koostuvan lineaariyhdistelmän $y = a * f_1(x) + b * f_2(x) + \ldots$ sovitus datapisteisiin.

Esimerkiksi seuraavassa sovitetaan edelliseen dataan 2. asteen polynomifunktio (paraabeli) y=a*x^2+b*x+c, joka on funktioiden 1, x ja x^2 lineaariyhdistelmä.

Maxima:

```
lsquares_estimates(data,[x,y],y=a*x^2+b*x+c,[a,b,c])
```

Mathematica:

```
FindFit[data,a*x^2+b*x+c,{a,b,c},x]
```

Myös Excelissä on mahdollista tehdä useiden funktioiden lineaariyhdistelmän parametrien määritys LINREG()-funktiolla joskin se on hieman mutkikasta (monen muuttujan regressio).

Tehtävät

1. Etsi pienimmän neliösumman menetelmällä paras ratkaisuestimaatti yhtälöryhmälle

$$x_1 - x_2 = 1.5$$
$$x_1 + x_2 = 3.8$$
$$2 x_1 + x_2 = 7.9$$

2. Määritä pienimmän neliösumman menetelmällä suoran $y = k x + b$ parametrit k ja b, kun suoralle on mittaamalla määritetty pisteet **{1.45,3.51},{1.97,3.78},{2.93,4.35}** ja **{3.92,4.90}**. Piirrä datapisteet ja suora samaan koordinaatistoon.

3. Määritä pienimmän neliösumman menetelmällä paraabelin $y = a x^2 + b x + c$ parametrit a , b ja c, kun paraabelille on mittaamalla määritetty pisteet **{1.45,3.51},{1.97,3.78},{2.93,4.35}** ja **{3.92,4.90}**. Piirrä datapisteet ja paraabeli samaan koordinaatistoon.

4. Sovita pienimmän neliösumman menetelmällä taso $z = a x + \ b y \ + c$, joka parhaiten kulkee neljän pisteen **{1.,0,3.54},{1.,1.,3.78},{0.,1.,3.65}** ja **{0.,0.,3.55}** kautta

vast. **1. x1=3.06429, x2=1.35714** **2. k=0.567269, b=2.67854**
3. a=0.001564, b= 0.5588, c=2.6885 **4. a=0.06, b=0.17, c=3.515**