Metoda nejmenších čtverců

Ondřej Pangrác

Lineární algebra 2

Soustavy rovnic

Uvažme $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ hodnosti n, t.j. sloupce A jsou lineárně nezávislé.

Poznamenejme, že LNZ sloupců je ekvivalentní tomu, že soustava $Ax = b$ má jednoznačné řešení (pokud existuje) a že matice $A^T A$ je regulární.

Nyní uvažme případ, kdy pro daný vektor $b \in \mathbb{R}^m$ soustava $Ax = b$ řešení nemá.

Přibližné řešení

To znamená, že $b \notin S(A)$ a my se budeme snažit najít “co nejlepší přibližné řešení”.

Co to ale znamená “co nejlepší”? Protože $Ax = b$ řešení nemá, nemůžeme měřit vzdálenost přibližného řešení od skutečného.

Místo toho se bude snažit co nejvíce přiblížit pravé straně.

Matematicky zapsáno, hledáme x', aby $Ax' - b$ bylo minimální, přičemž velikost této chyby budeme měřit v euklidovské metrice v $\mathbb{R}^m$ a místo minimalizace $||e||$ budeme minimalizovat $||e||^2$, což je ekvivalentní (a lépe se s tím počítá).

Takže minimalizujeme $||e||^2 = \sum e_i^2$ – z toho název metoda nejmenších čtverců.

Normální soustava rovnic

Pokud chceme minimalizovat $||Ax' - b||$, hledáme vlastně vektor $b' = Ax' \in S(A)$ co nejbližší vektoru b.

A nejbližší prvek podprostoru je přece projekce.

To znamená, že hledáme x', aby Ax' byla projekce b do $S(A)$.

Potom je $e = Ax - b$ kolmý na $S(A) = R(A^T)$, to znamená $e \in R(A^T)^\perp = Ker(A^T)$, neboli $A^T e = 0$.

Po dosazení

$$0 = A^T e = A^T(Ax' - b) = A^T Ax' - A^T b\ ,$$

což převedeme na $A^T Ax' = A^T b$, tzv. normální soustava rovnic.

Řešení

Řešíme soustavu

$$A^T A x' = A^T b \, .$$

Protože $rank(A) = n$, je $A^T A$ regulární a existuje k ní inverzní matice.

Tedy lze psát

$$\begin{aligned} x' &= (A^T A)^{-1} A^T A x' = (A^T A)^{-1} A^T b, \\ b' &= A x' = A (A^T A)^{-1} A^T b. \end{aligned}$$