5. Vähimruutude meetod ehk regressioon

Olgu sõlmedes

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$$

antud funktsiooni väärtused $f(x_0), \ldots f(x_n)$. Otsime mingisse etteantud funktsioonide klassi (nt polünoomid) kuuluvat funktsiooni $\Phi(x)$, mis lähendaks funktsiooni $f(x)$ nendes sõlmedes. Kõige loomulikum on sellisel juhul lahendada interpolatsiooniülesanne, st määrata $\Phi(x)$ nii, et $\Phi(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \ldots, n$. Paraku ei ole alati võimalik interpolatsiooniülesannet lahendada. Näiteks, kui me otsime $\Phi(x)$ polünoomide hulgast, mille aste on väksem kui sõlmede arv miinus 1, siis on interpolatsiooniülesanne ülemääratud ja seega ei tarvitse tal lahendit olla. Küllalt tüüpiline on olukord, kus teatakse, et $\Phi(x)$ on lineaarne funktsioon, st tema graafik on sirge, kuid tabelis etteantud punktid ei asetse ühel sirgel (on saadud näiteks mõõtmiste tulemusena ja sisaldavad vigu).

Püstitame järgmise üldisema ülesande: leida $\Phi(x)$ nii, et ta langeks sõlmedes $x_0, \ldots, x_n$ "kõige paremini" kokku funktsiooni $f(x)$ väärtustega. Funktsioonide $\Phi(x)$ ja $f(x)$ erinevust sõlmes x_i iseloomustab järgmine vahe:

$$\Phi(x_i) - f(x_i).$$

Teiste sõnadega: meid huvitab niisugune funktsioon $\Phi(x)$, mille korral taolised vahed on kõige väiksemad.

Paraku ei ole praktiliselt võimalik leida sellist lahendit $\Phi(x)$, et kõik vahed $\Phi(x_i) - f(x_i)$, $i = 0, \ldots, n$ oleksid vähimad. Tüüpiliselt vähendades ühte vahet, teine kasvab. Seetõttu lahendatakse antud ülesanne teisiti. Funktsioonide $\Phi(x)$ ja $f(x)$ erinevuse mõõduks sõlmedes võetakse vahede ruutude kaalutud summa

$$J(\Phi) \;=\; \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \left(\Phi(x_i) - f(x_i)\right)^2 \,, \tag{8.1}$$

kus $\varkappa_i > 0$. Konkreetselt otsitakse niisugust funktsiooni $\Phi(x)$, mille korral on $J(\Phi)$ minimaalne. See on nn *vähimruutude* ehk *regressiooniülesanne*. Seejuures nimetatakse minimeeritavat suurust $J(\Phi)$ *vähimruutude funktsionaaliks*. Suurused $\varkappa_i$ on *kaalud*. Kaalud võimaldavad varieerida funktsioonide $\Phi(x)$ ja $f(x)$ kokkulangemise määra erinevates sõlmedes.

Kui ei ole põhjust eelistada osasid sõlmi teistele, siis võib kaalud võtta võrdseks ühega ning $J(\Phi)$ on järgmisel kujul:

$$J(\Phi) \;=\; \sum_{i=0}^{n} \left(\Phi(x_i) - f(x_i)\right)^2 \,.$$

Üldjuhul ei läbi vähimruutude meetodiga saadava lähendi Φ graafik etteantud punkte $P(x_i, f(x_i))$, vaid jookseb nende lähedalt läbi.

Kuna $J(\Phi)$ on mittenegatiivsete arvude summa, ei saa ta omada nullist väiksemaid väärtusi, st alati $J(\Phi) \geq 0$. Märgime, et kui funktsionaali $J(\Phi)$ miinimum võrdub nulliga, siis on see miinimum ühtlasi interpolatsiooniülesande

$$\Phi(x_i) = f(x_i)\,, \quad i = 0, \ldots, n, \tag{8.2}$$

lahendiks. Tõepoolest, kui $J(\Phi) = 0$, siis $\Phi(x_i) - f(x_i) = 0$ iga $i = 0, \ldots, n$ korral, millest tuleneb (8.2). Kui interpolatsiooniülesandel lahendit ei ole, siis on $J(\Phi)$ miinimum nullist suurem.

Juhul kui Φ on ühtlasi ka interpolatsiooniülesande lahend, siis läbib Φ graafik kõiki punkte $P(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \ldots, n$.

Järgnevalt vaatleme mõningaid praktikas enam esinevad juhte.

4.1. Lineaarne vähimruutude meetod ehk lineaarne regressioon

Lähendit otsitakse järgmisel kujul:

$$\Phi_1(x) = c_1 x + c_2.$$

kus c_1 ja c_2 on kordajad, mis tuleb määrata.

Antud juhul on on vähimruutude funktsionaal muutujate c_1 ja c_2 funktsioon, st

$$J(\Phi) = J(c_1, c_2) = \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right)^2.$$

Meil tuleb leida $J(c_1, c_2)$ miinimum. Matemaatilisest analüüsist on teada, et kahemuutuja funktsiooni miinumum saavutatakse statsionaarses punktis, so punktis, kus mõlemad osatuletised võrduvad nulliga.

Arvutame J osatuletised:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial c_1} &= \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \frac{\partial}{\partial c_1} \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right)^2 \\
&= \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \, 2 \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right) \frac{\partial}{\partial c_1} \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right) \\
&= 2 \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \, \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right) x_i,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial c_2} &= \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \frac{\partial}{\partial c_2} \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right)^2 \\
&= \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \, 2 \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right) \frac{\partial}{\partial c_2} \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right) \\
&= 2 \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \, \left(c_1 x_i + c_2 - f(x_i)\right).
\end{aligned}$$

Seega tuleb lahendada süsteem

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i \, (c_1 x_i + c_2 - f(x_i))\, x_i = 0, \\ \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i \, (c_1 x_i + c_2 - f(x_i)) = 0. \end{cases}$$

Teisendame süsteemi nii, et jätame otsitavaid suurusi c_1 ja c_2 sisaldavad liikmed vasakule poole ja viime ülejäänud liikmed paremale poole. Saame

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i^2 \cdot c_1 \; + \; \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i \cdot c_2 \; = \; \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i f(x_i), \\ \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i \cdot c_1 \; + \; \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i \cdot c_2 \; = \; \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i f(x_i). \end{cases}$$

Tegemist on 2×2 lineaarse võrrandisüsteemiga suuruste c_1 ja c_2 määramiseks. Maatrikskujul näeb see süsteem välja nii:

$$Ac = b,$$

kus

$$A = \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i^2 & \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i \\ \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i & \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i x_i f(x_i) \\ \sum\limits_{i=0}^{n} \varkappa_i f(x_i) \end{pmatrix}$$

ja $c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$.

4.2. Mittelineaarne vähimruutude meetod ehk mittelineaarne regressioon

Lähendit otsitakse kõrgema astme polünoomina, st järgmisel kujul:

$$\Phi_m(x) = c_1 x^m + c_2 x^{m-1} + \ldots + c_m x + c_{m+1}, \quad m \geq 2,$$

kus c_1, $c_2, \ldots, c_{m+1}$ on tundmatud kordajad.

Selle alamjuhud on omakorda *ruutregressioon* ($m = 2$), *kuupregressioon* ($m = 3$) jne.

Mittelineaarse regressiooni korral on vähimruutude funktsionaal $m+1$ muutuja funktsioon, st

$$J(\Phi) = J(c_1, c_2, \ldots, c_{m+1}) = \sum_{i=0}^{n} \varkappa_i \left(c_1 x_i^m + c_2 x_i^{m-1} + \ldots + c_m x_i + c_{m+1} - f(x_i) \right)^2.$$

Miinimum eksisteerib jällegi statsionaarses punktis. Viimase leidmiseks tuleb lahendada süsteem

$$\frac{\partial J}{\partial c_1} = 0\,, \; \frac{\partial J}{\partial c_2} = 0\,, \ldots, \; \frac{\partial J}{\partial c_{m+1}} = 0.$$

On võimalik näidata, et see süsteem omab järgmist kuju:

$$\sum_{j=1}^{m+1}\left(\sum_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^{2(m+1)-j-k}\right)c_j = \sum_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^{m+1-k}f(x_i)\,, \quad k=1,2,\ldots,m+1.$$

Näiteks ruutregressiooni korral, kui otsitakse lähendit kujul $\Phi(x) = c_1x^2 + c_2x + c_3$, tekib 3×3 lineaarne võrrandisüsteem

$$Ac = b,$$

kus

$$A = \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^4 & \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^3 & \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^2 \\ \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^3 & \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^2 & \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i \\ \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^2 & \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i & \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i^2 f(x_i) \\ \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i x_i f(x_i) \\ \sum\limits_{i=0}^{n}\varkappa_i f(x_i) \end{pmatrix}$$

ja $c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$.

4.3. Eksponentsiaalne vähimruutude meetod ehk eksponentsiaalne regressioon

Lähendit otsitakse järgmisel kujul:

$$\Phi(x) = ae^{bx},$$

Eksponentsiaalselt regressioonilt saab väga lihtsalt üle minna lineaarsele. Selleks tuleb ülesandes antud funktsiooni väärtusi ja otsitavat lähendit logaritmida. Nimelt $\Phi(x)$ logaritm on lineaarne funktsioon:

$$\Phi_1(x) = \ln\Phi(x) = \ln\left(ae^{bx}\right) = \ln a + bx = c_1x + c_2, \quad \text{kus } c_1 = b,\ c_2 = \ln a.$$

Kui arvutada tabelis antud funktsiooni väärtuste logaritmid $f_1(x_i) = \ln f(x_i)$ ja lahendada lineaarne vähimruutude ülesanne logaritmitud tabeliga, siis saadava lineaarse lähendi $\Phi_1(x) = c_1x + c_2$ kordajate kaudu on võimalik arvutada ka esialgsele tabelile vastav eksponentsiaalne lähend ja selle kordajad:

$$\Phi(x) = e^{c_1x+c_2} = ae^{bx}\,,$$

$$a = e^{c_2}\,,\ \ b = c_1.$$