

Основы теории идентификации

Лекция 2: Статический инструментарий теории идентификации

Метод наименьших квадратов

Арановский Станислав Владимирович

aranovskiy sv@niuitmo.ru



Осень, 2014

Содержание

- 1 Пример: Идентификация силы трения
- 2 Метод наименьших квадратов. Детерминированная задача.
- 3 Пример использования МНК для аппроксимации
- 4 Метод наименьших квадратов. Стохастическая задача.
- 5 Промежуточные итоги

Содержание

- 1 Пример: Идентификация силы трения
- 2 Метод наименьших квадратов. Детерминированная задача.
- 3 Пример использования МНК для аппроксимации
- 4 Метод наименьших квадратов. Стохастическая задача.
- 5 Промежуточные итоги

Идентификация силы трения

Рассмотрим простую модель силы трения, Кулоново и вязкое трение:

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v,$$

где F_c – величина Кулонова трения, F_v – коэффициента вязкого трения, v – скорость движения тела.

Идентификация силы трения

Рассмотрим простую модель силы трения, Кулоново и вязкое трение:

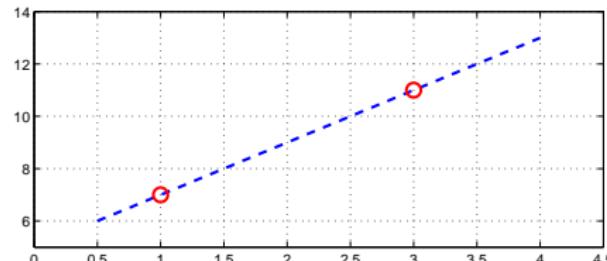
$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v,$$

где F_c – величина Кулонова трения, F_v – коэффициента вязкого трения, v – скорость движения тела.

Пусть в ходе некоторого эксперимента мы измерили пары значений (v_1, F_1) и (v_2, F_2) , $v_1, v_2 > 0$. Тогда мы можем легко подсчитать:

$$F_v = \frac{F_2 - F_1}{v_2 - v_1}$$

$$F_c = F_1 - F_v v_1 = F_2 - F_v v_2$$



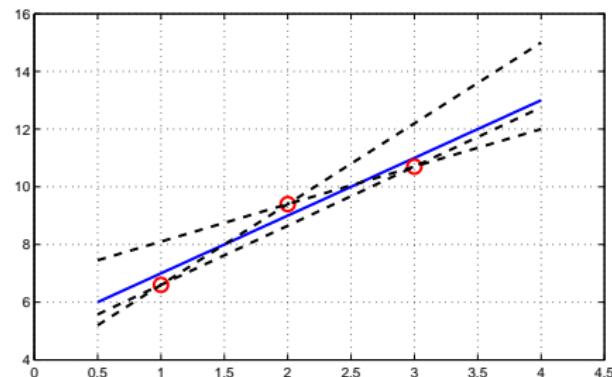
Идентификация силы трения

Рассмотрим простую модель силы трения, Кулоново и вязкое трение:

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v,$$

где F_c – величина Кулонова трения, F_v – коэффициента вязкого трения, v – скорость движения тела.

Но что делать, если мы измерили три точки?



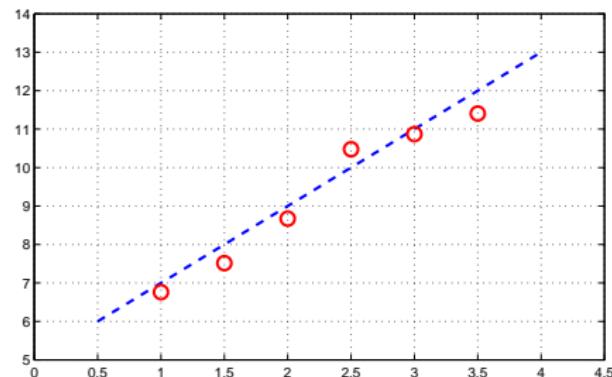
Идентификация силы трения

Рассмотрим простую модель силы трения, Кулоново и вязкое трение:

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v,$$

где F_c – величина Кулонова трения, F_v – коэффициента вязкого трения, v – скорость движения тела.

Но что делать, если мы измерили три точки? Много точек?



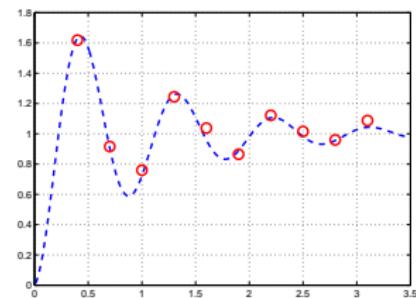
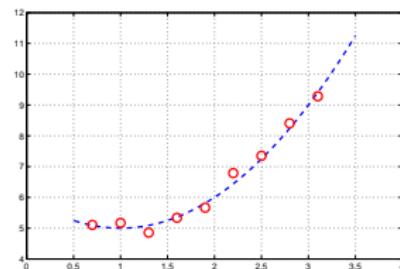
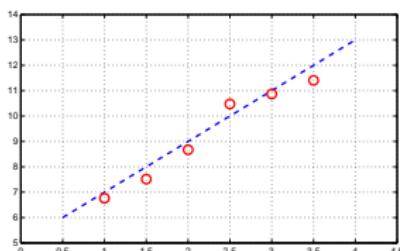
Идентификация силы трения

Рассмотрим простую модель силы трения, Кулоново и вязкое трение:

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v,$$

где F_c – величина Кулонова трения, F_v – коэффициента вязкого трения, v – скорость движения тела.

Как вообще найти наилучшую аппроксимацию?



Содержание

- 1 Пример: Идентификация силы трения
- 2 Метод наименьших квадратов. Детерминированная задача.
- 3 Пример использования МНК для аппроксимации
- 4 Метод наименьших квадратов. Стохастическая задача.
- 5 Промежуточные итоги

Постановка задачи

Регрессионная модель: $y = g(x_1, x_2, \dots, x_m)$, где независимые переменные x_i – регрессоры.

Постановка задачи

Регрессионная модель: $y = g(x_1, x_2, \dots, x_m)$, где независимые переменные x_i – регрессоры.

Линейная регрессия: $y = x_1\theta_1 + x_2\theta_2 + \dots + x_m\theta_m = \sum_{i=1}^m x_i\theta_i$

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}$$

где $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{x} = \text{col}\{x_i\}$ и $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\theta} = \text{col}\{\theta_i\}$.

Постановка задачи

Регрессионная модель: $y = g(x_1, x_2, \dots, x_m)$, где независимые переменные x_i – регрессоры.

Линейная регрессия: $y = x_1\theta_1 + x_2\theta_2 + \dots + x_m\theta_m = \sum_{i=1}^m x_i\theta_i$

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}$$

где $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{x} = \text{col}\{x_i\}$ и $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\theta} = \text{col}\{\theta_i\}$.

Пример

$$F = F_c \text{sign} v + F_v v = \begin{bmatrix} \text{sign} v & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_c \\ F_v \end{bmatrix} = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}$$

$$\text{где } \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \text{sign} v \\ v \end{bmatrix} \text{ и } \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} F_c \\ F_v \end{bmatrix}$$

Важно: используемая модель это только аппроксимация.

Постановка задачи, продолжение

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}$$

Пусть проведено N измерений $(y(k), \mathbf{x}(k))$, $k = 1, \dots, N$. Тогда можно записать $y(k) = \mathbf{x}^\top(k) \boldsymbol{\theta}$ или

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta},$$

где $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{Y} = \text{col}\{y(k)\}$ и $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times m}$, $\mathbf{X} = \text{col}\{\mathbf{x}^\top(k)\}$,

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1(1) & x_2(1) & \cdots & x_m(1) \\ x_1(2) & x_2(2) & \cdots & x_m(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1(N) & x_2(N) & \cdots & x_m(N) \end{bmatrix}$$

Постановка задачи, продолжение

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta} \Rightarrow Y = X\boldsymbol{\theta}$$

Задача: найти наилучшую аппроксимацию. Как оценить качество аппроксимации?

Постановка задачи, продолжение

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta} \Rightarrow Y = X\boldsymbol{\theta}$$

Задача: найти наилучшую аппроксимацию. Как оценить качество аппроксимации?

Для $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ найдем оценку $\hat{y}(k) = \mathbf{x}^\top(k)\hat{\boldsymbol{\theta}}$ и ошибку оценивания

$$\begin{aligned} e(k) &= y(k) - \hat{y}(k) = y(k) - \mathbf{x}^\top(k)\hat{\boldsymbol{\theta}}, \\ \mathbf{e} &= \text{col}\{e(k)\} \in \mathbb{R}^N. \end{aligned}$$

Постановка задачи, продолжение

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta} \Rightarrow Y = X\boldsymbol{\theta}$$

Задача: найти наилучшую аппроксимацию. Как оценить качество аппроксимации?

Для $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ найдем оценку $\hat{y}(k) = \mathbf{x}^\top(k)\hat{\boldsymbol{\theta}}$ и ошибку оценивания

$$\begin{aligned} e(k) &= y(k) - \hat{y}(k) = y(k) - \mathbf{x}^\top(k)\hat{\boldsymbol{\theta}}, \\ \mathbf{e} &= \text{col}\{e(k)\} \in \mathbb{R}^N. \end{aligned}$$

Сформируем критерий как сумму квадратов ошибки:

$$\begin{aligned} V(\hat{\boldsymbol{\theta}}) &= \|\mathbf{e}\|_2^2 = \mathbf{e}^\top \mathbf{e} = \sum_{k=1}^N e^2(k) \\ &= \sum_{k=1}^N (y(k) - \mathbf{x}^\top(k)\hat{\boldsymbol{\theta}})^2 = (Y - X\hat{\boldsymbol{\theta}})^\top (Y - X\hat{\boldsymbol{\theta}}) \end{aligned}$$

Постановка задачи, продолжение

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta} \Rightarrow Y = X\boldsymbol{\theta}$$

Детерминированная задача НК

По заданным Y и X найти $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS} = \arg \min_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} V(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ для

$$V(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \|\mathbf{e}\|_2^2 = (Y - X\hat{\boldsymbol{\theta}})^\top (Y - X\hat{\boldsymbol{\theta}})$$

Важно: в детерминированной постановке задачи не ставится вопрос идентификации некоторого *истинного* значения $\boldsymbol{\theta}$, не утверждается даже его существование. Вместо этого рассматривается поиск наилучшей линейной аппроксимации заданного набора данных. Такая постановка задачи встречается, например, в статистике.

Постановка задачи, продолжение

Линейная регрессия

$$y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta} \Rightarrow Y = X\boldsymbol{\theta}$$

Детерминированная задача НК

По заданным Y и X найти $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS} = \arg \min_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} V(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ для

$$V(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \|\mathbf{e}\|_2^2 = (Y - X\hat{\boldsymbol{\theta}})^\top (Y - X\hat{\boldsymbol{\theta}})$$

Существует альтернативный L_1 критерий

$$V(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \|\mathbf{e}\|_1 = \sum_{k=1}^N |e(k)|$$

МНК: Теорема

Детерминированная задача НК

По заданным Y и X найти $\hat{\theta}_{LS} = \arg \min_{\hat{\theta}} V(\hat{\theta})$ для

$$V(\hat{\theta}) = \|\mathbf{e}\|_2^2 = (Y - X\hat{\theta})^\top (Y - X\hat{\theta})$$

Теорема (Решение детерминированной задачи НК)

Минимум $V(\hat{\theta}) = (Y - X\hat{\theta})^\top (Y - X\hat{\theta})$ достигается при $\hat{\theta}$ таких, что

$$(X^\top X)\hat{\theta} = X^\top Y.$$

Если $\Phi \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\Phi := X^\top X$ имеет обратную, то

- $\hat{\theta}_{LS} := (X^\top X)^{-1} X^\top Y,$
- $V(\hat{\theta})$ имеет единственный минимум:

$$\min_{\hat{\theta}} V(\hat{\theta}) = V(\hat{\theta}_{LS}) = Y^\top Y - Y^\top X (X^\top X)^{-1} X^\top Y.$$

МНК: Доказательство

$$\begin{aligned}V(\boldsymbol{\theta}) &= (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})^\top (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}) \\&= \mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^\top \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\theta}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} \\V(\boldsymbol{\theta}) \rightarrow \min &\Rightarrow \nabla_{\boldsymbol{\theta}} V(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}\end{aligned}$$

Некоторые формулы:

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} V(\boldsymbol{\theta}) = \text{grad}_{\boldsymbol{\theta}}^\top V(\boldsymbol{\theta}) = \text{col} \left\{ \frac{\partial V(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i} \right\}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} (\mathbf{a}^\top \boldsymbol{\theta}) = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} (\boldsymbol{\theta}^\top \mathbf{a}) = \mathbf{a}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} (\boldsymbol{\theta}^\top \mathbf{A}\boldsymbol{\theta}) = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top)\boldsymbol{\theta} = \underbrace{(\boldsymbol{\theta}^\top (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top))^\top}_{\text{grad}_{\boldsymbol{\theta}}}$$

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^\top \geq 0 \text{ -- симметрическая.}$$

МНК: Доказательство, продолжение

$$V(\theta) = Y^\top Y - 2Y^\top X\theta + \theta^\top X^\top X\theta$$

$$\nabla_{\theta} V(\theta) = -2X^\top Y + 2X^\top X\theta$$

$$\nabla_{\theta} V(\theta) = 0 \Leftrightarrow X^\top X\theta = X^\top Y$$

Пусть $X^\top X$ имеет обратную. Тогда:

$$\theta = (X^\top X)^{-1} X^\top Y =: \hat{\theta}_{LS}$$

и

$$\begin{aligned} V(\theta) &= Y^\top Y - 2Y^\top X\theta + \theta^\top X^\top X\theta \\ &= Y^\top Y - 2Y^\top X(X^\top X)^{-1} X^\top Y + Y^\top X(X^\top X)^{-1} X^\top Y \\ &= Y^\top Y - Y^\top X(X^\top X)^{-1} X^\top Y \end{aligned}$$

МНК: Доказательство, продолжение

Проверим, что это действительно единственный минимум:

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) &= Y^\top Y - 2Y^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) + (\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta})^\top X^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) - 2Y^\top X\tilde{\theta} + 2\tilde{\theta}^\top X^\top X\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \geq V(\hat{\theta}_{LS}) \end{aligned}$$

МНК: Доказательство, продолжение

Проверим, что это действительно единственный минимум:

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) &= Y^\top Y - 2Y^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) + (\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta})^\top X^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) - 2Y^\top X\tilde{\theta} + 2\tilde{\theta}^\top X^\top X\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \geq V(\hat{\theta}_{LS}) \end{aligned}$$

Рассмотрим минимальное значение $V(\hat{\theta}) = V(\hat{\theta}_{LS})$:

$$V(\hat{\theta}_{LS}) = Y^\top Y - Y^\top X(X^\top X)^{-1}X^\top Y.$$

В каком случае оно нулевое?

МНК: Доказательство, продолжение

Проверим, что это действительно единственный минимум:

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) &= Y^\top Y - 2Y^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) + (\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta})^\top X^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) - 2Y^\top X\tilde{\theta} + 2\tilde{\theta}^\top X^\top X\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \geq V(\hat{\theta}_{LS}) \end{aligned}$$

Рассмотрим минимальное значение $V(\hat{\theta}) = V(\hat{\theta}_{LS})$:

$$V(\hat{\theta}_{LS}) = Y^\top Y - Y^\top X(X^\top X)^{-1}X^\top Y.$$

В каком случае оно нулевое? При

$$\mathcal{I}_{N \times N} - X(X^\top X)^{-1}X^\top = \mathbf{0}.$$

МНК: Доказательство, продолжение

Проверим, что это действительно единственный минимум:

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) &= Y^\top Y - 2Y^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) + (\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta})^\top X^\top X(\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}) \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) - 2Y^\top X\tilde{\theta} + 2\tilde{\theta}^\top X^\top X\hat{\theta}_{LS} + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \\ &= V(\hat{\theta}_{LS}) + \tilde{\theta}^\top X^\top X\tilde{\theta} \geq V(\hat{\theta}_{LS}) \end{aligned}$$

Рассмотрим минимальное значение $V(\hat{\theta}) = V(\hat{\theta}_{LS})$:

$$V(\hat{\theta}_{LS}) = Y^\top Y - Y^\top X(X^\top X)^{-1}X^\top Y.$$

В каком случае оно нулевое? При

$$I_{N \times N} - X(X^\top X)^{-1}X^\top = 0.$$

Частный случай: $N = m$, X – квадратная и $\det(X) \neq 0$.

Содержание

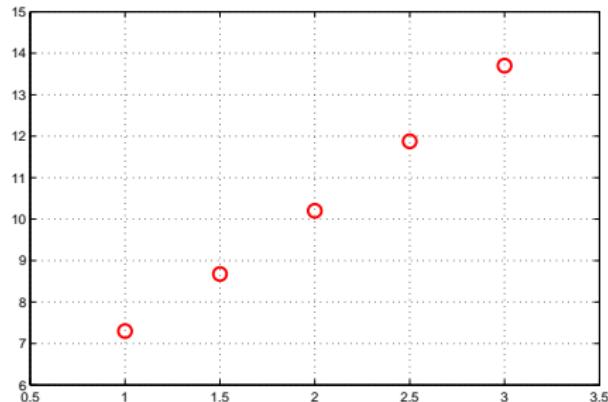
- 1 Пример: Идентификация силы трения
- 2 Метод наименьших квадратов. Детерминированная задача.
- 3 Пример использования МНК для аппроксимации
- 4 Метод наименьших квадратов. Стохастическая задача.
- 5 Промежуточные итоги

Трение

Вернемся к задаче аппроксимации трения моделью

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v.$$

Пусть измерены точки (v_k, F_k) : $(1, 7.3)$, $(1.5, 8.7)$, $(2, 10.2)$,
 $(2.5, 11.9)$, $(3, 13.7)$.



Трение

Вернемся к задаче аппроксимации трения моделью

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v.$$

Пусть измерены точки (v_k, F_k) : $(1, 7.3), (1.5, 8.7), (2, 10.2), (2.5, 11.9), (3, 13.7)$.

Запишем:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 7.3 \\ 8.7 \\ 10.2 \\ 11.9 \\ 13.7 \end{bmatrix}}_Y = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1.5 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2.5 & 1 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}}_X \underbrace{\begin{bmatrix} F_v \\ F_c \end{bmatrix}}_{\theta}$$

Трение

Вернемся к задаче аппроксимации трения моделью

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v.$$

Пусть измерены точки (v_k, F_k) : $(1, 7.3), (1.5, 8.7), (2, 10.2), (2.5, 11.9), (3, 13.7)$.

$$\begin{bmatrix} 7.3 & 8.7 & 10.2 & 11.9 & 13.7 \end{bmatrix}^\top = \begin{bmatrix} 1 & 1.5 & 2 & 2.5 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} F_v \\ F_c \end{bmatrix}$$

$$X^\top X = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^5 x_1(k)^2 & \sum_{k=1}^5 x_1(k)x_2(k) \\ \sum_{k=1}^5 x_1(k)x_2(k) & \sum_{k=1}^5 x_2(k)^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 22.5 & 10 \\ 10 & 5 \end{bmatrix}$$

$$X^\top Y = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^5 x_1(k)y(k) \\ \sum_{k=1}^5 x_2(k)y(k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 111.5 \\ 51.75 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\theta}_{LS} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y = \begin{bmatrix} 3.2 \\ 3.95 \end{bmatrix}$$

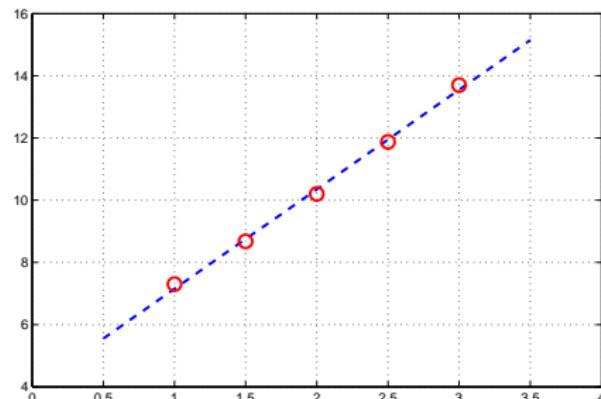
Трение

Вернемся к задаче аппроксимации трения моделью

$$F = F_c \operatorname{sign} v + F_v v.$$

Пусть измерены точки (v_k, F_k) : $(1, 7.3), (1.5, 8.7), (2, 10.2), (2.5, 11.9), (3, 13.7)$.

$$\hat{\theta}_{LS} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y = \begin{bmatrix} 3.2 \\ 3.95 \end{bmatrix}$$



Парабола

Рассмотрим задачу аппроксимации данных параболой
 $y = ax^2 + bx + c$, или

$$y = \begin{bmatrix} x^2 & x & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix},$$

по $N = 5$ точкам: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), (x_4, y_4), (x_5, y_5)$.

Парабола

Рассмотрим задачу аппроксимации данных параболой
 $y = ax^2 + bx + c$, или

$$y = \begin{bmatrix} x^2 & x & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix},$$

по $N = 5$ точкам: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), (x_4, y_4), (x_5, y_5)$. Тогда:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ x_3^2 & x_3 & 1 \\ x_4^2 & x_4 & 1 \\ x_5^2 & x_5 & 1 \end{bmatrix}}_V \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix},$$

Матрица Вандермонда

Матрица вида

$$V = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{m-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{m-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \cdots & x_N^{m-1} \end{bmatrix},$$

$V \in \mathbb{R}^{N \times m}$ называется матрицей Вандермонда. Для квадратной матрицы Вандермонда определитель

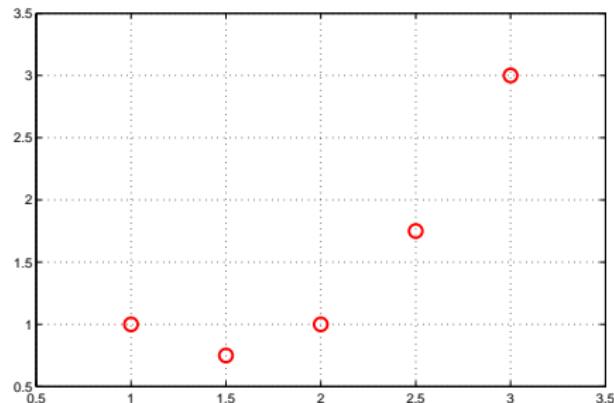
$$\det(V_{m \times m}) = \prod_{1 \leq i < j \leq m} (x_j - x_i),$$

т.е. матрица невырождена, если все x_i различны.

Если $V \in \mathbb{R}^{N \times m}$, $N > m$, то $\det(V^\top V) \neq 0$ если $\text{rank}(V) = m$, т.е. есть хотя бы m различных значений x_i .

Парабола, продолжение

Рассмотрим задачу аппроксимации данных параболой $y = ax^2 + bx + c$ по $N = 5$ точкам: $(1, 1), (1.5, 0.75), (2, 1), (2.5, 1.75), (3, 3)$.



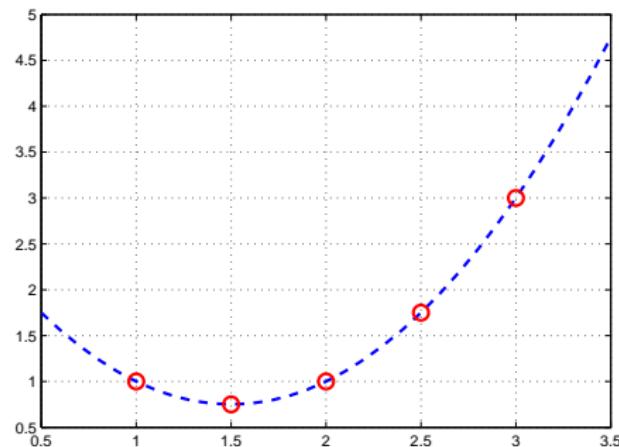
$$X^\top X = \begin{bmatrix} 142.12 & 55 & 22.5 \\ 55 & 22.5 & 10 \\ 22.5 & 10 & 5 \end{bmatrix} \quad X^\top Y = \begin{bmatrix} 44.62 \\ 17.5 \\ 7.5 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\theta}_{LS} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y = [1 \quad -3 \quad 3]^\top$$

Парабола, продолжение

Рассмотрим задачу аппроксимации данных параболой $y = ax^2 + bx + c$ по $N = 5$ точкам: $(1, 1), (1.5, 0.75), (2, 1), (2.5, 1.75), (3, 3)$.

$$\hat{\theta}_{LS} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y = [1 \quad -3 \quad 3]^\top$$



Содержание

- 1 Пример: Идентификация силы трения
- 2 Метод наименьших квадратов. Детерминированная задача.
- 3 Пример использования МНК для аппроксимации
- 4 Метод наименьших квадратов. Стохастическая задача.
- 5 Промежуточные итоги

Некоторые понятия из теории вероятности

Пусть $v \in \mathbb{R}^1$ – некоторая стационарная в широком смысле случайная величина.

- Плотность вероятности $\rho(v)$: $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(v)dv = 1$.
- Математическое ожидание $\mathbb{E}\{v\} = \int_{-\infty}^{\infty} v\rho(v)dv$. Для N измерений $E_v(N) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N v(k)$, $E_v(N) \rightarrow \mathbb{E}\{v\}$ при $N \rightarrow \infty$.
- Дисперсия $\mathbb{D}\{v\} = \mathbb{E}\{(v - \mathbb{E}\{v\})^2\} = \sigma_v^2$. Если $v \in \mathbb{R}^m$, то $\mathbb{D}\{v\} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ – матрица дисперсий.

Некоторые понятия из теории вероятности, продолжение

Пусть $v \in \mathbb{R}^1$, $\mu \in \mathbb{R}^1$ – некоторые стационарные в широком смысле случайные величины.

- Ковариация: $\text{cov}(v, \mu) = \mathbb{E}\{(v - \mathbb{E}\{v\})(\mu - \mathbb{E}\{\mu\})\}$. Аналог скалярного умножения. $\text{cov}(v, v) = \mathbb{D}\{v\}$. Для двух векторов получается матрица ковариаций.
- Корреляция: $r_{v,\mu} = \text{corr}(v, \mu) = \frac{\text{cov}(v, \mu)}{\sigma_v \sigma_\mu}$. $\text{corr}(v, v) = 1$.
- Функция автокорреляции: $R_v(\tau) = \frac{\mathbb{E}\{(v(k) - \mathbb{E}\{v\})(v(k+\tau) - \mathbb{E}\{v\})\}}{\sigma_v^2}$.
 $R_v(\tau) = R_v(-\tau)$. $R_v(0) = 1$.

Некоторые понятия из теории вероятности, продолжение

Величины v и μ называются взаимонезависимыми, если $\rho(v|\mu) = \rho(v)$. Для них справедливо:

- $\mathbb{E}\{v\mu\} = \mathbb{E}\{v\}\mathbb{E}\{\mu\}$
- $\text{cov}(v, \mu) = 0$
- $\text{corr}(v, \mu) = 0$

Если значения $v(k_1)$ и $v(k_2)$ являются независимыми для $k_1 \neq k_2$ (не автокореллированный процесс), то

- $\text{cov}(V, V) = \mathbb{D}\{V\} = \sigma_v^2 \mathcal{I}$
- $R_v(\tau) = 0$ для $\tau \neq 0$

Постановка задачи

Дано

Будем полагать, что существует вектор истинных значений θ_0 , а результаты измерений подвержены шуму:

$$y(k) = \mathbf{x}^\top(k) \boldsymbol{\theta}_0 + v(k),$$

где v – случайная величина.

Постановка задачи

Дано

Будем полагать, что существует вектор истинных значений θ_0 , а результаты измерений подвержены шуму:

$$y(k) = \mathbf{x}^\top(k) \theta_0 + v(k),$$

где v – случайная величина.

Надо

Требуется по набору доступных измерений Y, X сформировать такую оценку $\hat{\theta}$, что $\mathbb{E}\{\hat{\theta}\} = \theta_0$. При этом желательно иметь малую дисперсию $\hat{\theta}$.

Постановка задачи

Дано

Будем полагать, что существует вектор истинных значений θ_0 , а результаты измерений подвержены шуму:

$$y(k) = \mathbf{x}^\top(k) \theta_0 + v(k),$$

где v – случайная величина.

Надо

Требуется по набору доступных измерений Y, X сформировать такую оценку $\hat{\theta}$, что $\mathbb{E}\{\hat{\theta}\} = \theta_0$. При этом желательно иметь малую дисперсию $\hat{\theta}$.

Гипотезы

Нужные

$$H1 \quad \mathbb{E}\{v\} = 0.$$

$H2 \quad v$ – взаимонезависимая со всеми x_i . Например, регрессор \mathbf{x} –

Постановка задачи, продолжение

Дано: $y(k) = \mathbf{x}^\top(k)\boldsymbol{\theta}_0 + v(k)$.

Надо: $\hat{\boldsymbol{\theta}}: \mathbb{E}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}\} = \boldsymbol{\theta}_0$.

Гипотезы

Нужные

H1 $\mathbb{E}\{v\} = 0$.

H2 v – взаимонезависимая со всеми x_i . Например, регрессор \mathbf{x} – детерминированный.

H3 $\det(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}) \neq 0$

Полезные

H4 $\mathbb{D}\{v\} = \sigma_v^2 = \text{const.}$

H5 $v(k)$ – не автокорелированный процесс, т.е. отдельные $v(i)$ и $v(j)$ взаимонезависимы при $i \neq j$, $\mathbb{D}\{V\} = \sigma_v^2 \mathcal{I}$.

МНК, Теорема 2

Решение стохастической задачи

Пусть линейная оценка формируется как $\hat{\theta}_{LS} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y$. Тогда если

- $\mathbb{E}\{v\} = 0$,
- пара v, x взаимонезависимы и выполняется $\mathbb{E}\{vx_i\} = \mathbb{E}\{v\}\mathbb{E}\{x_i\}$,

то оценка $\hat{\theta}_{LS}$ – несмешенная, т.е. $\mathbb{E}\{\hat{\theta}_{LS}\} = \theta_0$.

Более того, если

- $\mathbb{D}\{v\} = \sigma_v^2 = \text{const}$,
- $\mathbb{D}\{V\} = \sigma_v^2 I$, т.е. $R_v(\tau) = 0$ для $\tau \neq 0$,

то $\hat{\theta}_{LS}$ – эффективная оценка, т.е. наилучшая в классе линейных (BLUE - Best Linear Unbiased Estimation).

МНК, Теорема 2

Решение стохастической задачи

Пусть линейная оценка формируется как $\hat{\theta}_{LS} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y$. Тогда если

- $\mathbb{E}\{v\} = 0$,
- пара v, x взаимонезависимы и выполняется $\mathbb{E}\{vx_i\} = \mathbb{E}\{v\}\mathbb{E}\{x_i\}$,

то оценка $\hat{\theta}_{LS}$ – несмешенная, т.е. $\mathbb{E}\{\hat{\theta}_{LS}\} = \theta_0$.

Более того, если

- $\mathbb{D}\{v\} = \sigma_v^2 = \text{const}$,
- $\mathbb{D}\{V\} = \sigma_v^2 I$, т.е. $R_v(\tau) = 0$ для $\tau \neq 0$,

то $\hat{\theta}_{LS}$ – эффективная оценка, т.е. наилучшая в классе линейных (BLUE - Best Linear Unbiased Estimation).

Линейность

$$Y = Y_1 + Y_2 \Rightarrow \hat{\theta} = \hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 \text{ и } Y = \alpha Y_1 \Rightarrow \hat{\theta} = \alpha \hat{\theta}_1$$

Доказательство

Покажем несмешенность оценки. Действительно,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\{\hat{\theta}_{LS}\} &= \mathbb{E}\{(X^\top X)^{-1} X^\top Y\} = \mathbb{E}\{(X^\top X)^{-1} X^\top (X\theta_0 + V)\} \\ &= \theta_0 + (X^\top X)^{-1} \mathbb{E}\{X^\top V\}.\end{aligned}$$

Так как x и v взаимонезависимы и $\mathbb{E}\{v\} = 0$, то $\mathbb{E}\{X^\top V\} = 0$ и $\mathbb{E}\{\hat{\theta}_{LS}\} = \theta_0$.

Доказательство

Покажем несмешенность оценки. Действительно,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\{\hat{\theta}_{LS}\} &= \mathbb{E}\{(X^\top X)^{-1} X^\top Y\} = \mathbb{E}\{(X^\top X)^{-1} X^\top (X\theta_0 + V)\} \\ &= \theta_0 + (X^\top X)^{-1} \mathbb{E}\{X^\top V\}.\end{aligned}$$

Так как x и v взаимонезависимы и $\mathbb{E}\{v\} = 0$, то $\mathbb{E}\{X^\top V\} = 0$ и $\mathbb{E}\{\hat{\theta}_{LS}\} = \theta_0$.

Рассмотрим дисперсию оценки.

$$\begin{aligned}\mathbb{D}\{\hat{\theta}_{LS}\} &= \mathbb{E}\{(\hat{\theta}_{LS} - \theta_0)(\hat{\theta}_{LS} - \theta_0)^\top\} = \mathbb{E}\{(X^\top X)^{-1} X^\top VV^\top X(X^\top X)^{-1}\} \\ &= (X^\top X)^{-1} X^\top \mathbb{E}\{VV^\top\} X(X^\top X)^{-1} = \boxed{\sigma_v^2 (X^\top X)^{-1}}.\end{aligned}$$

Доказательство, продолжение

Покажем теперь, что эта дисперсия минимальна (в смысле квадратичной формы) среди всех несмешанных линейных оценок. Рассмотрим некоторую несмешанную линейную оценку $\theta = MY$ с некоторой матрицей M .

Доказательство, продолжение

Покажем теперь, что эта дисперсия минимальна (в смысле квадратичной формы) среди всех несмешанных линейных оценок. Рассмотрим некоторую несмешанную линейную оценку $\theta = MY$ с некоторой матрицей M .

Так как $\mathbb{E}\{\theta\} = \theta_0$, то $\mathbb{E}\{MX\theta_0\} + \mathbb{E}\{MV\} = \theta_0$ и $MX = \mathcal{I}$. При этом $\mathbb{D}\{\theta\} = \mathbb{E}\{MVV^\top M^\top\} = \sigma_v^2 MM^\top$.

Доказательство, продолжение

Покажем теперь, что эта дисперсия минимальна (в смысле квадратичной формы) среди всех несмешанных линейных оценок. Рассмотрим некоторую несмешанную линейную оценку $\boldsymbol{\theta} = M\mathbf{Y}$ с некоторой матрицей M .

Так как $\mathbb{E}\{\boldsymbol{\theta}\} = \boldsymbol{\theta}_0$, то $\mathbb{E}\{M\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}_0\} + \mathbb{E}\{MV\} = \boldsymbol{\theta}_0$ и $M\mathbf{X} = \mathcal{I}$. При этом $\mathbb{D}\{\boldsymbol{\theta}\} = \mathbb{E}\{MVV^\top M^\top\} = \sigma_v^2 MM^\top$.

Рассмотрим разность $Q := \mathbb{D}\{\boldsymbol{\theta}\} - \mathbb{D}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS}\}$ и покажем, что $Q \geq 0$.

$$\begin{aligned} Q &= \sigma_v^2 \left(MM^\top - \mathcal{I}(X^\top X)^{-1} \mathcal{I}^\top \right) = \sigma_v^2 \left(MM^\top - MX(X^\top X)^{-1} X^\top M^\top \right) \\ &= \sigma_v^2 M (\mathcal{I} - P) M^\top, \end{aligned}$$

где $P := X(X^\top X)^{-1} X^\top$, причем $PP^\top = P = P^\top$.

Доказательство, продолжение

Более того, $(\mathcal{I} - P)(\mathcal{I} - P)^\top = \mathcal{I} - P$. Тогда

$$Q = \sigma_v^2 M (\mathcal{I} - P) (\mathcal{I} - P)^\top M^\top = \sigma_v^2 S S^\top,$$

где $S \in \mathbb{R}^{m \times N}$, $S := M(\mathcal{I} - P)$.

Доказательство, продолжение

Более того, $(\mathcal{I} - P)(\mathcal{I} - P)^\top = \mathcal{I} - P$. Тогда

$$Q = \sigma_v^2 M (\mathcal{I} - P) (\mathcal{I} - P)^\top M^\top = \sigma_v^2 S S^\top,$$

где $S \in \mathbb{R}^{m \times N}$, $S := M(\mathcal{I} - P)$.

Тогда $Q \geq 0$ и

$$\mathbb{D}\{\hat{\theta}_{LS}\} \leq \mathbb{D}\{\theta\}$$

Содержание

- 1 Пример: Идентификация силы трения
- 2 Метод наименьших квадратов. Детерминированная задача.
- 3 Пример использования МНК для аппроксимации
- 4 Метод наименьших квадратов. Стохастическая задача.
- 5 Промежуточные итоги

Промежуточные итоги

Детерминированная задача

Для заданных X , Y требуется найти наилучшую аппроксимацию в классе линейных моделей $Y = X\theta$ в смысле критерия наименьших квадратов

$$V(\theta) = (Y - x\theta)^T(Y - x\theta).$$

Гипотеза: $\det(X^T X) \neq 0$. Решение:

$$\hat{\theta}_{LS} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

минимизирует указанный критерий, при этом

$$V(\hat{\theta}_{LS}) = Y^T Y - Y^T X (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

Промежуточные итоги

Статистическая задача

Для модели

$$y(k) = \mathbf{x}^\top(k) \boldsymbol{\theta}_0 + v(k)$$

требуется сформировать несмешанную оценку вектора параметров $\boldsymbol{\theta}_0$.

Гипотезы: $\mathbb{E}\{v\} = 0$, $(\mathbf{x}^\top(k), v(k))$ не коррелируют, $\mathbb{D}\{V\} = \sigma_v^2 \mathcal{I}$.

Решение:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{Y}$$

является несмешанной оценкой, т.е. $\mathbb{E}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS}\} = \boldsymbol{\theta}_0$. Если дополнительно $\mathbb{D}\{V\} = \sigma_v^2 \mathcal{I}$, то

$$\mathbb{D}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS}\} = \sigma_v^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}$$

и оценка $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{LS}$ является эффективной.