

Pienimmän neliösumman menetelmä (PNS)

Ongelman määrittely ja merkintöjä

Vektoreiden kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin pseudoinverssi

Pienimmän Neliösumman menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio uudelleen.

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Tarkastellaan neljää pitkää aikasarjaa

$$\vec{q}_1 = (q_{11}, q_{21}, \dots, q_{10,1})^T,$$

$$\vec{q}_2 = (q_{12}, q_{22}, \dots, q_{10,2})^T,$$

$$\vec{q}_3 = (q_{13}, q_{23}, \dots, q_{10,3})^T, \text{ ja}$$

$$\vec{p}_1 = (p_{11}, p_{21}, \dots, p_{10,1})^T.$$

q-aikasarjat ovat kolmen osittain toisiaan korvaavien raaka-aineiden 1, 2 ja 3 myydyt määrät päivittäin kymmenen päivän aikana ja

p-aikasarja on raaka-aineen 1 hinta päivittäin kymmenen päivän aikana.

Etsimme sellaista kysyntäfunktiota

$$p_1 = c_4 + c_1 q_1 + c_2 q_2 + c_3 q_3,$$

että mallin antamat arvot hinnalle ovat mahdollisimman lähellä havaittuja arvoja

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Siis

$$\begin{cases} c_1 \cdot q_{11} + c_2 \cdot q_{12} + c_3 \cdot q_{13} + c_4 \cdot 1 = \hat{p}_{11} \approx p_{11} \\ c_1 \cdot q_{21} + c_2 \cdot q_{22} + c_3 \cdot q_{23} + c_4 \cdot 1 = \hat{p}_{21} \approx p_{21} \\ \vdots \\ c_1 \cdot q_{10,1} + c_2 \cdot q_{10,2} + c_3 \cdot q_{10,3} + c_4 \cdot 1 = \hat{p}_{10,1} \approx p_{10,1} \end{cases}$$

Kertoimet onnistuvat sitä paremmin, mitä pienempi on neliösumma

$$NS = \sum_{j=1}^{10} (\hat{p}_{j1} - p_{j,1})^2.$$

Tästä tulee menetelmän nimi: "Pienimmän NeliöSumman" menetelmä (PNS). (englaniksi "Ordinary Least Square" (OLS).)

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
NeliöSumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Muotoillaan edellinen yhtälöryhmä matriisikielellä. Sitä varten muodostamme vektoreista $\vec{q}_{11}$, $\vec{q}_{12}$ ja $\vec{q}_{13}$ sekä ykösvektorista $\vec{1} = (1, 1, \dots, 1)^T$ matriisit

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ q_{10,1} & q_{10,2} & q_{10,3} \end{pmatrix} \quad \text{ja} \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ q_{10,1} & q_{10,2} & q_{10,3} \end{pmatrix}$$

Näillä merkinnöillä etsimme vektoria $\vec{c}$

$$\mathbf{W}\vec{c} = \hat{\vec{p}}_1 \approx \vec{p}_1, \quad NS = |\hat{\vec{p}}_1 - \vec{p}_1|^2 = |\mathbf{W}\vec{c} - \vec{p}_1|^2$$

niin, että NS on niin pieni kuin mahdollista.

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

1 Matriisin
pseudoinverssi

1 Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

1 Lysytfunktio
uudelleen.

Kahden vektorin $\vec{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$ ja $\vec{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T$ pistetulo on

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = u_1 \cdot v_1 + u_2 \cdot v_2 + \dots + u_n \cdot v_n$$

ja vektorin $\vec{u}$ pituus on

$$|\vec{u}| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + \dots + u_n^2} = \sqrt{\vec{u} \cdot \vec{u}}.$$

Kaksi vektoria ovat **kohtisuorassa**, jos niiden pistetulo on nolla

$$\vec{u} \perp \vec{v} \Leftrightarrow \vec{u} \cdot \vec{v} = 0.$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

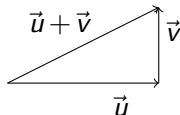
Pistetulonmääritelmästä seuraa välittömästi, että

$$\begin{aligned}\vec{a} \cdot (\vec{b} + \vec{c}) &= a_1(b_1 + c_1) + a_2(b_2 + c_2) + \cdots + a_n(b_n + c_n) \\ &= a_1b_1 + a_1c_1 + a_2b_2 + a_2c_2 + \cdots + a_nb_n + a_nc_n \\ &= \vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \cdot \vec{c}.\end{aligned}$$

Edellisen seurauksena saamme klassisen lauseen

(Pythagoran lause I.) Jos vektorit $\vec{u}$ ja $\vec{v}$ ovat kohtisuorassa, niin

$$|\vec{u} + \vec{v}|^2 = |\vec{u}|^2 + |\vec{v}|^2$$



Perustelu on suora lasku

$$|\vec{u} + \vec{v}|^2 = (\vec{u} + \vec{v}) \cdot (\vec{u} + \vec{v}) = \underbrace{\vec{u} \cdot \vec{u}}_{=|\vec{u}|^2} + \underbrace{\vec{u} \cdot \vec{v}}_{=0} + \underbrace{\vec{v} \cdot \vec{u}}_{=0} + \underbrace{\vec{v} \cdot \vec{v}}_{=|\vec{v}|^2}$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Tarkastellaan uudelleen alkuperäisen ongelman kaltaista mutta yksinkertaisempaa ongelmaa

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ -1 & 2 \\ 3 & -1 \end{pmatrix}}_{=\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}_{=\vec{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ -5 \\ 10 \end{pmatrix}}_{=\vec{b}}$$

Jos olemme varmoja siitä, että yhtälöryhmällä on yksikäsitteinen ratkaisu, ja $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ on säännöllinen, niin yhtälöryhmän ratkaisu saadaan laskettua kaavalla

$$\vec{x} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \vec{b}$$

Perustelu:

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \underbrace{\vec{b}}_{=\mathbf{A}\vec{x}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} (\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \vec{x} = \vec{x}$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Jos matriisi $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ on säännöllinen, niin sanomme, että matriisin $\mathbf{A}$ **pseudoinverssi** (Moore-Penrosen pseudoinverssi) on

$$\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$$

Jos $\mathbf{A}$ on säännöllinen neliömatriisi, niin $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^{-1}$.

Jos $\mathbf{A}^\dagger$ on olemassa, niin $\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} = \mathbf{I}$.

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Esimerkki 1. Ratkaistaan pseudoinverssin avulla edellä esiintynyt yhtälöryhmä

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ -1 & 2 \\ 3 & -1 \end{pmatrix}}_{=\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}_{=\vec{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ -5 \\ 10 \end{pmatrix}}_{=\vec{b}}$$

```
octave:2> A=[2 4; -1 2; 3, -1];
```

```
octave:3> b=[2; -5; 10];
```

```
octave:4> x=(A'*A)^(-1)*A'*b
```

x =

3.0000

-1.0000

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Esimerkki 2. Jos yritämme ratkaista yhtälöryhmää

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ -1 & 2 \\ 3 & -1 \end{pmatrix}}_{=\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}_{=\vec{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ -5 \\ 5 \end{pmatrix}}_{=\vec{b}},$$

niin osoittautuu, ettei täsmällistä ratkaisua ole olemassa!
Seuraavaksi pyrimme löytämään sellaisen vektorin $\vec{x}$, että

$$|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}|^2$$

tulee niin pieneksi kuin mahdollista.

Ratkaisu on $\vec{x} = \mathbf{A}^\dagger \vec{b}$. Perustelemme asian seuraavassa.

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Väite: Lauseke $|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}|^2$ saa pienimmän arvonsa, kun $\vec{x} = \mathbf{A}^\dagger \vec{b}$.

Perustelu: Olkoon $\vec{w} \neq \vec{x}$ jokin toinen ratkaisuehdokas. Nyt

$$|\mathbf{A}\vec{w} - \vec{b}|^2 = \underbrace{|(\mathbf{A}\vec{w} - \mathbf{A}\vec{x})|}_{=\vec{u}}^2 + \underbrace{|(\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b})|}_{=\vec{v}}^2$$

Suora lasku osoittaa, että vektorit $\vec{u}$ ja $\vec{v}$ ovat kohtisuorassa

$$\begin{aligned} \vec{u}^T \vec{v} &= (\mathbf{A}(\vec{w} - \vec{x}))^T (\mathbf{A}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \vec{b} - \vec{b}) \\ &= (\vec{w} - \vec{x})^T \{ \mathbf{A}^T \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \vec{b} - \mathbf{A}^T \vec{b} \} = 0 \end{aligned}$$

Pythagoran lauseen mukaan siis

$$|\mathbf{A}\vec{w} - \vec{b}|^2 = |\vec{u}|^2 + |\vec{v}|^2 = |\vec{u}|^2 + |\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}|^2$$

$\therefore \vec{x} = \mathbf{A}^\dagger \vec{b}$ on kaikista ehdokkaista NeliöSumman kannalta paras.

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Haetaan esimerkin 2 yhtälöryhmälle pienimmän neliösumman ratkaisu

```
octave:2> A = [2 4; -1 2; 3 -1];
```

```
octave:3> b = [2; -5; 5];
```

```
octave:4> x = (A'*A)^(-1)*A'*b
```

```
x =  
    1.84211  
   -0.59649
```

```
octave:5> A*x
```

```
ans =  
    1.2982  
   -3.0351  
    6.1228
```

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Tarkastellaan uudelleen kolmen tuotteen myynti- ja hinta-aikasarjoja

$$\vec{q}_1 = (q_{11}, q_{21}, \dots, q_{10,1})^T,$$

$$\vec{q}_2 = (q_{12}, q_{22}, \dots, q_{10,2})^T,$$

$$\vec{q}_3 = (q_{13}, q_{23}, \dots, q_{10,3})^T, \text{ ja}$$

$$\vec{p}_1 = (p_{11}, p_{21}, \dots, p_{10,1})^T,$$

$$\vec{p}_2 = (p_{12}, p_{22}, \dots, p_{10,2})^T,$$

$$\vec{p}_3 = (p_{13}, p_{23}, \dots, p_{10,3})^T.$$

Muodostetaan vastaavat matriisit

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ q_{10,1} & q_{10,2} & q_{10,3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ p_{10,1} & p_{10,2} & p_{10,3} \end{pmatrix}$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & 1 \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ q_{10,1} & q_{10,2} & q_{10,3} & 1 \end{pmatrix}$$

Etsimme sellaista kysyntäfunktiota

$$q_{k1}c_{1j} + q_{k2}c_{2j} + q_{k3}c_{3j} + 1 \cdot c_{4j} = p_{kj},$$

että mallin antamat arvot hinnalle ovat mahdollisimman lähellä havaittuja arvoja eli

$$\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & 1 \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ q_{10,1} & q_{10,2} & q_{10,3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ p_{10,1} & p_{10,2} & p_{10,3} \end{pmatrix}$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

$$\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & 1 \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ q_{10,1} & q_{10,2} & q_{10,3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ p_{10,1} & p_{10,2} & p_{10,3} \end{pmatrix}$$

PNS-mielessä parhaat kertoimet malliin saadaan kaavalla

$$\mathbf{C} = \mathbf{W}^\dagger \mathbf{P}$$

Nyt on odotettavissa, että päivänä t pätee relaatio

$$\begin{pmatrix} q_{t,1} & q_{t,2} & q_{t,3} & 1 \end{pmatrix} \mathbf{C} \approx \begin{pmatrix} p_{t,1} & p_{t,2} & p_{t,3} \end{pmatrix}$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektorien
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmää

Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjäVektoreiden
kohtisuoruus

Pythagorasan lause

Matriisin
pseudoinverssiPienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)Kysyntäfunktio
uudelleen.

$$\begin{pmatrix} q_{t,1} & q_{t,2} & q_{t,3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} p_{t,1} & p_{t,2} & p_{t,3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} & c_{41} \\ c_{12} & c_{22} & c_{32} & c_{42} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{t,1} \\ q_{t,2} \\ q_{t,3} \\ 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} p_{t,1} \\ p_{t,2} \\ p_{t,3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} \\ c_{12} & c_{22} & c_{32} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{t,1} \\ q_{t,2} \\ q_{t,3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_{41} \\ c_{42} \\ c_{43} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} p_{t,1} \\ p_{t,2} \\ p_{t,3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} \\ c_{12} & c_{22} & c_{32} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{t,1} \\ q_{t,2} \\ q_{t,3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_{41} \\ c_{42} \\ c_{43} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} p_{t,1} \\ p_{t,2} \\ p_{t,3} \end{pmatrix}$$

Myyntitulo päivänä t on

$$\begin{aligned} & q_{t1}p_{t1} + q_{t2}p_{t2} + q_{t3}p_{t3} \\ = & \begin{pmatrix} q_{t1} & q_{t2} & q_{t3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{t,1} \\ p_{t,2} \\ p_{t,3} \end{pmatrix} \\ = & \begin{pmatrix} q_{t1} & q_{t2} & q_{t3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} \\ c_{12} & c_{22} & c_{32} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{t,1} \\ q_{t,2} \\ q_{t,3} \end{pmatrix} + \dots \\ & \dots + q_{t1}c_{41} + q_{t2}c_{42} + q_{t3}c_{43} \end{aligned}$$

Aiheet

Ongelman
määrittely ja
merkintöjä

Vektoreiden
kohtisuoruus

Pythagoran lause

Matriisin
pseudoinverssi

Pienimmän
Neliösumman
menetelmä (PNS)

Kysyntäfunktio
uudelleen.