Exponenciális illesztése iterációs eljárással

Kocsy Gábor

2008. július 16.

Legyen adva n darab pont, amelyek koordinátái (x_i, y_i) $(i = 1, \dots, n)$. Ezekre szeretnénk egy $f(x) = a \cdot e^{bx} + c$ alakú függvényt illeszteni. Ennek érdekében az

$$F : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R},\ (a, b, c) \mapsto \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot (a \cdot e^{bx_i} + c - y_i)^2$$

függvény minimumhelyét keressük, ahol w_i súlytényezők, $\sum_{i=1}^{n} w_i = 1$. Ez a következő három egyenlethez vezet:

$$0 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial F}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{bx_i} \cdot (a \cdot e^{bx_i} + c - y_i) \tag{1}$$

$$0 = \frac{1}{2a} \cdot \frac{\partial F}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \cdot e^{bx_i} \cdot (a \cdot e^{bx_i} + c - y_i) \tag{2}$$

$$0 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial F}{\partial c} = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot (a \cdot e^{bx_i} + c - y_i) \tag{3}$$

A (3) egyenletből

$$c = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot (y_i - a \cdot e^{bx_i}).$$

Bevezetve az $\overline{x} := \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{bx_i}$ és az $\overline{y} := \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot y_i$ jelöléseket, ez az egyenlet a

$$c = \overline{y} - a \cdot \overline{x} \tag{4}$$

alakot ölti.

Ezt beírva az (1) egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{bx_i} \cdot (a \cdot e^{bx_i} + \overline{y} - a \cdot \overline{x} - y_i) = \\ &= a \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{2bx_i} - \overline{x}^2 \right) + \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot (\overline{y} - y_i) \cdot e^{bx_i}. \end{aligned} \tag{5}$$

A $K_i := e^{bx_i} - \overline{x}$ és az $L_i := y_i - \overline{y}$ mennyiségek bevezetésével

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{2bx_i} - \overline{x}^2 &= \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{2bx_i} - \overline{x} \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{bx_i} = \\ &= \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot e^{bx_i} \cdot (e^{bx_i} - \overline{x}) = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot K_i \cdot e^{bx_i}, \end{aligned}$$

így az (5) egyenletből az

$$a \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot K_i \cdot e^{bx_i} = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot L_i \cdot e^{bx_i} \tag{6}$$

összefüggés adódik.

A (2) egyenletbe helyettesítsük be a c-re kapott (4) kifejezést:

$$0 = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \cdot e^{bx_i} \cdot (a \cdot e^{bx_i} + \overline{y} - a \cdot \overline{x} - y_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \cdot e^{bx_i} \cdot (a \cdot K_i - L_i).$$

Szorozzuk meg az egyenletet a $\sum_{j=1}^{n} w_j \cdot K_j \cdot e^{bx_j}$ kifejezéssel, és használjuk fel a (6) összefüggést:

$$0 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} w_i \cdot w_j \cdot x_i \cdot (K_i \cdot L_j - L_i \cdot K_j) \cdot e^{b \cdot (x_i + x_j)}. \tag{7}$$

A szumma mögött az x_i együtthatóját jelöljük q_{ij}-vel. Látható, hogy $q_{ij} = -q_{ji}$, ezért

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} q_{ij} \cdot x_i &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} q_{ij} \cdot x_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} q_{ij} \cdot x_i = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} q_{ij} \cdot x_i + \\ &+ \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{j-1} q_{ij} \cdot x_i = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} (q_{ij} \cdot x_i + q_{ji} \cdot x_j) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} q_{ij} \cdot (x_i - x_j). \end{aligned}$$

Következésképpen a (7) egyenlet a

$$0 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} w_i \cdot w_j \cdot (x_i - x_j) \cdot (K_i \cdot L_j - L_i \cdot K_j) \cdot e^{b \cdot (x_i + x_j)} \tag{8}$$

alakot ölti. Ebből az egyenletből b-t nem tudjuk analitikusan kifejezni, ezért a Newton-féle iterációt alkalmazzuk. A (8) egyenlet jobb oldalán álló kifejezést nevezzük $f(b)$-nek. Az iterációs eljárásban b_{n+1}-et a

$$b_{n+1} = b_n - \frac{f(b_n)}{f'(b_n)}$$

formula szolgáltatja. Itt

$$\begin{aligned} f'(b) &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} w_i \cdot w_j \cdot (x_i - x_j) \cdot (K_i' \cdot L_j - L_i \cdot K_j') \cdot e^{b \cdot (x_i + x_j)} + \\ &\quad + w_i \cdot w_j \cdot (x_i^2 - x_j^2) \cdot (K_i \cdot L_j - L_i \cdot K_j) \cdot e^{b \cdot (x_i + x_j)}, \end{aligned}$$

ahol

$$K_i' = x_i \cdot e^{bx_i} - \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \cdot e^{bx_i}, \qquad i \in \{1, \ldots, n\}.$$

Ezek után a és c értékét úgy kapjuk meg, hogy az iterációban kapott értéket behelyettesítjük a (6) egyenletbe, majd a-t és b-t behelyettesítjük a (4) kifejezésbe.

Megjegyezzük még, hogy az illesztésből nyert érték eltérése a mért értéktől:

$$a \cdot e^{bx_i} + c - y_i = a \cdot e^{bx_i} + \overline{y} - a \cdot \overline{x} - y_i = a \cdot K_i - L_i.$$