

Assyr Abdulle; Gerhard Wanner  
200 let metody nejmenších čtverců

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 48 (2003), No. 2, 89--104

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/141166>

## Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2003

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

# 200 let metody nejmenších čtverců

*Assyr Abdulle, Princeton, a Gerhard Wanner, Ženeva*

## 1. Objev planety Ceres

Nalezení planety *Ceres*, prvního z asteroidů mezi Marsem a Jupiterem, bylo největším vědeckým objevem začátku 19. století. Navzdory tomu, že tento slabý světelný bod byl od té doby spatřen laiky jen zřídka a jeho pozorování nemá téměř žádný „praktický“ význam, pro pozdější vývoj vědy byl jeho objev velmi důležitý.

### 1.1. Titiusova-Bodeova řada

*Das Daseyn dieses Planeten scheint insbesondere aus einem merkwürdigen Verhältniss zu folgen ... Sollte der Urheber der Welt diesen Raum leer gelassen haben?*

(J. E. BODE: *Anleitung zur Kenntniss des gestirnten Himmels*. 6. Aufl., Berlín 1792; citováno v Hegels Werke 5, Anmerkungen, str. 810.)

Babylonští astronomové znali sedm význačných nebeských těles. Nejdříve objevili Slunce a Měsíc, pak Venuši (1600 př. n. l.), nakonec Mars, Merkur, Jupiter a Saturn. Každé z těchto těles ztotožnili s některým z bohů. Božstvům planet byly brzy zasvěceny dny v týdnu: Sunday, Monday, Mardi, Mercredi, Jeudi, Vendredi, Saturday. Od té doby již po tisíce let veškeré lidské dění na zemi pulzuje v tomto sedmidenním rytmu. Výčet babylonských bohů zůstával nezměněn až do 13. března 1781, kdy Sir William Herschel, německý varhaník a amatérský astronom žijící v Anglii, objevil pomocí dalekohledu vlastní výroby další, do té doby neznámou planetu. „Svou“ novou planetu chtěl pojmenovat na počest britského krále *Georgium sidus* (Georgova

---

ASSYR ABDULLE, Mathematics Department (PACM), Princeton University, Princeton, NJ 08544, USA, e-mail: [aabdulle@math.princeton.edu](mailto:aabdulle@math.princeton.edu)

GERHARD WANNER, Section de Mathématiques, Université de Genève, C. P. 240, CH-1211 Genève 24, Switzerland, e-mail: [Gerhard.Wanner@math.unige.ch](mailto:Gerhard.Wanner@math.unige.ch)

A. ABDULLE získal titul Ph.D. v matematice na ženevské univerzitě v roce 2001 pod vedením G. Wannera a nyní pracuje na univerzitě v Princetonu. G. WANNER získal titul Ph.D. v matematice na univerzitě v Innsbrucku v roce 1965 pod vedením W. Gröbnera. Od roku 1973 vyučuje na univerzitě v Ženevě. Oba autoři se zabývají numerickým řešením diferenciálních rovnic, zejména Rungeovou-Kuttovou metodou a Čebyševovou metodou pro parabolické problémy a problémy typu stiff.

*200 years of least square method*. *Elemente der Mathematik* 57 (2002), 45–60.

© Birkhäuser Verlag, Basel 2002.

Přeložila NAĀA STEHLÍKOVÁ.

hvězda), ale Bodeův návrh *Uranus* (v řecké mytologii otec Saturna) byl považován za méně vlastenecký a byl obecně přijat.

Objev Uranu oživil diskuse o vzorci Johanna Daniela Tietze (Titius) a Johanna Elerta Bodea pro velké poloosy drah planet:

$$0,4; \quad 0,4 + 0,3 = 0,7; \quad 0,4 + 2 \cdot 0,3 = 1 \text{ (Země);} \quad \dots; \quad 0,4 + 2^{n-2} \cdot 0,3; \quad \dots$$

Vzdálenosti planet od Slunce vypočítané podle Titiusova-Bodeova pravidla poměrně přesně souhlasí se skutečnými vzdálenostmi pro Merkur, Venuši ( $n = 2$ ), Zemi ( $n = 3$ ), Mars ( $n = 4$ ), Jupiter ( $n = 6$ ) a Saturn ( $n = 7$ ), dobře funguje pro vzdálenost Uranu ( $n = 8$ ). Ovšem číslu  $n = 5$  neodpovídala žádná známá planeta. Protože „Stvořitel našeho světa“ jistě nezanechal mezi planetami mezeru (viz citát), stal se důkaz nebo vyvrácení předpokladu existence nějakého tělesa mezi dráhou Marsu a Jupitera největším vědeckým problémem své doby.

## 1.2. Hegelova práce

*Sehen Sie sich doch nur bei den heutigen Philosophen um, bei Schelling, Hegel, Nees von Esenbeck und Consorten, stehen Ihnen nicht die Haare bei ihren Definitionen zu Berge?*

(Dopis Gausse Schumacherovi, 1. 11. 1844, Werke 12, str. 62)

Těchto diskusí se zúčastnil také jeden z nevlivnějších filozofů Georg Wilhelm Friedrich Hegel, který v roce 1801 podal na univerzitě v Jeně svou práci *Dissertatio philosophica de orbitis planetarum* (Ienae MDCCCI, Werke 5, str. 221–253). Začíná „důkazem“ Keplerových zákonů, aniž by použil matematiku či fyziku, a v poslední části obrací pozornost k Titiovu-Bodeovu pravidlu. To však samozřejmě nemá žádný filozofický obsah. Nicméně stačí si vyhledat Platonova *Timaiu* a najít magická čísla 1, 2, 3, 4, 9, 8, 27, mezi nimiž je dovoleno nahradit číslo 8 číslem 16 (!).<sup>1)</sup> Pak vypočítáme třetí odmocninu čtvrtých mocnin těchto čísel, číslo 1 nahradíme číslem  $\sqrt[3]{3}$  a dostaneme řadu<sup>2)</sup>

$$1,4; \quad 2,56; \quad 4,37; \quad 6,34; \quad 18,75; \quad 40,34; \quad 81,$$

v níž je „mezi čtvrtou a pátou pozicí hodně místa“.<sup>3)</sup> V této mezeře tedy *nechybí žádná planeta*.

Hegel měl samozřejmě smůlu, že tento závěr byl ještě v témže roce zesměšněn objevem planetky Ceres pohybující se na dráze mezi Marsem a Jupiterem. Nemusíme zdůrazňovat, že celá situace nepřispěla ke vzájemnému respektu mezi vědci a filozofy (viz citát).

<sup>1)</sup> „16 enim pro 8 quem legimus ponere liceat.“

<sup>2)</sup> Většina z těchto odmocnin má chybu v poslední číslici.

<sup>3)</sup> „Inter quartum et quintum locum magnum esse spatium.“

### 1.3. Piazzioho objev

Dne 1. ledna 1801 objevil italský astronom Giuseppe Piazzi v souhvězdí Býka nepatrný bod a dokázal sledovat jeho dráhu až do 11. února, kdy jeho pozorování přerušily nemoc, špatné počasí a blížící se Slunce. Pojmenoval jej *Ceres Ferdinandea* (Ferdinand IV. bylo jméno tehdejšího sicilského krále). Údaje o Piazzioho pozorování planety Ceres byly publikovány v zářijovém čísle časopisu *Monatliche Correspondenz* (viz [19]) a jsou uvedeny v tabulce 1.1. Ke konci roku se znovuobjevení ztraceného tělesa stalo velkou výzvou pro astronomy a mnozí z nich se snažili co nejlépe extrapolovat jeho dráhu (Burckhardt, Olbers, Piazzi).

TABULKA 1.1. Piazzioho pozorování

1801	Longitude	Latitude		Longitude	Latitude
Jan. 1	53° 23' 06.38"	3° 06' 45.16"	23	53° 44' 12.46"	1° 38' 46.78"
2	53° 19' 38.18"	3° 02' 26.46"	28	54° 15' 18.52"	1° 21' 04.92"
3	53° 16' 37.70"	2° 58' 08.04"	30	54° 30' 10.52"	1° 14' 14.24"
4	53° 14' 21.44"	2° 53' 51.98"	31	54° 38' 05.58"	1° 10' 51.02"
10	53° 07' 57.64"	2° 28' 53.64"	Feb. 1	54° 46' 27.14"	1° 07' 34.18"
13	53° 10' 05.60"	2° 16' 46.08"	2	54° 55' 01.52"	1° 04' 18.10"
14	53° 11' 54.20"	2° 12' 54.02"	5	55° 22' 45.20"	0° 54' 34.54"
19	53° 26' 01.98"	1° 53' 37.82"	8	55° 53' 04.52"	0° 45' 08.28"
21	53° 34' 22.68"	1° 46' 13.06"	11	56° 26' 28.20"	0° 35' 55.02"
22	53° 39' 11.58"	1° 42' 28.80"			

Jistý „Dr. Gauss z Braunschweigu“ však vypočítal zcela odlišné hodnoty a publikoval je 29. září 1801. Sám však s nimi nebyl spokojen a v prosinci 1801 po náročných výpočtech dospěl k hodnotám, které jsou dány v tabulce 1.2.

TABULKA 1.2. Dráhové elementy planety Ceres (Gauss, prosinec 1801)

Lomený úhel <sup>4)</sup> .....	326° 53' 50"
$\Omega$ .....	81° 1' 44"
Sklon dráhy .....	10° 36' 21"
Logaritmus hlavní poloosy .....	0,4414902
Excentricita .....	0,0819603
Epocha 31. 12. 1800, střední heliocentrická délka .....	77° 54' 29"

Dne 7. prosince 1801 svobodný pán F. X. von Zach znovu objevil planetku Ceres přesně na místě předpovězeném Gaussem. Tato událost „prokázala, že Gauss je nejen největší z aritmetiků, ale také první mezi teoretickými astronomy“<sup>5)</sup>.

<sup>4)</sup> Lomený úhel  $\tilde{\omega}$  je dán vztahem  $\tilde{\omega} = \omega + \Omega$ , kde  $\omega$  je argument perihelu a  $\Omega$  je délka výstupného uzlu.

<sup>5)</sup> W. W. BALL: *History of Mathematics*, London 1901, str. 458; citováno v R. E. MORITZ: *Memorabilia Mathematica*, str. 157.

## 2. Gaussovy první výpočty

*Die von Kreis- und Parabel-Hypothesen unabhängige Bestimmung der Bahn eines Himmelskörpers aus einer kurzen Reihe von Beobachtungen beruht auf zwei Forderungen: I. Muss man Mittel haben, die Bahn zu finden, die drei gegebenen vollständigen Beobachtungen Genüge thut. II. Muss man die so gefundene Bahn so verbessern können, dass die Differenzen der Rechnung von dem ganzen Vorrath der Beobachtungen so gering als möglich werden.*

(Gauss, *Summarische Übersicht*; viz [8], str. 148)

*Gewiss, jeder der die Rechnungen kennt, die die Bestimmung der Elemente eines Planeten und dann jeder daraus herzuleitende Ort erfordert, muss es bewundern, wie ein einzelner Mann in so kurzen Zeiträumen so vielfache mühsame Rechnungen zu vollenden vermögend war.*

(von Zach, března 1805, viz [19], str. 262)

*Le ciel est simple* je motto amatérské observatoře v St. Luc ve Švýcarsku, a pokud bychom se nepokoušeli porozumět Gaussovým výpočtům, mohli bychom s ním souhlasit. Velkou výhodou Gaussovy myšlenky proti nápadům jeho rivalů bylo, že pro svou planetu předpokládal platnost pouze Keplerových zákonů. Gauss však podrobnosti svých výpočtů nikdy nezveřejnil. Na naléhání Olberse mu nakonec v srpnu 1802 poslal rukopis *Summarische Übersicht*, aniž předpokládal jeho publikování. Text nakonec vydal v roce 1809 von Lindenau (viz [18]) s mnoha omluvami editora za četné „nedostatky“. Nedávno se objevil vynikající popis Gaussových výpočtů v angličtině (viz [18]).

Obtížnost výpočtů pramení z velkého počtu použitých proměnných. Musíme skutečně pracovat s těmito proměnnými:

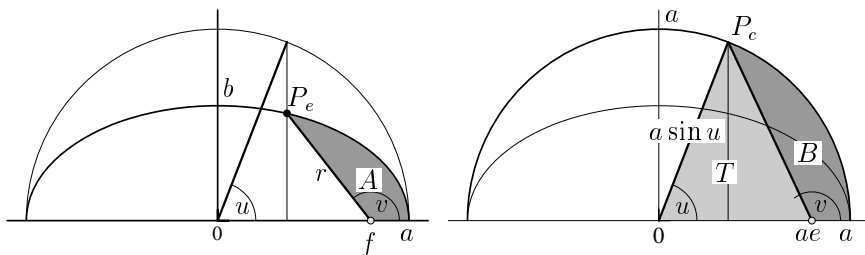
Dráhové elementy	Heliocentrické souřadnice	Geocentrické sférické souřadnice
$\omega$ argument perihelu		
$\Omega$ délka výstupného uzlu	$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \varrho \\ \lambda \\ \beta \end{pmatrix}$
$i$ sklon oběžné dráhy	$\xleftrightarrow{(A)}$	$\xleftrightarrow{(B)}$
$a$ hlavní poloosa		
$e$ excentricita		
$l_0$ střední heliocentrická délka		

(2.1)

Měřenými veličinami jsou úhly  $\lambda$  a  $\beta$  (vzdálenost  $\varrho$  je samozřejmě neznámá) pro několik hodnot času, vypočítávanými veličinami jsou dráhové elementy. Potřebujeme tedy vzorce pro kroky (A) a (B).

**Krok (A).** Pro daný čas  $t$  musíme nejdřív najít polohu planety na elipse, tedy najít *excentrickou anomálii*  $u$  (viz obr. 2.1 vlevo). Nejdříve vezměme bod  $t = 0$  v perihelu. Pak podle Keplerova druhého zákona („stejná doba, stejné plochy“) je  $t$  úměrný ploše  $A$ . Perioda  $P$  oběžné dráhy tedy odpovídá celkové ploše  $ab\pi$  elipsy, takže máme

$$\frac{A}{ab\pi} = \frac{t}{P}.$$



Obr. 2.1. Keplerova oběžná dráha;  $P_e$  planeta,  $f$  ohnisko,  $u$  excentrická anomálie,  $v$  pravá anomálie,  $a$  hlavní poloosa,  $e$  číselná excentricita.

Nyní přejdeme od elipsy ke kružnici (obr. 2.1 vpravo), takže  $B = (a/b) \cdot A$ , ale také  $B = (a^2/2)(u - e \sin u)$  (rozdíl obsahů úseku a trojúhelníku  $T$ ). Tyto tři rovnice vedou ke vztahu

$$nt = u - e \sin u \quad (\text{Keplerova rovnice}), \quad (2.2)$$

kde konstanta  $n = 2\pi/P$  se nazývá *střední denní pohyb*. Nakonec posuneme počátek času na správné místo, tj.  $t$  v (2.2) se změní na  $t - t_0$ , kde  $t_0$  je čas průchodu perihelium. Takže musíme přičíst epochu  $l_0$  a odečíst argument perihelium a délku výstupného uzlu. Pak se (2.2) změní na

$$l_0 - (\omega + \Omega) + nt = u - e \sin u. \quad (2.3)$$

K vyřešení této transcendentní rovnice pro  $u$  musíme znát střední denní pohyb, který je dán třetím Keplerovým zákonem. Tento zákon říká, že  $a^3$  je úměrné  $P^2$ , tedy že

$$n^2 a^3 \text{ je známá konstanta.} \quad (2.4)$$

Teď, když jsme vypočítali pro daný čas  $t$  excentrickou anomálii  $u$ , vyjádříme pomocí  $u$ ,  $\Omega$ ,  $\omega$ ,  $i$ ,  $e$ ,  $a$  a elementární sférické geometrie polohu planety v heliocentrických souřadnicích  $(x, y, z)$  (podrobněji a s uvedenými vzorci viz např. [4, str. 182–186] nebo [3, str. 84–90]).

**Krok (B).** Zde musíme znát solární geocentrické souřadnice  $(X, Y, Z)$  (pro stejný den a čas) a jejich přičtením ke sférickým souřadnicím získáme geocentrické ekliptikální souřadnice planety:

$$\begin{aligned} \varsigma &= x + X = \varrho \cos \beta \cos \lambda, \\ \nu &= y + Y = \varrho \cos \beta \sin \lambda, \\ \zeta &= z + Z = \varrho \sin \beta. \end{aligned} \quad (2.5)$$

**Gaussův postup.** V době objevení planety Ceres bylo dobře známo, jak vypočítat šest dráhových elementů planety pomocí dvou souborů *heliocentrických* souřadnic  $x, y, z$ . Metoda spočívala ve vyřešení  $2 \times 3$  nelineárních rovnic o šesti neznámých. Velkým problémem však bylo, že existovaly pouze *dvě pozorované geocentrické* hodnoty  $\lambda_i, \beta_i$  pro každý den. Po dlouhé manipulaci s výše uvedenými vztahy byl Gauss schopen zredukovat výpočet *jednoho* souboru heliocentrických souřadnic  $x, y, z$  na znalost *dvou* souborů pozorovaných hodnot  $\lambda_i, \beta_i$  tím, že vyřešil komplikovanou transcendentní rovnici. Tedy ze *tří* souborů pozorování získal *dva* soubory heliocentrických souřadnic,

jak bylo požadováno. Tento postup je příliš dlouhý, aby zde mohl být předveden, avšak vynikajícím způsobem je podán v [18], viz také [11].

Bylo výhodné zadat si třetí bod přesně uprostřed dvou ostatních. Gauss tedy začal s daty 2. ledna, 22. ledna a 11. února. Získané hodnoty dráhových elementů byly pak znovu spočítány tak, že se změnila data. Všechny výsledky těchto výpočtů a Gaussovy pozdější výsledky pro následující objevy planetek *Pallas Olbersiana*, *Juno* a *Vesta* jsou působivě podány v Gaussových *Werke*, svazek 6, str. 199–402.

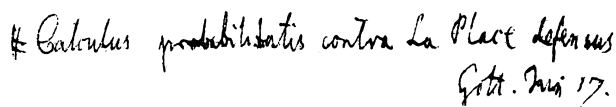
Závěrem podotkneme, že tyto výpočty už *nebyly* získány pomocí metody nejmenších čtverců.

### 3. Metoda nejmenších čtverců

*Der Verfasser gegenwärtiger Abhandlung, welcher im Jahre 1797 diese Aufgabe nach den Grundsätzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung zuerst untersuchte, fand bald, dass die Ausmittlung der wahrscheinlichsten Werthe der unbekanntten Grösse unmöglich sei, wenn nicht die Function, die die Wahrscheinlichkeit der Fehler darstellt, bekannt ist.*

(Gauss, Gött, gelehrte Anz. 33 (1821), str. 321–327)

Vše se však změnilo, když byla v prosinci 1801 znovu objevena planetka Ceres. K dispozici již bylo více pozorování, a tak se prvořadým úkolem stala snaha s použitím nových údajů zpřesnit dráhové elementy. Nyní začal Gauss používat *metodu nejmenších čtverců*, aniž by opět komukoli sdělil podrobnosti. Jediným dokladem je poslední věta v *Summarische Übersicht* („hat man schon Beobachtungen von 1 oder mehreren Jahren . . . , so halte ich den Gebrauch der Differential-Änderung, wobei man eine beliebige Zahl von Beobachtungen zum Grunde legen kann, für das beste Mittel“) a přesnost jeho výsledků (viz také [17]).

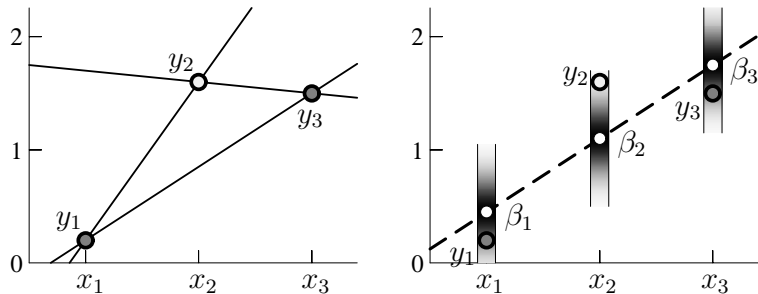


# Calculus probabilistis contra La Place defensus  
Gött. Junii 17.

Obr. 3.1. Zápis v Gaussově diáři, 17. června 1798.

**Legendre versus Gauss.** V roce 1805 se objevila práce *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes* od A. M. Legendra, která obsahovala v příloze neobyčejně krásný popis *méthode des moindres quarrés*. Díky srozumitelnosti práce a numerickým příkladům se metoda nejmenších čtverců okamžitě rozšířila ve všech vědeckých komunitách. Navzdory práci Legendra nazýval Gauss ve svém slavném pojednání [9] *Theoria motus corporum celestium*, publikovaném v roce 1809, tvrdohlavě metodu nejmenších čtverců „můj princip, který používám již od roku 1795“. Legendre se proti tomu ohradil v dlouhém dopise Gaussovi, který stojí za přečtení (Gaussovy *Werke* X/1, str. 380; úplný text v anglickém překladu je v [15], str. 242–243: „je n'ai jamais appelé *principium nostrum* un principe qu'un autre avait publié avant moi“). Gauss Legendrovi nikdy neodpověděl, ale před jinými se zmínil o existenci záhadného zápisu ve svém diáři ze 17. června 1798, který zní prostě „# Calculus

probabilitatis contra La Place defensus“ (viz faksimile na obr. 3.1). Legendre mu to nikdy nezapomněl, mimo jiné i proto, že mladý Jacobi (v souvislosti s eliptickými funkcemi, viz [15], str. 246) a mladý Bolyai (neeuclidovská geometrie, viz [2], str. 99) měli s Gaussem podobnou zkušenost.



Obr. 3.2. Motivace pro metodu nejmenších čtverců.

**Gaussovo pravděpodobnostní zdůvodnění metody nejmenších čtverců.** Gauss zašel mnohem dále než Legendre a zodpověděl otázku: „Proč právě nejmenší čtverce, a ne třeba nejmenší čtvrté mocniny nebo nejmenší šesté mocniny?“ Pro vysvětlení jeho myšlenky se nejprve podíváme na jednoduchý případ, aproximaci tří „pozorování“  $x_i, y_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) „oběžnou drahou“, která je přímkou

$$y = a + bx \tag{3.1}$$

(viz obr. 3.2). Pokud tyto tři body neleží na jedné přímce, pak existují tři různé přímky, z nichž však žádná nevyhovuje (viz obr. 3.2 vlevo). Předpokládejme nyní, že na určité přímce *existují hodnoty*

$$\beta_i = a + bx_i \tag{3.2}$$

a že měření  $y_i$  jsou náhodné vzorky, jejichž chyba vyhovuje určitému zákonu pravděpodobnosti. Nejběžnější rozložení je (viz obr. 3.2 vpravo, pravděpodobnost je dána různými tóny šedi)<sup>6)</sup>

$$P(0 \leq \beta_i - y_i \leq \Delta y) = \frac{e^{-\frac{(\beta_i - y_i)^2}{2\sigma^2}}}{\sigma\sqrt{2\pi}} \Delta y.$$

Pravděpodobnost získání *tří* hodnot  $y_i, y_2, y_3$  (s přesností  $\Delta y$ ) je součinem tří výše uvedených pravděpodobností, tj.

$$\left(\frac{\Delta y}{\sigma\sqrt{2\pi}}\right)^3 \prod_{i=1}^3 e^{-\frac{(\beta_i - y_i)^2}{2\sigma^2}} = \left(\frac{\Delta y}{\sigma\sqrt{2\pi}}\right)^3 e^{-\frac{\sum_{i=1}^3 (\beta_i - y_i)^2}{2\sigma^2}}.$$

<sup>6)</sup> Laplace dospěl k tomuto zákonu pomocí binomických koeficientů a přechodu  $n \rightarrow \infty$ ; pro Gausse to byl jednoduše zákon, který kopíruje dobře známý aritmetický průměr.



Pak máme *maximální pravděpodobnost* našeho výsledku, pokud je tato pravděpodobnost maximální, tedy pokud je exponent

$$\sum_{i=1}^3 (\beta_i - y_i)^2 = \min !$$

a s (3.2)

$$\sum_{i=1}^3 (a + bx_i - y_i)^2 = \min !,$$

což je přesně řečeno *principium nostrum*. Po zderivování posledního výrazu vzhledem k  $a$  a  $b$  dostaneme

$$\begin{pmatrix} \sum 1, & \sum x_i \\ \sum x_i, & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix} \quad \text{nebo} \quad A^T A \alpha = A^T y, \quad A = \begin{pmatrix} 1, & x_1 \\ 1, & x_2 \\ 1, & x_3 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Tyto rovnice se nazývají *normální rovnice*. Je štěstím, že *principium* s nejlepším pravděpodobnostním zdůvodněním vede také k problému s nejjednodušším řešením, k *lineární* soustavě rovnic.

**Další vývoj.** Z mnoha důležitých důsledků, které následovaly po objevu metody nejmenších čtverců, zmíníme následující:

- *Gaussova eliminace*. Aby dokázal řešitelnost normálních rovnic, Gauss v [9] podal první popis algoritmu eliminace pro lineární rovnice.
- *Gaussova-Newtonova metoda*. Ve stejném článku Gauss také vysvětlil, jak se *nelineární* problémy nejmenších čtverců změni na lineární v blízkosti prvního přibližného řešení, které je dále opakovaně vylepšováno.
- *Laplaceova centrální limitní věta*. V roce 1809 Laplace publikoval svou centrální limitní větu a ukázal, že *libovolná* pravděpodobnostní funkce se po použití aritmetického průměru blíží k normálnímu rozdělení pro  $n \rightarrow \infty$ . Brzy poté ji rozšířil a zdůvodnil metodu nejmenších čtverců pro libovolnou pravděpodobnostní funkci a  $n \rightarrow \infty$ . Všechny tyto výsledky byly publikovány ve velkém díle *Théorie analytique des probabilités* z roku 1812.
- V roce 1823 Gauss publikoval ve dvou částech druhé zásadní pojednání o nejmenších čtvercích, [10] *Theoria combinationis observationum erroribus minimis obnoxiae*, obsahující nové zdůvodnění metody nejmenších čtverců nezávisle na pravděpodobnostní funkci, které se dnes nazývá *Gaussova-Markovova věta*.
- V roce 1828 Gauss publikoval *Supplementum*, jež obsahuje působivé výpočty geodetické triangulace Nizozemska a oblasti Hannoveru.
- Ve stejném roce objevil Bessel původně pro diskrétní případ vztah mezi myšlenkou nejmenších čtverců, vztahy ortogonality a Eulerovými-Fourierovými vztahy pro trigonometrickou aproximaci. Tento objev, který v roce 1883 rozšířil Gram na spojitý případ, je základem teorie Hilbertových prostorů  $L^2$  pro Fourierovy řady.

- V roce 1845 Jacobi publikoval svou metodu řešení normálních rovnic pomocí následných rotací v  $\mathbb{R}^2$ . Rotace vedly v 50. letech 20. století ke Givensově metodě triangulace a k prvnímu stabilnímu algoritmu pro výpočet vlastních čísel.
- V roce 1900 se objevil klasický článek Karla Pearsona [14], který spojil metodu nejmenších čtverců s rozdělením  $\chi^2$  a vedl ke slavnému  $\chi^2$ -testu pro spolehlivost hypotéz.
- V roce 1958 se objevuje Householderův algoritmus, který záměnou Givensových rotací vede ke QR rozkladu a díky Golubovi (1965) se stal nyní již standardním algoritmem pro problémy nejmenších čtverců. Všechny příklady, které následují, byly vypočítány tímto způsobem pomocí kódu, který napsal E. Hairer pro svůj kurz „Analyse Numérique“ (<http://www.unige.ch/math/folks/hairer/polycop.html>).

Úplné moderní zpracování metody nejmenších čtverců v numerické matematice, které obsahuje téměř 1000 bibliografických odkazů, je v Björckově knize [1]. Cennou pomocí pro čtenáře, kteří se zajímají o Gaussův přínos, je dvojjazyčná edice *Theoria combinationis observationum plus Supplementum* a *Anzeigen* a zejména pečlivě napsaný *Afterword* od G. W. Stewarta [16]. Mnoho původních textů přeložených do angličtiny lze najít v [12], oddíl 4.9 a 4.10.

**Oběžná dráha planety Ceres pomocí metody nejmenších čtverců.** Teď, když máme moderní algoritmus, chceme vypočítat z Piazzioho hodnot pomocí metody nejmenších čtverců dráhové elementy planety Ceres. Provedeme to takto: pro dané dráhové elementy  $\omega, \Omega, i, a, e, l_0$  vytvoříme podprogram, který vypočítá pomocí vzorců (2.1) až (2.5) pro časy  $t_i$  Piazzioho pozorování geocentrické zeměpisné délky  $\lambda_i$  a šířky  $\beta_i$ . Nezbytné výrazy pro solární heliocentrické souřadnice Země ( $X, Y, Z$ ) získáme ze serveru *L'Institut de mécanique céleste et de calcul des éphémérides* (<http://www.bdl.fr/ephemeride.html>). Tyto hodnoty po porovnání se *skutečnými pozorováními*  $\widehat{\lambda}_i, \widehat{\beta}_i$  definují funkci

$$F : \mathbb{R}^6 \longrightarrow \mathbb{R}^{38}$$

$$(\omega, \Omega, i, a, e, l_0) \longmapsto (\lambda_{t_1}(\dots) - \widehat{\lambda}_1, \dots, \lambda_{t_{19}}(\dots) - \widehat{\lambda}_{19},$$

$$\beta_{t_1}(\dots) - \widehat{\beta}_1, \dots, \beta_{t_{19}}(\dots) - \widehat{\beta}_{19}), \quad (3.4)$$

a musíme najít  $\omega, \Omega, i, a, e, l_0$  tak, aby

$$\|F(x)\|_2^2 = \sum_{i=1}^{19} ((\lambda_{t_i} - \widehat{\lambda}_i)^2 + (\beta_{t_i} - \widehat{\beta}_i)^2) = \min! \quad (3.5)$$

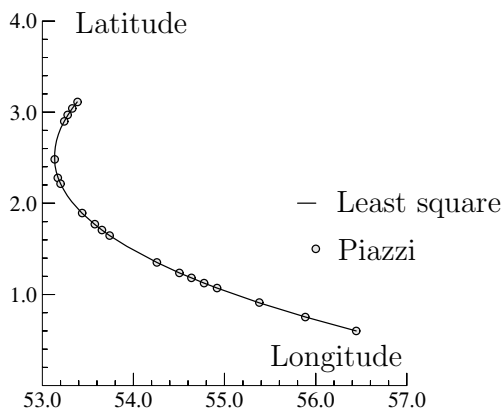
Jako počáteční hodnoty vybereme hodnoty blízké Gaussovým a po pěti Gaussových-Newtonových iteracích získáme řešení pomocí metody nejmenších čtverců s přesností na 7 míst (hodnoty jsou v tabulce 3.1).

Na obrázku 3.3 porovnáme Piazzioho pozorování a naše výpočty. Pozdější výpočty vyhovují Piazzioho pozorováním lépe než Gaussovy hodnoty, ale Gaussovy elementy jsou blíže ke skutečným dráhovým elementům. Důvodem je to, že některá z Piazzioho měření obsahují malou chybu (což zjistil již Gauss) a že tyto chyby nesmírně ovlivňují řešení (čehož si byl Gauss také vědom). Tento jev se dnes nazývá *špatně podmíněný problém*.

TABULKA 3.1. Dráhové elementy planety Ceres (pomocí metody nejmenších čtverců)

Lomený úhel .....	318° 12' 27"
$\Omega$ .....	80° 55' 9"
Sklon dráhy .....	10° 35' 38"
Logaritmus hlavní poloosy .....	0,4448506
Excentricita .....	0,0694885
Epocha 31. 12. 1800, střední heliocentrická délka .....	75° 47' 31"

$t_1$	$\lambda=53.38$	$\beta=3.11$
$t_2$	$\lambda=53.33$	$\beta=3.04$
$t_3$	$\lambda=53.28$	$\beta=2.97$
$t_4$	$\lambda=53.24$	$\beta=2.90$
$t_5$	$\lambda=53.13$	$\beta=2.48$
$t_6$	$\lambda=53.17$	$\beta=2.28$
$t_7$	$\lambda=53.20$	$\beta=2.21$
$t_8$	$\lambda=53.44$	$\beta=1.89$
$t_9$	$\lambda=53.57$	$\beta=1.77$
$t_{10}$	$\lambda=53.65$	$\beta=1.71$
$t_{11}$	$\lambda=53.74$	$\beta=1.65$
$t_{12}$	$\lambda=54.26$	$\beta=1.35$
$t_{13}$	$\lambda=54.50$	$\beta=1.24$
$t_{14}$	$\lambda=54.64$	$\beta=1.18$
$t_{15}$	$\lambda=54.77$	$\beta=1.13$
$t_{16}$	$\lambda=54.92$	$\beta=1.07$
$t_{17}$	$\lambda=55.38$	$\beta=0.91$
$t_{18}$	$\lambda=55.89$	$\beta=0.75$
$t_{19}$	$\lambda=56.44$	$\beta=0.60$



Obr. 3.3. Vypočítané a pozorované polohy planety Ceres.

#### 4. Některé dnešní příklady

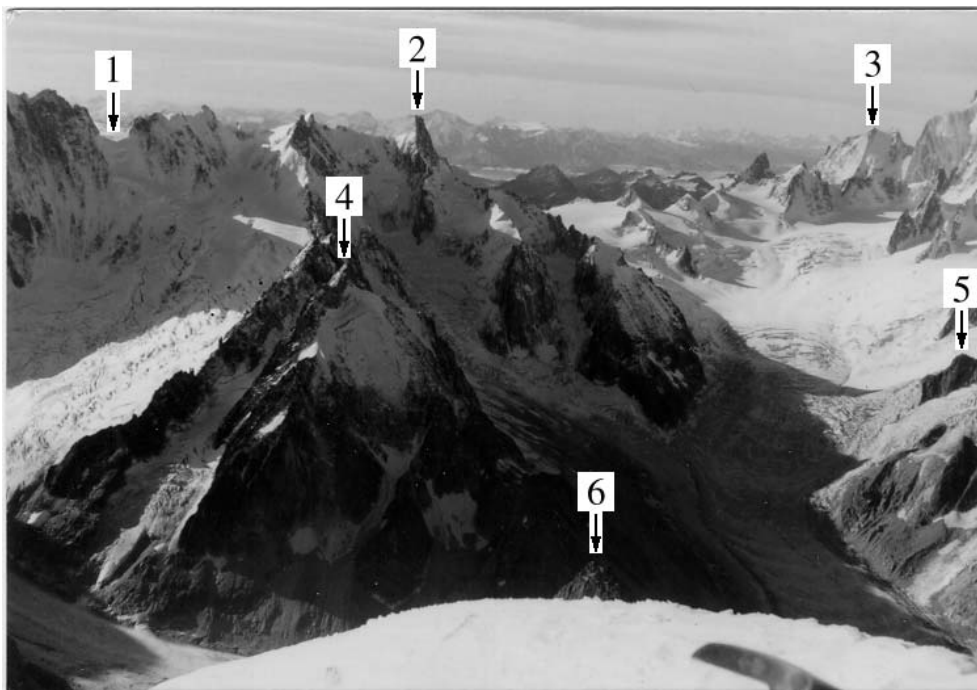
*Metoda nejmenších čtverců je automobilem moderní statistické analýzy...*

(Tak zní první věta v knize Stigler [17].)

Téměř všude, kde se musejí analyzovat hodnoty nebo upravovat modely, se dnes používá metoda nejmenších čtverců, a to velmi často i u problémů velké dimenze. Zvláště působivé příklady ilustrující pokrok této teorie lze najít v knize od Deuffharda [5], která právě vychází. Zde vysvětlíme podrobněji tři pěkné příklady z každodenního života.

##### 4.1. Umístění fotoaparátu

*Problém.* Máme fotografii (viz obr. 4.1), na které rozeznáváme několik bodů, pro něž máme změřeny snímkové souřadnice  $(\hat{u}_k, \hat{v}_k)$ . Pro stejné body určíme z mapy odpovídající prostorové souřadnice  $(x_k, y_k, z_k)$ , kde počátek pro  $x$  a  $y$  je umístěn náhodně a  $z$  je nadmořská výška. Úkolem je najít umístění fotoaparátu, jeho ohniskovou vzdálenost a úhel sklonu. Kopii mapy, což je švýcarská národní mapa s měřítkem 1 : 50 000, folio 5003, lze najít na adrese <http://www.unige.ch/math/folks/haierer/polycop.html>. V tabulce 4.1 jsou udány hodnoty, které jsme použili v našich výpočtech.



Obr. 4.1. Fotografie z oblasti Mont Blanc (foto: G. WANNER).

TABULKA 4.1. Hodnoty pro problém fotoaparátu (v metrech)

$k$	$\hat{u}_k$	$\hat{v}_k$	$x_k$	$y_k$	$z_k$
1. Col des Grandes Jorasses	-0.0480	0.0290	9855	5680	3825
2. Aiguille du Géant	-0.0100	0.0305	8170	5020	4013
3. Aig. Blanche de Peuterey	0.0490	0.0285	2885	730	4107
4. Aiguille du Tacul	-0.0190	0.0115	8900	7530	3444
5. Petit Rognon	0.0600	-0.0005	5700	7025	3008
6. Aiguille du Moine	0.0125	-0.0270	8980	11120	3412

Pro řešení našeho problému označíme  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$  umístění objektivu fotoaparátu v prostoru a  $\vec{a} = (a, b, c)$  kolmý vektor od objektivu na projekční rovinu. Nakonec necháme fotoaparát otáčet kolem  $\vec{a}$  o úhel  $\theta$ . Musíme tedy zjistit sedm neznámých. Jakmile těchto sedm proměnných zafixujeme, musíme podobně jako Gauss, ale mnohem jednodušeji, najít vztah mezi souřadnicemi  $x, y, z$  v prostoru a odpovídajícími projektivními body  $u, v$  na fotografii. K tomuto účelu fixujeme dva kolmé vektory v projekční rovině

$$\vec{h} = \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}} \begin{pmatrix} b \\ -a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{g} = \frac{1}{\sqrt{(a^2 + b^2)(a^2 + b^2 + c^2)}} \begin{pmatrix} -ac \\ -bc \\ a^2 + b^2 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Pak pro daný bod  $(x, y, z)$  (viz obr. 4.2) vypočítáme vektor  $\vec{w}$  jako

$$\vec{w} = \lambda \cdot \begin{pmatrix} x - \tilde{x} \\ y - \tilde{y} \\ z - \tilde{z} \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

kde činitel  $\lambda$  je určen tak, aby platilo  $\langle \vec{w} - \vec{a}, \vec{a} \rangle = 0$ . Pak  $\alpha = \langle \vec{w}, \vec{h} \rangle$  a  $\beta = \langle \vec{w}, \vec{g} \rangle$  jsou souřadnice promítnutého bodu, které nakonec otočíme o  $\theta$ :

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

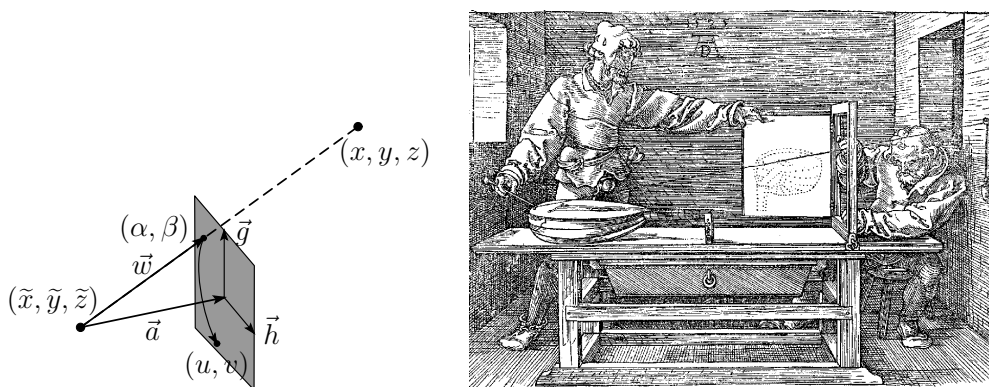
Nejlepší řešení tedy máme, pokud tyto promítnuté body  $(u_k, v_k)$  pro hodnoty  $(x_k, y_k, z_k)$  nejlepším možným způsobem odpovídají naměřeným bodům  $(\hat{u}_k, \hat{v}_k)$  na fotografii, tedy podle „principium nostrum“, pokud

$$\sum_{k=1}^6 ((u_k - \hat{u}_k)^2 + (v_k - \hat{v}_k)^2) = \min! \quad (4.4)$$

U tohoto problému vede Gaussův-Newtonův algoritmus pro velmi hrubé počáteční hodnoty po několika iteracích k řešení

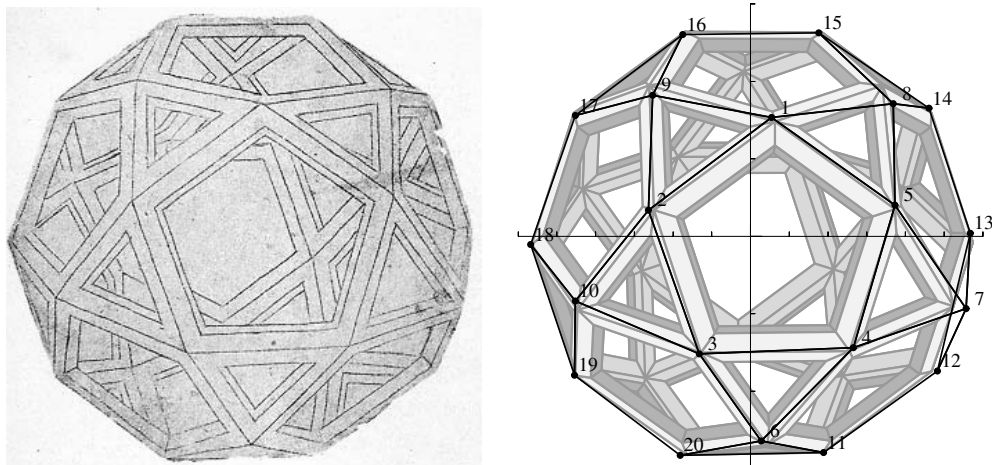
$$\tilde{x} = 9679, \quad \tilde{y} = 13\,139, \quad \tilde{z} = 4131.$$

Fotografie byla tedy pořízena z vrcholu Aiguille Verte, který má známou nadmořskou výšku 4122 metrů. Přesnost těchto amatérských výpočtů není stejná jako přesnost profesionálních švýcarských topografů.



Obr. 4.2. Perspektivní zobrazení dnes (vlevo) a před 500 lety (Dürer, 1525, vpravo).

## 4.2. Leonardův mnohostěn



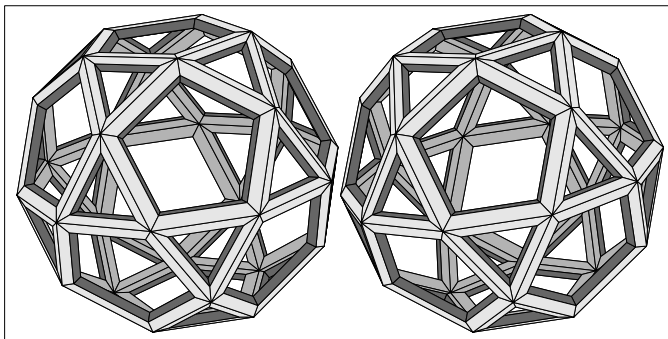
Obr. 4.3. Vlevo – Kresba Leonarda da Vinci (1510, Codex Atlanticus fol. 707r; Bibliotheca Ambrosiana, Milano) z [13], str. 100. Vpravo – Leonardovy vrcholy a šedě „opravená“ kresba (Assyrus Abdullus & Gerhardus Wannerus, *linguae programmatoriae Fortranus & Postscriptus, Calculatores SunBlade 100*, Universitas Genavæ).

Nyní použijeme stejný algoritmus na příklad z historie umění. „Hory“ jsou teď přesné vrcholy polopřavidelného ikosidodekaedru umístěného někde v prostoru a „fotografie“ je náčrt Leonarda da Vinci (viz obr. 4.3 vlevo), který vytvořil pro knihu *De divina proportione* od Luca Pacioliho v Benátkách v roce 1509. Pacioli v předmluvě říká, že byl vytvořen „božskou levou rukou mého přítele Lionarda z Florencie“ (citováno z [6], str. 253). Poté, co umístíme „fotoaparát“ na nejlepší možné místo, můžeme promítnout přesné vrcholy zpět na obrázek a téměř po 500 letech pomocí moderních počítačových pomůcek zjistit skutečnou přesnost Leonardova náčrtu. Změřené souřadnice dvaceti viditelných vrcholů jsou v tabulce 4.2.

TABULKA 4.2. Naměřené vrcholy z Leonardovy kresby (v mm)

$k$	$u_k$	$v_k$	$k$	$u_k$	$v_k$	$k$	$u_k$	$v_k$
1	5.409	30.691	8	36.865	34.219	15	17.609	52.536
2	-26.388	6.720	9	-25.283	36.394	16	-17.522	52.122
3	-13.259	-30.369	10	-45.244	-16.728	17	-45.244	31.161
4	26.517	-28.782	11	18.814	-55.828	18	-56.768	-2.147
5	37.265	8.054	12	48.271	-34.749	19	-45.433	-35.867
6	2.734	-52.888	13	56.767	0.764	20	-18.198	-56.563
7	55.650	-18.639	14	46.037	33.043			

Tyto body jsou znovu nakresleny na obrázku 4.3 vpravo černě, společně s „opraveným“ mnohostěmem (šedou barvou). Vidíme, že náčrt je ve středu velmi přesný, ale některé vrcholy směrem k periferii a v pozadí jsou méně „božské“.



Obr. 4.4. Stereoskopický pohled na Leonardův mnohostěn (podržte si obrázek blízko u očí a spojte obě kresby tím, že se budete dívat skrz papír).

Autoři tohoto článku byli natolik inspirováni Leonardovou kostrou mnohostěnu, že nemohli odolat potěšení a vytvořili si božský stereoskopický (tj. prostorový) pohled na tento krásný předmět (viz obr. 4.4).

### 4.3. Leonardo proti Verrocchiovi

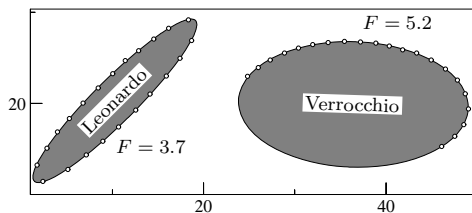
*Sklíčen je žák, který nepředstihne svého mistra.*

(Leonardův aforismus, viz [13], str. 20)

Ve středověkých obrazech se svaté osoby odlišovaly kruhovou aureolou za hlavou. Během renesance změnil vědecký vývoj aureoly na elipsy. Tak máme další příležitost vědecky prozkoumat přesnost jednoho z Leonardových obrazů. Vybrali jsme si obraz *Křest Krista* z roku 1472, kde mladý žák Leonardo přidal k obrazu svého mistra Andrea del Verrocchio dalšího anděla (viz obr. 4.5). Na obou elipsách změříme několik bodů a minimalizujeme odchylky na každém z nich metodou nejmenších čtverců

$$F = \sum_i (Ax_i^2 + 2Bx_iy_i + Cy_i^2 - Dx_i - Ey_i - 1) = \min !$$

Tentokrát dostáváme lineární problém s neznámými  $A, B, C, D, E$ . Porovnání minimální hodnoty  $F$  pro obě elipsy prokázalo, že Leonardo již *skutečně* „překonal svého

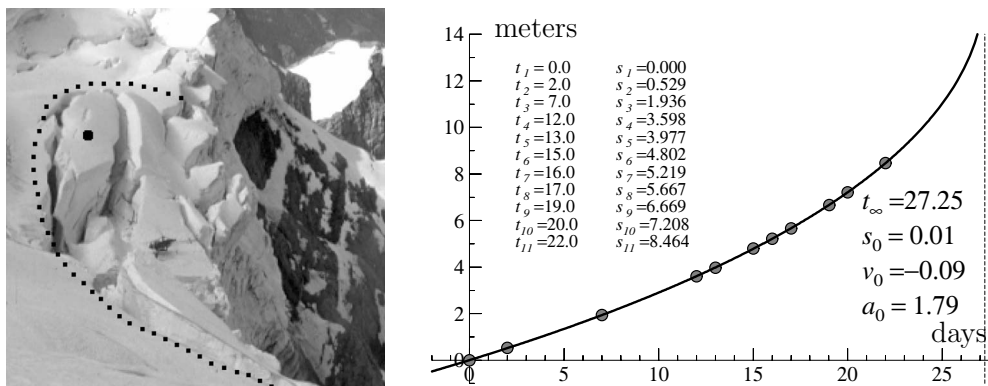


Obr. 4.5. Vlevo – andělé Leonarda a Verrocchia. Vpravo – nejlepší aproximace obou elips.

mistra“ navzdory tomu, že Verrocchio měl lehčí práci, protože větší část jeho elipsy není viditelná.

#### 4.4. Zavěšený ledovec nad Grindelwaldem

V roce 1999 se začal vysoko v horách nad Grindelwaldem ve Švýcarsku pohybovat zavěšený ledovec a ohrožoval oblast pod sebou obrovským vodopádem z ledu. Aby se zabránilo vážné nehodě, bylo nutné přesně předpovědět, kdy se ledovec utrhne. Vědci z ETH v Zürichu (M. Funk) tedy usadili do masy ledu měřicí tyč (viz obr. 4.6 vlevo) a pozorně sledovali měnící se umístění tyče. Změřené údaje jsou na obr. 4.6 vpravo. Čas  $t = 0$  odpovídá 18. červenci 1999, 7. hodině ráno.



Obr. 4.6. Vlevo – zavěšený ledovec nad Grindelwaldem s měřicí tyčí (foto M. Funk, z [7]). Vpravo – naměřené hodnoty a předpověď utržení ledovce.

Dřívější zkušenosti s ledovcovými vodopády (zejména s ledopádem na *Weisshornu*) ukázaly, že zvyšující se rychlost podobných ledových mas vyhovuje vzorci

$$v(t) = v_0 + \frac{a_0}{(t_\infty - t)^n},$$

kde  $n \approx \frac{1}{2}$ . Po integraci dostaneme pro pozice vztah

$$s(t) = s_0 + v_0 t + a_0 \frac{(t_\infty - 1)^{1-n} - t_\infty^{1-n}}{n - 1}. \quad (4.5)$$

Úkolem teď je zjistit neznámé konstanty  $s_0$ ,  $v_0$ ,  $a_0$  a  $t_\infty$  takovým způsobem, že se tato funkce blíží k naměřeným hodnotám s minimální chybou metody nejmenších čtverců. Takto získané řešení je na obrázku 4.6 vpravo a předpovídá ledopád pro  $t_\infty = 27,25$ , což odpovídá 14. srpnu, 1. hodině odpoledne. Skutečně, ledovec se utrhł 14. srpna ve dvě hodiny ráno. Předpověď formulovaná pět dní před událostí se zmýlila o méně než půl dne. Více podrobností lze najít v [7].

**Závěr.** Právě jsme viděli, jak pozorování několika „hvězd“ neobyčejným způsobem pomohlo vývoji moderní vědy, a musíme říci, že hvězdy tak *skutečně* ovlivňují náš život nejen způsobem, kterému věří čtenáři horoskopů.



**Poděkování:** Řadu námětů poskytli S. Cirilli, E. Hairer, Ch. Lubich, A. Ostermann a P. Wittwer, jimž by autoři rádi vyjádřili svou vděčnost. Zejména Stéphane nám prokázala neocenitelnou službu tím, že naskenovala všechny fotografie a připravila postscriptové soubory. Práce Assyra Abdulleho byla částečně podporována Švýcarským národním vědeckým fondem.

## L i t e r a t u r a

- [1] BJÖRCK, A.: *Numerical methods for least squares problems*. 408 str., SIAM 1996.
- [2] BÜHLER, W. K.: *GAUSS, eine biographische Studie*. Springer Verlag, 1987.
- [3] COLLINS II, G. W.: *The Foundation of celestial mechanics*. Astronomy and Astrophysics Series, vol. 16, Pachart Publishing House, Tuscon 1989.
- [4] DANJON, A.: *Astronomie générale*. Albert Blanchard, Paris, Seconde éd., 1986.
- [5] DEUFLHARD, P.: *Newton methods for nonlinear problems. Affine invariance and adaptive algorithms*. V tisku, Springer Verlag 2002.
- [6] FIELD, J. V.: *Rediscovering the Archimedean polyhedra: Piero della Francesca, Luca Pacioli, Leonardo da Vinci, Albrecht Dürer, Daniele Barbaro, and Johannes Kepler*. Arch. History Exact Sc. 50 (1996), 241–289.
- [7] FUNK, M., MINOR, H.-E.: *Eislawinen in den Alpen: Erfahrungen mit Schutzmassnahmen und Früherkennungsmethoden*. Wasserwirtschaft vol. 91 (2001), 362–368.
- [8] GAUSS, C. F.: *Summarische Übersicht der zur Bestimmung der Bahnen der beiden neuen Hauptplaneten angewandten Methoden*. Monatliche Correspondenz, herausgeg. Freiherr von Zach, Sept. 1809, Werke, vol. 6, 148–165.
- [9] GAUSS, C. F.: *Theoria motus corporum coelestium*. Perthes et Besser, Hamburgi (1809), Werke vol. 7, 1–288.
- [10] GAUSS, C. F.: *Theoria combinationis observationum erroribus minimis obnoxiae*. Pars Prior et Pars Post., Comm. Soc. Reg. Scient. Gott. 5 (1823), Werke, vol. 4, 1–26, 27–53; Supplementum Comm. Soc. Reg. Scient. Gott. 6 (1828), Werke, vol. 4, 55–93.
- [11] GAUSS, C. F.: *Elliptische Bahnbestimmung*. Aus Gauss' Nachlass, Werke, vol. 11, 221–252.
- [12] GOLDSTINE, H. H.: *A history of numerical analysis from the 16th through the 19th century*. Springer Verlag, 1977.
- [13] LETZE, O., BUCHSTEINER, T.: *Leonardo da Vinci, scientist inventor artist*. Exhibition Catalog 1999, Verlag Gerd Hajte, Ostfildern-Ruit, Germany.
- [14] PEARSON, K.: *On a criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling*. Phil. Mag. (5) 50 (1900), 157–175; corr. Phil. Mag. (6) 1 (1901), 670–671.
- [15] PLACKETT, R. L.: *Studies in the history of probability and statistics. XXIX, The discovery of the method of least squares*. Biometrika 59 (1972), 239–251.
- [16] STEWART, G. W.: *Gauss, Theory of the combination of observations least subject to errors*. Bilingual edition of [10] with an Afterword, Classics in Appl. Math., SIAM 1995.
- [17] STIGLER, S. M.: *Gauss and the invention of least squares*. The Annals of Stat. 9 (1981), 465–474.
- [18] TEETS, D., WHITEHEAD, K.: *The discovery of Ceres: How Gauss became famous*. Math. Magazine 72 (1999), 83–93.
- [19] F. X. VON ZACH: *Fortgesetzte Nachrichten über den längst vermutheten neuen Haupt-Planeten unseres Sonnen-Systems*. In *Gauss Werke*, vol. 6, 199–204.