Метод наименьших квадратов

Метод наименьших квадратов (МНК) используется во многих случаях, когда возникает необходимость обработки экспериментальных данных, которые, весьма возможно, получены со значительной погрешностью. В таких случаях необходимо провести аппроксимирующую кривую, которая не проходит через экспериментальные точки, но в то же время отражает закономерность исследуемого явления, процесса и т.д.

Линейная задача МНК

Пусть известно, что величина y является функцией от аргумента x, причем в результате измерений получена таблица значений $y_i = y(x_i)$ ($i = 0, 1, \ldots, m$). Обозначим узлы исходной таблицы через x_i, где $(0 \le i \le m)$ – номер узла. Считаем известными значения экспериментальных данных y_i в узловых точках.

Введем непрерывную функцию $F_n(x)$ для аппроксимации дискретной зависимости $f(x_i)$. В узлах функции $F_n(x)$ и $f(x)$ будут отличаться на величину $\varepsilon_i = F_n(x_i) - y_i$. Отклонения ε_i могут принимать как положительные, так и отрицательные значения. Чтобы не учитывать знаки, возведем каждое отклонение в квадрат и просуммируем их по всем узлам

$$\sum_{i=0}^{i<m} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=0}^{i<m} (F_n(x_i) - y_i)^2 = Q \qquad (1)$$

Метод построения аппроксимирующей функции $F_n(x)$ из условия минимума величины Q – называется *методом наименьших квадратов*.

Предположим, что для аппроксимации функции $f(x)$ используется линейная модель

$$F_n(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + c_{n-1}\varphi_{n-1}(x), \qquad (2)$$

Где $\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$, ... , $\varphi_{n-1}(x)$ − заданные базисные функции; $c_0, \ldots, c_{n-1}$

− коэффициенты, определяемые при минимизации величины Q.

С математической точки зрения необходимое условие экстремума функции Q является:

$$\frac{\partial Q}{\partial c_k} = 0, \qquad k = 0, 1, \ldots n-1,$$

$$\frac{\partial Q}{\partial c_k} = 0, \qquad (k = 0, 1, \ldots, n-1)$$

Принимая во внимание (2), имеем

$$\frac{\partial Q}{\partial c_0} = 2\overline{\sum_{i=0}^{i<m}}[c_0\varphi_0(x_i) + c_1\varphi_1(x_i) + \ldots + c_{n-1}\varphi_{n-1}(x_i) - y_i]\varphi_0(x_i) = 0,$$

$$\frac{\partial Q}{\partial c_0} = 2\sum_{i=0}^{i<m}[c_0\varphi_0(x_i) + c_1\varphi_1(x_i) + \ldots + c_{n-1}\varphi_{n-1}(x_i) - y_i]\varphi_0(x_i) = 0,$$

$$\ldots \tag{3}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial c_{n-1}} = 2\sum_{i=0}^{i<m}[c_0\varphi_0(x_i) + c_1\varphi_1(x_i) + \ldots + c_{n-1}\varphi_{n-1}(x_i) - y_i]\varphi_{n-1}(x_i) = 0,$$

Из системы (3) определяются все коэффициенты c_k . Система (3) называется нормальной системой МНК. Матрица этой системы имеет следующий вид

$$\begin{matrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \ldots & (\varphi_0, \varphi_{n-1}) \\ (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_1) & \ldots & (\varphi_1, \varphi_{n-1}) \\ & & \ldots & \\ (\varphi_0, \varphi_{n-1}) & (\varphi_1, \varphi_{n-1}) & \ldots & (\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1}) \end{matrix} \tag{4}$$

и называется она *матрицей Грама.* Эта матрица является симметричной, положительно определенной, определитель её будет отличен от нуля, если выбранные базисные функции φ_k являются линейно независимыми, кроме того, в этом случае система (3) будет иметь единственное решение.

Выберем в качестве базисных функций $\varphi_k(x)$ степенной ряд:

$$\varphi_0(x) = 1; \varphi_1(x) = x, \ldots, \varphi_{n-1}(x) = x^{n-1}. \tag{5}$$

Запишем расширенную матрицу системы нормальных уравнений для базиса (5)

$$\begin{matrix}
(m)c_0 & +(\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_1 + & (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^2)c_2 + \ldots & +(\sum_{i=0}^{i<m} x_i^{n-1})c_{n-1} & = \sum_{i=0}^{i<m} y_i \\
(\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_0 & +(\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_1 + & (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^2)c_2 + \ldots & +(\sum_{i=0}^{i<m} x_i^{n})c_{n-1} & = \sum_{i=0}^{i<m} y_i x_i \\
. \quad . & . \quad . & . \quad . & . \quad . & \\
(\sum_{i=0}^{i<m} x_i^{n-1})c_0 & +(\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_1 + & (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^2)c_2 + \ldots & +(\sum_{i=0}^{i<m} x_i^{m+n-2})c_{n-1} & = \sum_{i=0}^{i<m} y_i x_i^{n-1}
\end{matrix}$$

Пример 1. Пусть функция $y = f(x)$ задана таблицей

X_i	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
Y_i	0.21	0.23	0.31	0.29	0.42	0.35	0.58	0.61	0.59	0.66

Приблизить данную функцию многочленами первой и второй степени, используя МНК; найти соответствующие среднеквадратичные отклонения.

Решение

Из условия задачи следует, что m = 10 и для линейной аппроксимации n = 2, а в случае приближения многочленом второй степени n = 3.
Для линейной аппроксимации система нормальных уравнений имеет вид

$$(m)c_0 + (\sum_{i=0}^{i<m} x_i) = \sum_{i=0}^{i<m} y_i \quad (\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_0 + (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^2) = \sum_{i=0}^{i<m} y_i x_i \qquad (6)$$

Запишем также систему нормальных уравнений для квадратичной аппроксимации.

$$(m)c_0 + (\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_1 + \sum_{i=0}^{i<m} x_i^2 = \sum_{i=0}^{i<m} y_i$$

$$(\sum_{i=0}^{i<m} x_i)c_0 + (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^2)c_1 + \sum_{i=0}^{i<m} x_i^3 = \sum_{i=0}^{i<m} y_i x_i$$

$$(\sum_{i=0}^{i<m} x_i^2)c_0 + (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^3)c_1 + (\sum_{i=0}^{i<m} x_i^4) = \sum_{i=0}^{i<m} y_i x_i^2 \qquad (7)$$

В частности для $m = 10$ и $n = 2$, система (5) имеет вид

$$10c_0 + 4{,}5c_1 = 4{,}25$$
$$4{,}5c_0 + 2{,}85c_1 = 2{,}356$$

отсюда находим $c_0 \approx 0,\ 183$ и $c_1 \approx 0{,}538$.
В случае $n = 3$ имеем

$$10c_0 + 4{,}5c_1 + 2{,}85c_2 = 4{,}25$$
$$4{,}5c_0 + 2{,}85c_1 + 2{,}025c_2 = 2{,}356$$
$$2{,}85c_0 + 2{,}025c_1 + 1{,}5333c_2 = 1{,}6154.$$

Решая полученную систему, находим $c_0 \approx 0,\ 194$ $c_1 \approx 0{,}452$ и $c_2 \approx 0{,}0947$.
Среднеквадратичное отклонение

$$\delta_n = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=0}^{i<m}(F(x_i) - y_i)^2}\ .$$

В данном случае $\delta_2 \approx 0{,}0486$; $\delta_3 \approx 0{,}0481$.

В рассматриваемом примере, учитывая большую простоту использования линейных функций, достаточно остановиться на линейном приближении. $f(x) \approx 0{,}183 + 0{,}583x$.