Метод наименьших квадратов

Метод наименьших квадратов получил широкое распространение при статистической обработке экспериментальных данных, содержащих случайные ошибки. Этот метод применяется также для приближенной замены заданной функции другими более простыми функциями.

Пусть задан набор экспериментальных точек с координатами $(x_k\,,\ y_k)$, $k = 0\ ,\ 1\ ,\ \ldots\ ,\ K$. Согласно методу наименьших квадратов аппроксимирующую функцию выбирают таким образом, чтобы была минимальна сумма

$$S = \sum_{k=1}^{K} w_k \left[Y(x_k) - y_k \right]^2 .$$

Величину w_k называют весом результата измерения. В случае равноточных измерений полагают $w_1 = w_2 = \ldots = w_k = 1$. Величина $\left| Y(x_k) - y_k \right|$ - это абсолютное значение отклонения экспериментальной точки от той, которая вычислена из функциональной зависимости $Y(x)$. Чаще всего функцию $Y(x)$ выбирают в виде алгебраического полинома

$$Y(x) = P_0(x) = C_0 + C_1 x + C_2 x^2 + \ldots + C_\nu x^\nu .$$

При этом коэффициенты полинома $C_0, C_1, \ldots, C_\nu$ находятся из критерия наименьших квадратов как

$$S = \sum_{k=1}^{K} w_k \left[C_0 + C_1 x_k + \ldots + C_\nu x_k^\nu - y_k \right]^2 = \min .$$

Вычисляя соответствующие производные $\partial S/\partial C_0$, $\partial S/\partial C_1$, … , $\partial S/\partial C_\nu$ и приравнивая их к нулю, получаем систему так называемых нормальных уравнений:

$$\left(\sum_k w_k\right) C_0 + \left(\sum_k w_k x_k\right) C_1 + \ldots + \left(\sum_k w_k x_k^{\nu}\right) C_\nu = \sum_k w_k y_k ,$$

$$\left(\sum_k w_k x_k\right) C_0 + \left(\sum_k w_k x_k^2\right) C_1 + \ldots + \left(\sum_k w_k x_k^{\nu+1}\right) C_\nu = \sum_k w_k x_k y_k ,$$

....

$$\left(\sum_k w_k x_k^{\nu}\right) C_0 + \left(\sum_k w_k x_k^{\nu+1}\right) C_1 + \ldots + \left(\sum_k w_k x_k^{2\nu}\right) C_\nu = \sum_k w_k x_k^{\nu} y_k .$$

Это система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $C_0, C_1, \ldots, C_\nu$. Для полинома степени ν получается система из $(N = \nu + 1)$ уравнений. Количество различных сумм, которые надо вычислять для определения матрицы коэффициентов при неизвестных равно $(2\,\nu + 1)$, для определения вектора-столбца свободных членов - $(\nu + 1)$. Решение такой системы нормальных уравнений может проводиться методом исключения Гаусса.

Аппроксимация полиномами $y(x) = \sum_{i=0}^{k-1} C_i x^i$ имеет следующие особенности:

1. $k \le n$, т.е. число неизвестных коэффициентов не должно превышать общего числа точек в наборе,
2. $k \le 5 - 7$, так как численные методы при большом k становятся неустойчивыми и плохо обусловленными.

Часто заранее оказывается неизвестно, какого порядка нужно взять полином, чтобы хорошо описать экспериментальные данные. Критерий, позволяющий считать, что полином ν-ого порядка хорошо описывает экспериментальные данные, а полином $(\nu - 1)$-ого порядка в этом отношении еще неудовлетворителен, зависит также и от вида решаемой задачи. Чаще всего в качестве такого критерия берется среднеквадратичное отклонение или максимальное абсолютное отклонение.

В качестве иллюстрации на рис.1 приведены точки, полученные в результате некоторого эксперимента, и кубическая парабола, проведенная по методу наименьших квадратов. Соответствие экспериментальных данных и теоретической кривой производит впечатление удовлетворительного, тем самым оправдывается выбор кубической параболы.

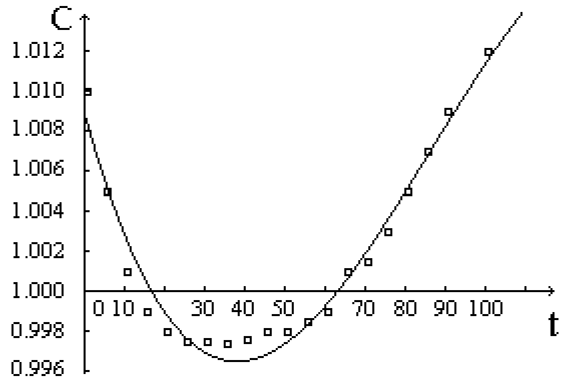

Рис. 1

Метод наименьших квадратов может использоваться не только с алгебраическими полиномами, но и с функциями другого типа. Нормальные уравнения не всегда оказываются линейными. Выбор типа функциональной зависимости, который лучше всего подходит к данным экспериментальным точкам, возлагается на исследователя.

В работе требуется аппроксимировать экспериментальные характеристики многочленами, Программа должна работать с многочленами любой степени, причем степень аппроксимирующего полинома задается с терминала во время выполнения программы.

После нахождения коэффициентов полинома следует вычислить значения полинома в узловых точках. По степени близости значений полинома в точках x_k и экспериментальных точек y_k можно судить о качестве произведений аппроксимации. При этом полином целесообразно представить в виде

$$P_\nu = (\ldots(c_\nu x + c_{\nu-1})x + \ldots + c_1)x + c_0$$

Такая запись (схема Горнера) позволяет минимизировать число выполняемых арифметических операций, избегая возведения в степень. Вычисление значений полинома по схеме Горнера может быть реализовано с помощью следующих операторов:

```
P=0;
FOR (j = power;j>=0; j--)
     P=P*x+ sol[j];
```

З а д а н и е : составьте программу для аппроксимации таблично заданной функции алгебраическим полиномом по методу наименьших квадратов.

Для тестирования программы в качестве исходной информации можно задать несколько точек параболы n-й степени и посмотреть, получаются ли в результате вычислений те же коэффициенты.