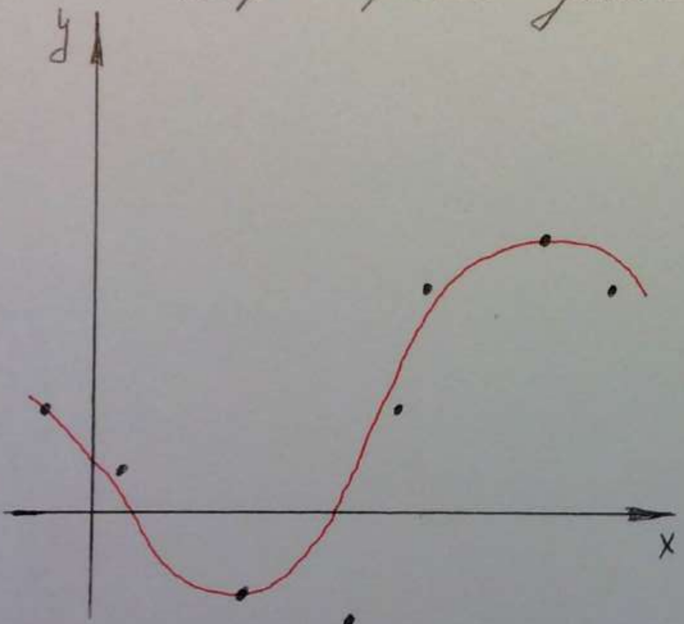
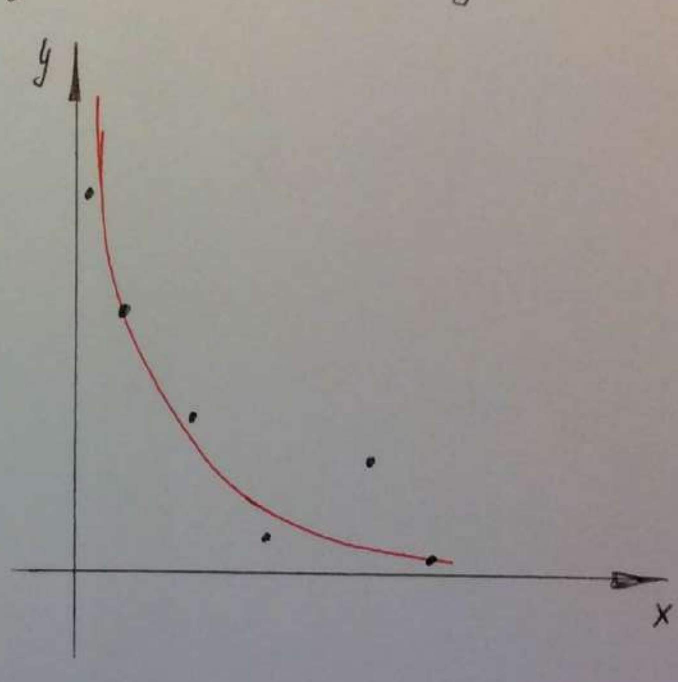
Метод наименьших квадратов (МНК)

МНК используется в случае необходимости выразить в виде функции связь между величинами, которые заданы в виде набора точек с координатами (x, y)

Цели нахождения кривой:

- сгладить отклонения, обусловленные ошибками
- интерполировать промежуточные значения
- экстраполировать участки без эксперементальных данных

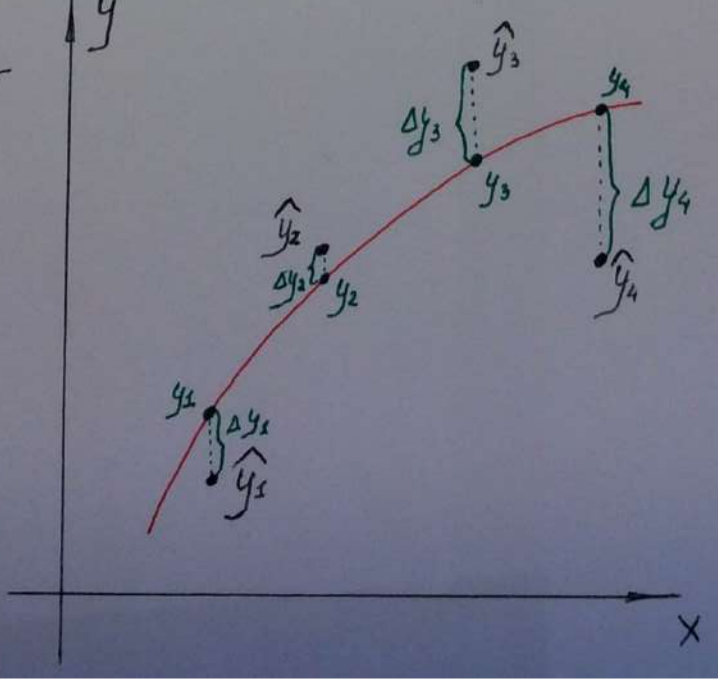




$\hat{y}_1 - \hat{y}_4$ - эксперимент

$y_1 - y_4$ - расчёт

$(\hat{y}_i - y_i)^2$ - квадрат ошибки



Необходимо выбрать критерии, согласно которым та или иная кривая является наиболее близким приближением к исходной информации (к эксперименту)

Критерий – сумма всех квадратичных ошибок должна быть минимальной

$$R = \sum_{i=0}^{N} (\hat{y}_i - y_i)^2 \longrightarrow min$$

$\hat{y}_i$ - экспериментальные значения
y_i - расчетные значения

① Предположим, что наша искомая зависимость описывается уравнением $y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2$

Выбор уравнения зависит от расположения исходных точек. Оценка типа зависимости происходит аналитически. А после расчета значения R возможно сделать вывод о том, верно ли была определена (выбрана, предположена) зависимость

② Для выбранной зависимости необходимо найти коэффициенты: $\boxed{\text{уравнение} \quad y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2}$

$\boxed{\text{искомые коэффициенты} \quad a_0 \ a_1 \ a_2}$

Значения a_0 a_1 a_2 должны быть такими, чтобы

$$\boxed{R \to min}$$

$$R = \sum_{i=0}^{N-1} (\hat{y}_i - y_i)^2 = \sum_{i=0}^{N-1} (\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2 \longrightarrow min$$

Правила сумм

① $\sum_{i=0}^{N-1} (x_i + y_i) = \sum_{i=0}^{N-1} x_i + \sum_{i=0}^{N-1} y_i$

② $\sum_{i=0}^{N-1} a x_i = a \sum_{i=0}^{N-1} x_i$, где a - численная константа

③ $\frac{d \sum_{i=0}^{N-1} f(x)}{dx} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{d f(x)}{dx}$

④ $\sum_{i=0}^{N-1} a = a \cdot N$

Для того, чтобы найти такие a_0, a_1, a_2, чтобы $R \to min$ нужно найти "нули" первых производных по a_0, a_1 и a_2

$$\frac{\partial R}{\partial a_0} = 0 \qquad \frac{\partial R}{\partial a_1} = 0 \qquad \frac{\partial R}{\partial a_2} = 0$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_0} = \frac{\partial \left(\sum_{i=0}^{N-1} (\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2 \right)}{\partial a_0} =$$ используем правило ③

$$= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\partial (\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2}{\partial a_0} =$$ берем производную

$$= \sum_{i=0}^{N-1} -2 (\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2) =$$ используем правило ④

$$= -2 \sum_{i=0}^{N-1} (\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R}{\partial a_0} = -2\sum\limits_{i=0}^{N-1}\left(\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right) = 0 \\ \dfrac{\partial R}{\partial a_1} = -2\sum\limits_{i=0}^{N-1}\left(\left(\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)\cdot x_i\right) = 0 \\ \dfrac{\partial R}{\partial a_2} = -2\sum\limits_{i=0}^{N-1}\left(\left(\hat{y}_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)\cdot x_i^2\right) = 0 \end{cases}$$

Применяем правило 1

$$\begin{cases} \sum \hat{y}_i - \sum a_0 - \sum a_1 x_i - \sum a_2 x_i^2 = 0 \\ \sum \hat{y}_i x_i - \sum a_0 x_i - \sum a_1 x_i^2 - \sum a_2 x_i^3 = 0 \\ \sum \hat{y}_i x_i^2 - \sum a_0 x_i^2 - \sum a_1 x_i^3 - \sum a_2 x_i^4 = 0 \end{cases}$$

Применяем правило 2 a_0, a_1, a_2 – константы
их можно вынести из под суммы

$$\begin{cases} \sum \hat{y}_i = a_0 \cdot N + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 \\ \sum (\hat{y}_i \cdot x_i) = a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 \\ \sum (\hat{y}_i\, x_i^2) = a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 \end{cases}$$

Для упрощения вида системы введем обозначения

$S_0 = \sum x_i$ $\qquad$ $S_{y0} = \sum \hat{y}_i$

$S_1 = \sum x_i^2$ $\qquad$ $S_{y1} = \sum \hat{y}_i x_i$

$S_2 = \sum x_i^3$ $\qquad$ $S_{y2} = \sum y_i x_i^2$

$S_3 = \sum x_i^4$ $\qquad$ $\boxed{S_{yn} = \sum y_i x_i^n}$

$\boxed{S_n = \sum x_i^{n+1}}$

$$\boxed{\begin{cases} a_0 N + a_1 S_0 + a_2 S_1 = S_{y0} \\ a_0 S_0 + a_1 S_1 + a_2 S_2 = S_{y1} \\ a_0 S_1 + a_1 S_2 + a_2 S_3 = S_{y2} \end{cases}}$$

Полученная система уравнений решается методом Гаусса относительно a_0, a_1, a_2.