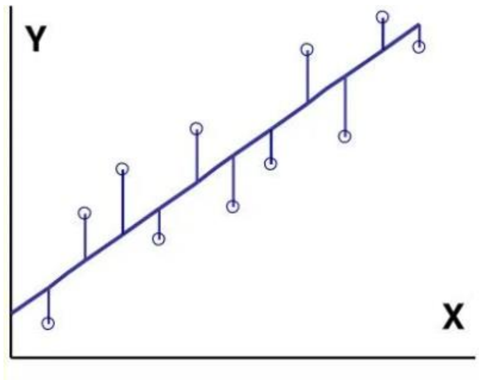
Метод наименьших квадратов

Метод наименьших квадратов с успехом применяется при необходимости приближенного представления опытных данных или полученного в виде таблицы решения некоторой задачи аналитической функцией, то есть в виде формулы, с которой удобнее работать при последующих вычислениях или анализе результатов. Этот процесс часто называют аппроксимацией опытных данных (решения задачи).

Пусть связь между переменными x и y представлена таблицей, содержащей n точек $(x_k\ ,\, y_k)$:

x	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	…..	x_n
y	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	…..	y_n

Вначале выберем, вообще говоря, произвольно аппроксимирующую функцию, например, $y = ax + b$. Такая аппроксимация называется линейной. Остается определить $a\,, b$, но для этого достаточно двух точек, так как через две точки проходит единственная прямая. В нашем примере точек значительно больше, причем совсем необязательно они лежат на найденной прямой. Очевидно, параметрами $a\,, b$ следует распорядиться так, чтобы точки, заданные таблицей, лежали как можно ближе к этой прямой, то есть суммарная погрешность аппроксимации была минимальной. Поскольку заданные точки могут лежать как выше, так и ниже аппроксимирующей прямой, то есть расстояния между табличными точками и точками прямой могут быть и положительными, и отрицательными.



То есть величина каждой погрешности может быть достаточно большой, а суммарная погрешность окажется малой в результате суммирования положительных и отрицательных величин. Это может создать ложное представление о качестве аппроксимирующей функции. Чтобы ликвидировать этот недостаток, было решено суммировать квадраты погрешностей, то есть положительные величины, а параметры $a\,, b$ подбирать так, чтобы суммарная погрешность аппроксимации была минимальной.

Введем функцию "невязки", то есть суммарной погрешности

$$F(a\,,b)=\sum_{k=1}^{n}\left[y_k-(ax_k+b)\right]^2=\sum_{k=1}^{n}(y_k-ax_k-b)^2\,,$$

здесь $(x_k\,,\,y_k)$ - табличные точки, ax_k+b - точки лежащие на аппроксимирующей прямой и соответствующие тому же значению x_k.

Остается определить минимум этой функции двух переменных. Очевидно, точки экстремума функции определяются из системы уравнений

$$\frac{\partial F(a\,,b)}{\partial a}=0\,,\quad \frac{\partial F(a\,,b)}{\partial b}=0\,.$$

Поскольку

$$\frac{\partial F(a\,,b)}{\partial a}=\sum_{k=1}^{n}2(y_k-ax_k-b)(-x_k)\,,\quad \frac{\partial F(a\,,b)}{\partial b}=\sum_{k=1}^{n}2(y_k-ax_k-b)(-1)\,,$$

имеем

$$\begin{cases} a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2+b\sum\limits_{k=1}^{n}x_k=\sum\limits_{k=1}^{n}x_k y_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k+b\sum\limits_{k=1}^{n}1=\sum\limits_{k=1}^{n}y_k \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2+b\sum\limits_{k=1}^{n}x_k=\sum\limits_{k=1}^{n}x_k y_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k+n\,b=\sum\limits_{k=1}^{n}y_k \end{cases}.$$

Остается показать, что найденные из этой системы $a\,,b$ соответствуют минимуму функции, для этого определим

$$\frac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial a^2}=2\sum_{k=1}^{n}x_k^2\,,\quad \frac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial b^2}=2\sum_{k=1}^{n}1=2n\,,\quad \frac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial a\partial b}=2\sum_{k=1}^{n}x_k\,.$$

Тогда

$$\nabla=\frac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial a^2}\,\frac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial b^2}-\left(\frac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial a\partial b}\right)^2=4\left[n\sum_{k=1}^{n}x_k^2-\left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)^2\right].$$

Из неравенства Коши $\left(\sum\limits_{k=1}^{n}x_k z_k\right)^2\le\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2\,\sum\limits_{k=1}^{n}z_k^2$ при $z_k=1$ получаем $\left(\sum\limits_{k=1}^{n}x_k\right)^2<n\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2$ (равенство в этом случае возможно только при всех $x_k=1$), откуда следует $\nabla>0$, но условия $\nabla>0$, $\dfrac{\partial^2 F(a\,,b)}{\partial a^2}=2\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2>0$ являются условиями минимума функции "невязки" $F(a\,,b)$, о чем говорилось выше.

Можно в качестве аппроксимирующих функций выбирать другие функции. Например, $y=ax^2+bx+c$, которая зависит от трех параметров $a\,,b\,,c$, определяемых из тех же соображений. Функция суммарной погрешности в этом случае имеет вид

$$\Phi(a\,,b\,,c)=\sum_{k=1}^{n}\left[y_k-\left(ax_k^2+bx_k+c\right)\right]^2=\sum_{k=1}^{n}\left(y_k-ax_k^2-bx_k-c\right)^2 .$$

Из

$$\frac{\partial\Phi(a\,,b\,,c)}{\partial a}=\sum_{k=1}^{n}2\left(y_k-ax_k^2-bx_k-c\right)\left(-x_k^2\right)$$

$$\frac{\partial\Phi(a\,,b\,,c)}{\partial b}=\sum_{k=1}^{n}2\left(y_k-ax_k^2-bx_k-c\right)\left(-x_k\right)$$

$$\frac{\partial\Phi(a\,,b\,,c)}{\partial c}=\sum_{k=1}^{n}2\left(y_k-ax_k^2-bx_k-c\right)(-1)$$

получаем систему уравнений относительно $a\,,b\,,c$:

$$\begin{cases} a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^4+b\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^3+c\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2=\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2y_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^3+b\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2+c\sum\limits_{k=1}^{n}x_k=\sum\limits_{k=1}^{n}x_ky_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{n}x_k^2+b\sum\limits_{k=1}^{n}x_k+nc=\sum\limits_{k=1}^{n}y_k \end{cases} .$$

Доказано, что при этом достигается минимальная погрешность аппроксимации.

Пример

X	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
Y	8.0	8.5	9.0	9.0	8.0	7.0	5.0	3.0	0

а). Пусть $y=ax+b$, тогда относительно параметров прямой имеем систему уравнений

$$\begin{cases} a\sum\limits_{k=1}^{9}x_k^2+b\sum\limits_{k=1}^{9}x_k=\sum\limits_{k=1}^{9}x_ky_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{9}x_k+9\,b=\sum\limits_{k=1}^{n}y_k \end{cases} .$$

Подсчитаем

$$\sum_{k=1}^{9}x_k=1.0+1.5+2.0+2.5+3.0+3.5+4.0+4.5+5=27 ,$$

$$\sum_{k=1}^{9}y_k=8.0+8.5+9.0+9.0+8.0+7.0+5.0+3.0+0=57.5 ,$$

$$\sum_{k=1}^{9}x_k^2=1.0+2.25+4.0+6.25+9.0+12.25+16.0+20.25+25=96 ,$$

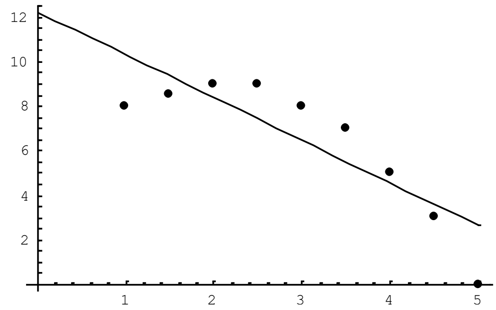
$$\sum_{k=1}^{9}x_ky_k=8.0+12.75+18.0+22.5+24.0+24.5+20.0+13.5+0=143.25 .$$

В итоге имеем систему

$$\begin{cases} 96a+27b=143.25 \\ 27a+9b=57.5 \end{cases}$$

Тогда $a=-1.95$, $b=12.24$, и аппроксимирующая функция $y=-1.95x+12.24$.

Приведем график, показывающий погрешность линейной аппроксимации данных таблицы



b). Пусть $y = ax^2 + bx + c$, тогда относительно параметров прямой имеем систему уравнений

$$\begin{cases} a\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^4 + b\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^3 + c\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^2 = \sum\limits_{k=1}^{n} x_k^2 y_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^3 + b\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^2 + c\sum\limits_{k=1}^{n} x_k = \sum\limits_{k=1}^{n} x_k y_k \\ a\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^2 + b\sum\limits_{k=1}^{n} x_k + nc = \sum\limits_{k=1}^{n} y_k \end{cases}.$$

Некоторые коэффициенты этой системы уравнений определены выше, подсчитаем остальные

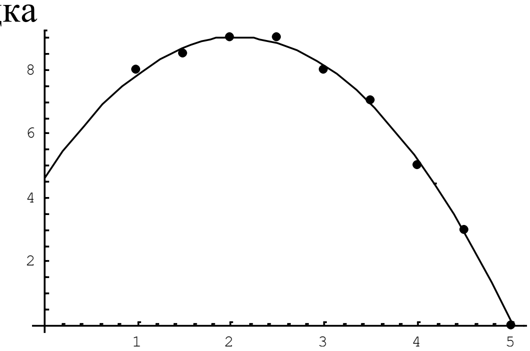
$$\sum_{k=1}^{9} x_k^3 = 378 \quad \sum_{k=1}^{9} x_k^4 = 1583.25, \quad \sum_{k=1}^{9} x_k^2 y_k = 417.875$$

Теперь

$$\begin{cases} 1583.25\, a + 378\, b + 96\, c = 417.875 \\ 378\, a + 96\, b + 27\, c = 143.25 \\ 96\, a + 27\, b + 9\, c = 57.5 \end{cases}$$

откуда следует $a = -1.037$, $b = 4.27$, $c = 4.64$ и $y = -1.037\, x^2 + 4.27\, x + 4.64$.

На графике показана погрешность аппроксимации табличных данных кривой второго порядка



Сравнивая графики, нетрудно заметить, что в данном случае линейная аппроксимация приводит к значительному отклонению табличных данных от прямой $y = -1.95x + 12.24$. В то же время эти точки практически ложатся на параболу $y = -1.037\, x^2 + 4.27\, x + 4.64$.