Minimi quadrati discreti

Sia dato un insieme di punti $(x_i, y_i),\ i = 0, ..., n$, dove eventualmente $y_i = f(x_i)$. Si vuole determinare un polinomio

$$\hat{p}_m(x) = \sum_{j=0}^{m} \hat{a}_j x^j,$$

di grado m (in genere $m << n$) che renda minima la funzione

$$E(a_0, a_1, ..., a_m) = \boxed{\sum_{i=0}^{n} [y_i - p_m(x_i)]^2} = \sum_{i=0}^{n} [y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j]^2,$$

cioè tale per cui:

$$E(\hat{a}_0, \hat{a}_1, ..., \hat{a}_m) \leq E(a_0, a_1, ..., a_m),$$

al variare dei coefficienti a_0, a_1,...a_m dei polinomi

$$p_m(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j,$$

di grado m.
Diremo che $\hat{p}_m$ approssima l'insieme di dati nel senso dei <u>minimi quadrati</u>.
Si può dimostrare che il punto di minimo per la funzione $E(a_0, a_1, ..., a_m)$ si ottiene imponendo le seguenti condizioni:

$$\frac{\partial E(a_0, a_1, ..., a_m)}{\partial a_0} = 0, \quad a_j = \text{costante } \forall j \neq 0$$
$$\frac{\partial E(a_0, a_1, ..., a_m)}{\partial a_1} = 0, \quad a_j = \text{costante } \forall j \neq 1$$
$$...$$
$$\frac{\partial E(a_0, a_1, ..., a_m)}{\partial a_m} = 0, \quad a_j = \text{costante } \forall j \neq m$$

(∂= simbolo di derivata parziale).

Si osservi che se i nodi x_i sono tutti distinti, per $m = n$ si ha un classico problema di interpolazione, con $E(\hat{a}_0, \hat{a}_1, ..., \hat{a}_m) = 0$.

Casi particolari

$\boxed{m = 0}$ $p_0(x) = a_0$,

$$E(a_0) = \sum_{i=0}^{n} (y_i - a_0)^2.$$

$$\frac{dE(a_0)}{da_0} = \frac{\partial E(a_0)}{\partial a_0} = \sum_{i=0}^{n} 2(y_i - a_0)(-1) = 0 \Rightarrow \boxed{\hat{a}_0 = \frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n} y_i}$$

dunque la soluzione $\hat{p}_0(x) = \hat{a}_0$ è data dalla media dei valori y_i.

$\boxed{m = 1}$ $p_1(x) = a_0 + a_1 x$,

$$E(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^{n}[(y_i - a_0 - a_1 x_i)]^2.$$

$$\frac{\partial E(a_0, a_1)}{\partial a_0} = \sum_{i=0}^{n} 2[(y_i - a_0 - a_1 x_i)](-1) = 0 \Rightarrow \boxed{a_0(n+1) + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i = \sum_{i=0}^{n} y_i}$$

$$\frac{\partial E(a_0, a_1)}{\partial a_1} = \sum_{i=0}^{n} 2[(y_i - a_0 - a_1 x_i)](-x_i) = 0 \Rightarrow \boxed{a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 = \sum_{i=0}^{n} x_i y_i}$$

La soluzione del sistema 2×2, noto come <u>sistema delle equazioni normali</u>:

$$\begin{bmatrix} (n+1) & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

fornisce i coefficienti del polinomio $\hat{p}_1(x) = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x$, noto come <u>retta dei minimi quadrati</u> o <u>retta di regressione</u>.
Si può verificare che il punto di coordinate (M_x, M_y) appartiene alla retta di equazione $y = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x$, dove

$$M_x := \frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n} x_i, \qquad M_y := \frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n} y_i.$$

$\boxed{m > 1}$

$\forall k = 0, ..., m$:

$$\frac{\partial E(a_0, a_1, ..., a_m)}{\partial a_k} = 0, \; a_j = \text{costante}, \; j \neq k.$$

Si ottiene il sistema delle equazioni normali $A\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{z}$, con

$$A_{k,j} = \sum_{i=0}^{n} x_i^{k+j}, \quad k, j = 0, ..., m,$$

$$z_k = \sum_{i=0}^{n} x_i^k y_i, \quad k = 0, ..., m.$$

Per esteso:

$$\begin{bmatrix} (n+1) & \sum_{i=0}^{n} x_i & ... & \sum_{i=0}^{n} x_i^m \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & ... & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} \\ ... & ... & ... & ... \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^m & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} & ... & \sum_{i=0}^{n} x_i^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \\ ... \\ \hat{a}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \\ ... \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^m y_i \end{bmatrix}$$

(Si osservi la numerazione inusuale di righe e colonne a partire dall'indice 0).