Метод найменших квадратів — метод знаходження наближеного розв'язку надлишково-визначеної системи. Часто застосовується в регресійному аналізі. На практиці найчастіше використовується лінійний метод найменших квадратів, що використовується у випадку системи лінійних рівнянь. Зокрема важливим застосуванням у цьому випадку є оцінка параметрів у лінійній регресії, що широко застосовується у математичній статистиці і економетриці.

Ми шукаємо таку пряму, що сума квадратів довжин відстаней від усіх точок до цієї прямої мінімальна

Мотиваційний приклад [ред. | ред. код]

В результаті досліду, отримали чотири (x, y) точки даних: $(1,6)$, $(2,5)$, $(3,7)$ і $(4,10)$ (позначені червоним). Ми хочемо знайти лінію $y = \beta_1 + \beta_2 x$, яка найкраще підходить для цих точок. Інакше кажучи, ми хотіли б знайти числа β_1 і β_2, які приблизно розв'язують надвизначену лінійну систему

$$\begin{aligned} \beta_1 + 1\beta_2 &= 6 \\ \beta_1 + 2\beta_2 &= 5 \\ \beta_1 + 3\beta_2 &= 7 \\ \beta_1 + 4\beta_2 &= 10 \end{aligned}$$

чотирьох рівнянь з двома невідомими в деякому *найкращому* сенсі.

Підхід **найменших квадратів** розв'язання цієї проблеми полягає у спробі зробити якомога меншою суму квадратів *похибок* між правою і лівою сторонами цієї системи, тобто необхідно знайти мінімум функції

$$\begin{aligned} S(\beta_1, \beta_2) = &[6 - (\beta_1 + 1\beta_2)]^2 + [5 - (\beta_1 + 2\beta_2)]^2 \\ &+ [7 - (\beta_1 + 3\beta_2)]^2 + [10 - (\beta_1 + 4\beta_2)]^2. \end{aligned}$$

Мінімум визначають через обчислення часткової похідної від $S(\beta_1, \beta_2)$ щодо β_1 і β_2 і прирівнюванням їх до нуля

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \beta_1} &= 0 = 8\beta_1 + 20\beta_2 - 56 \\ \frac{\partial S}{\partial \beta_2} &= 0 = 20\beta_1 + 60\beta_2 - 154. \end{aligned}$$

Це приводить нас до системи з двох рівнянь і двох невідомих, які звуться нормальними рівняннями. Якщо розв'язати, ми отримуємо

$$\begin{aligned} \beta_1 &= 3.5 \\ \beta_2 &= 1.4 \end{aligned}$$

І рівняння $y = 3.5 + 1.4x$ є рівнянням лінії, яка підходить найбільше. Мінімальна сума квадратів похибок є $S(3.5, 1.4) = 1.1^2 + (-1.3)^2 + (-0.7)^2 + 0.9^2 = 4.2.$