МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Метод найменших квадратів (МНК) — це математичний метод, який мінімізувати суму квадратів відхилень певних функцій від шуканих параметрів. Його застосовують для різних цілей, зокрема, для апроксимації експериментальних даних певною функцією. Найбільш просто МНК застосувати для пошуку коефіцієнтів лінійної функції за знайденими експериментально величинами.

Нехай функція, якій повинні бути підпорядковані експериментальні дані має вигляд y = ax + b. Задача полягає у визначенні коефіцієнтів a і b, при яких функція $F(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i - b))^2$ буде мати найменше значення. При

знайдених a і b сума квадратів відхилень експериментальних значень від знайденої прямої буде найменшою, отже така пряма найкращим чином апроксимує експериментальні результати.

Розв'язання поставленого завдання полягає у знаходженні екстремуму функції двох змінних a і b. Для цього треба знайти відповідні похідні, прирівняти їх до нуля і розв'язати одержану систему рівнянь.

В результаті одержимо:

$$a = \frac{n \sum_{i=1}^{n} x_{i} y_{i} - \sum_{i=1}^{n} x_{i} \sum_{i=1}^{n} y_{i}}{n \sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2} - \left(\sum_{i=1}^{n} x_{i}\right)^{2}} b = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_{i} - a \sum_{i=1}^{n} x_{i}}{n}.$$

Найпростіше обчислення виконати, користуючись MS Exel. Для цього треба заповнити комірки таблиці так, як показано нижче

	i = 1	<i>i</i> = 2	$i = \dots$	i = n	$\sum_{i=1}^{n}$
x_{i}					
y_{i}					
$x_i \cdot y_i$					
x_i^2					

В останній стовпчик заноситься результат додавання елементів рядка. Після цього обчислюються параметри a і b.

Для оцінки похибки методу найменших квадратів слід обчислити суму квадратів відхилень експериментальних результатів та прямої, що їх апроксимує:

$$\sigma = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \left(ax_i + b \right) \right)^2.$$

Для визначення коефіцієнтів a і b прямої, що екстраполює експериментальні дані можна скористатися MS Exel. Для цього треба в таблицю ввести дані експерименту так, як показано на рис. а. Далі, на стрічці команд натиснути «ВСТАВИТИ», виділити дані як показано на рис. 1б і натиснути

«Вставити точкову діаграму» (на рис. *в* виділена квадратикам). З випадаючого меню вибрати «Точечная»

0.15 3.42 0.15 3.42 0.175 3.85 0.175 3.85 0.2 4.33 0.2 4.33 0.225 4.95 0.225 4.95 0.25 5.38 0.25 5.38 0.275 6.027 0.275 6.027	0.275 6.027 0.275 6.027 Диаграммы
---	-----------------------------------

Клацнути правою кнопкою миші на будь-якій точці і вибрати «Добавить линию тренда». На вкладинці «Формат лінії тренда» поставити галочки на опції «Показать уравнение на диагамме» та «поместить на диаграмме величину достоверности аппроксимации». В результаті на екрані буде рівняння прямої, яка найкращим чином (за методом найменших квадратів) апрксимує експериментальні дані. Коефіцієнт перед параметром x є тангенсом кута нахилу графіка і його треба застосовувати для розрахунків.