Метод наименьших квадратов (МНК).

Пример.

Экспериментальные данные о значениях переменных *x* и *y* приведены в таблице.

	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$	$i=5$
x_i	0	1	2	4	5
y_i	2,1	2,4	2,6	2,8	3,0

В результате их выравнивания получена функция $g(x)=\sqrt[3]{x+1}+1$

Используя **метод наименьших квадратов** , аппроксимировать эти данные линейной зависимостью *y=ax+b* (найти параметры *a* и *b*). Выяснить, какая из двух линий лучше (в смысле метода наименьших квадратов) выравнивает экспериментальные данные. Сделать чертеж.

Суть метода наименьших квадратов (МНК).

Задача заключается в нахождении коэффициентов линейной зависимости, при которых функция двух переменных *a* и *b* $F(a,b)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))^2$ принимает наименьшее значение. То есть, при данных *a* и *b* сумма квадратов отклонений экспериментальных данных от найденной прямой будет наименьшей. В этом вся суть метода наименьших квадратов.

Таким образом, решение примера сводится к нахождению экстремума функции двух переменных.

Вывод формул для нахождения коэффициентов.

Составляется и решается система из двух уравнений с двумя неизвестными. Находим частные производные функции $F(a,b)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))^2$ по переменным *a* и *b*, приравниваем эти производные к нулю.

$$\begin{cases}\dfrac{\partial F(a,b)}{\partial a}=0\\[2mm] \dfrac{\partial F(a,b)}{\partial b}=0\end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases}-2\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))x_i=0\\ -2\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))=0\end{cases} \Leftrightarrow$$

$$\begin{cases}a\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2+b\sum\limits_{i=1}^{n}x_i=\sum\limits_{i=1}^{n}x_iy_i\\ a\sum\limits_{i=1}^{n}x_i+\sum\limits_{i=1}^{n}b=\sum\limits_{i=1}^{n}y_i\end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases}a\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2+b\sum\limits_{i=1}^{n}x_i=\sum\limits_{i=1}^{n}x_iy_i\\ a\sum\limits_{i=1}^{n}x_i+nb=\sum\limits_{i=1}^{n}y_i\end{cases}$$

Решаем полученную систему уравнений любым методом (например *методом подстановки* или методом Крамера) и получаем формулы для нахождения коэффициентов по методу наименьших квадратов (МНК).

$$\begin{cases} a = \dfrac{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \sum\limits_{i=1}^{n} y_i}{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \\ b = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i}{n} \end{cases}$$

При данных *a* и *b* функция $F(a,b) = \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2$ принимает наименьшее значение. Доказательство этого факта приведено ниже по тексту в конце страницы .

Вот и весь метод наименьших квадратов. Формула для нахождения параметра *a* содержит суммы $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i$, $\sum\limits_{i=1}^{n} y_i$, $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i$, $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2$ и параметр *n* - количество экспериментальных данных. Значения этих сумм рекомендуем вычислять отдельно. Коэффициент *b* находится после вычисления *a*.

Пришло время вспомнить про исходый пример.

Решение.

В нашем примере *n=5* . Заполняем таблицу для удобства вычисления сумм, которые входят в формулы искомых коэффициентов.

	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$	$i=5$	$\sum\limits_{i=1}^{5}$
x_i	0	1	2	4	5	12
y_i	2,1	2,4	2,6	2,8	3	12,9
$x_i y_i$	0	2,4	5,2	11,2	15	33,8
x_i^2	0	1	4	16	25	46

Значения в четвертой строке таблицы получены умножением значений 2-ой строки на значения 3-ей строки для каждого номера *i* .

Значения в пятой строке таблицы получены возведением в квадрат значений 2-ой строки для каждого номера *i* .

Значения последнего столбца таблицы – это суммы значений по строкам.

Используем формулы метода наименьших квадратов для нахождения коэффициентов *a* и *b*. Подставляем в них соответствующие значения из последнего столбца таблицы:

$$\begin{cases} a = \dfrac{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \sum\limits_{i=1}^{n} y_i}{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{\,2} - \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \\ b = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i}{n} \end{cases} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} a = \dfrac{5\cdot 33{,}8 - 12\cdot 12{,}9}{5\cdot 46 - 12^2} \\ b = \dfrac{12{,}9 - a\cdot 12}{5} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a \approx 0{,}165 \\ b \approx 2{,}184 \end{cases}$$

Следовательно, *y = 0.165x+2.184* - искомая аппроксимирующая прямая.

Осталось выяснить какая из линий *y = 0.165x+2.184* или $g(x) = \sqrt[3]{x+1}+1$ лучше аппроксимирует исходные данные, то есть произвести оценку методом наименьших квадратов.

Оценка погрешности метода наименьших квадратов.

Для этого требуется вычислить суммы квадратов отклонений исходных данных от этих линий $\sigma_1 = \sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))^2$ и $\sigma_2 = \sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - g(x_i))^2$, меньшее значение соответствует линии, которая лучше в смысле метода наименьших квадратов аппроксимирует исходные данные.

$$\sigma_1 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))^2 =$$

$$\sum_{i=1}^{5}(y_i - (0.165x_i + 2.184))^2 \approx 0.019$$

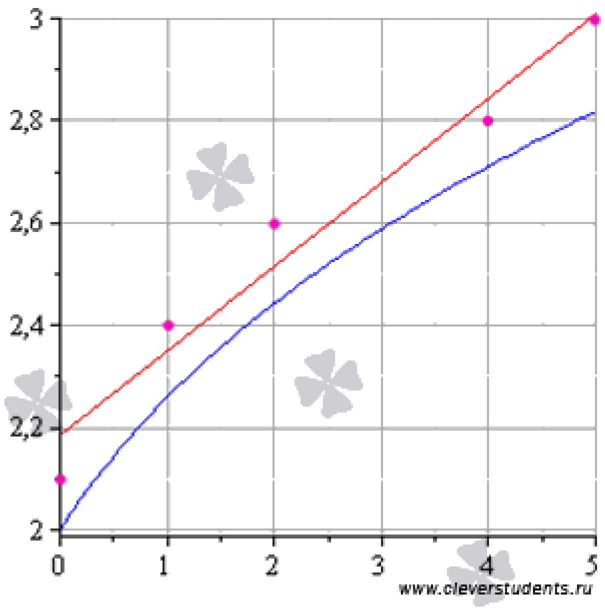
$$\sigma_2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - g(x_i))^2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{5}\left(y_i - \left(\sqrt[3]{x_i+1}+1\right)\right)^2 \approx 0.096$$

Так как $\sigma_1 < \sigma_2$, то прямая *y = 0.165x+2.184* лучше приближает исходные данные.

Графическая иллюстрация метода наименьших квадратов (мнк).

На графиках все прекрасно видно. Красная линия – это найденная прямая *y = 0.165x+2.184*, синяя линия – это $g(x)=\sqrt[3]{x+1}+1$, розовые точки – это исходные данные.



Для чего это нужно, к чему все эти аппроксимации?

Я лично использую для решения задач сглаживания данных, задач интерполяции и экстраполяции (в исходном примере могли бы попросить найти занчение наблюдаемой величины *y* при *x=3* или при *x=6* по методу МНК). Но подробнее поговорим об этом позже в другом разделе сайта.

К началу страницы

Доказательство.

Чтобы при найденных *a* и *b* функция принимала наименьшее значение, необходимо чтобы в этой точке матрица квадратичной формы дифференциала второго порядка для функции $F(a,b)=\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-(ax_i+b)\right)^2$ была положительно определенной. Покажем это.

Дифференциал второго порядка имеет вид:

$$d^2F(a;b)=\frac{\partial^2 F(a;b)}{\partial a^2}d^2a+2\frac{\partial^2 F(a;b)}{\partial a\partial b}dadb+\frac{\partial^2 F(a;b)}{\partial b^2}d^2b$$

$$\frac{\partial^2 F(a;b)}{\partial a^2}=\frac{\partial\left(\frac{\partial F(a;b)}{\partial a}\right)}{\partial a}=$$

$$=\frac{\partial\left(-2\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))x_i\right)}{\partial a}=2\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2$$

$$\frac{\partial^2 F(a;b)}{\partial a\partial b}=\frac{\partial\left(\frac{\partial F(a;b)}{\partial a}\right)}{\partial b}=\frac{\partial\left(-2\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))x_i\right)}{\partial b}=2\sum_{i=1}^{n}x_i$$

$$\frac{\partial^2 F(a;b)}{\partial b^2}=\frac{\partial\left(\frac{\partial F(a;b)}{\partial b}\right)}{\partial b}=$$

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

То есть

$$d^2F(a;b)=\left(2\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2\right)d^2a+2\cdot\left(2\sum_{i=1}^{n}x_i\right)dadb+(2n)d^2b$$

Следовательно, матрица квадратичной формы имеет вид

$$M=\begin{pmatrix}2\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2 & 2\sum_{i=1}^{n}x_i\\ 2\sum_{i=1}^{n}x_i & 2n\end{pmatrix}$$

причем значения элементов не зависят от a и b .

Покажем, что матрица положительно определенная. Для этого нужно, чтобы угловые миноры были положительными.

Угловой минор первого порядка $\left(2\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2\right)>0$. Неравенство строгое, так как точки x_i несовпадающие. В дальнейшем это будем подразумевать.

Угловой минор второго порядка

$$\det(M)=\begin{vmatrix} 2\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2 & 2\sum_{i=1}^{n}x_i \\ 2\sum_{i=1}^{n}x_i & 2n \end{vmatrix}=4\left(n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2\right)$$

Докажем, что $n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2>0$ <u>методом математической индукции</u>.

1. Проверим справедливость неравенства для любого значения *n*, например для*n=2*.

   $$2\sum_{i=1}^{2}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{2}x_i\right)^2=2\left(x_1^{\ 2}+x_2^{\ 2}\right)-(x_1+x_2)^2=$$
   $$=x_1^{\ 2}-2x_1x_2+x_2^{\ 2}=(x_1-x_2)^2>0$$

   Получили верное неравенство для любых несовпадающих значений x_1 и x_2.

2. Предполагаем, что неравенство верное для *n*.

   $n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2>0$ - верное.

3. Докажем, что неравенство верное для *n+1*.

   То есть, нужно доказать, что $(n+1)\sum_{i=1}^{n+1}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n+1}x_i\right)^2>0$ исходя из предположения что $n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2>0$ - верное.

Поехали.

$$(n+1)\sum_{i=1}^{n+1}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n+1}x_i\right)^2=$$

$$=(n+1)\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2+x_{n+1}{}^2\right)-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i+x_{n+1}\right)^2=$$

$$=n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2+n\cdot x_{n+1}{}^2+\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2+x_{n+1}{}^2-$$

$$-\left(\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2+2x_{n+1}\sum_{i=1}^{n}x_i+x_{n+1}{}^2\right)=$$

$$=\left\{n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2\right\}+n\cdot x_{n+1}{}^2-2x_{n+1}\sum_{i=1}^{n}x_i+\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2=$$

$$=\left\{n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2\right\}+\left(x_{n+1}{}^2-2x_{n+1}x_1+x_1{}^2\right)+$$

$$+\left(x_{n+1}{}^2-2x_{n+1}x_2+x_2{}^2\right)+\ldots+\left(x_{n+1}{}^2-2x_{n+1}x_n+x_n{}^2\right)=$$

$$=\left\{n\sum_{i=1}^{n}(x_i)^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2\right\}+$$

$$+(x_{n+1}-x_1)^2+(x_{n+1}-x_2)^2+\ldots+(x_{n+1}-x_n)^2>0$$

Выражение в фигурных скобках положительно по предположению пункта 2), а остальные слагаемые положительны, так как представляют собой квадраты чисел. Этим доказательство завершено.

Вывод : найденные значения *a* и *b* соответствуют наименьшему значению функции $F(a,b)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))^2$, следовательно, являются искомыми параметрами для метода наименьших квадратов.