

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

I. Изучите теоретический материал и пример решения задачи

В различных исследованиях приходится использовать формулы, составленные на основании исследования какого-либо физического, химического, экономического процесса. Одним из лучших способов получения таких формул является *метод наименьших квадратов*. Пусть необходимо установить функциональную зависимость между двумя переменными величинами x и y . Например, между кредитными вложениями банков и их прибылью.

По результатам изучения некоторых данных составим следующую таблицу:

x	x_1	x_2	$\dots$	x_i	$\dots$	x_n
y	y_1	y_2	$\dots$	y_i	$\dots$	y_n

Установим вид функции $y = f(x)$ по характеру расположения на координатной плоскости точек (x_i, y_i) . Предположим, что между x и y существует линейная зависимость, выражающаяся формулой $y = ax + b$.

Так как точки $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ лежат в общем случае не на прямой $y = ax + b$, а лишь вблизи нее, то в формуле $y = ax + b$ при подстановке координат точек (x_i, y_i) знак равенства нужно заменить знаком приближённого равенства: $y_i \approx ax_i + b$. Обозначим разницу между левой и правой частью этого приближённого равенства через δ_i , то есть $\delta_i = y_i - (ax_i + b)$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Назовём эти величины погрешностями.

Поставим задачу подобрать коэффициенты a и b таким образом, чтобы эти погрешности были возможно меньше по абсолютной величине. Для этого составим функцию от переменных a и b , которая выражает сумму квадратов этих погрешностей

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)]^2.$$

Таким образом, задача свелась к нахождению значений a и b , при которых функция $S(a, b)$ имеет минимум.

Найдём частные производные первого порядка этой функции по переменным a и b :

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)] x_i, \quad \frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)].$$

Приравнявая эти частные производные к нулю, получаем линейную систему двух уравнений с двумя неизвестными

$$\begin{cases} -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)] x_i = 0, \\ -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)] = 0. \end{cases}$$

Преобразуем эту систему к более удобному для решения виду.

$$\begin{cases} -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)] x_i = 0, \\ -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (ax_i + b)] = 0; \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n ax_i^2 - \sum_{i=1}^n bx_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n ax_i - \sum_{i=1}^n b = 0; \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ a \sum_{i=1}^n x_i + nb = \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases}$$

Эта система называется *нормальной системой метода наименьших квадратов*. Из неё находим числа a и b , и затем, подставляя их в уравнение $y = ax + b$, получаем уравнение искомой прямой.

Тот факт, что функция $S(a, b)$ в найденной точке $M(a, b)$ имеет минимум, устанавливается с помощью частных производных второго порядка.

$$\text{Имеем } \frac{\partial^2 S}{\partial a^2} = 2 \sum_{i=1}^n x_i^2, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial a \partial b} = 2 \sum_{i=1}^n x_i, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial b^2} = 2n.$$

Тогда $\Delta = \frac{\partial^2 S}{\partial a^2} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial b^2} - \left(\frac{\partial^2 S}{\partial a \partial b} \right)^2 = 4n \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2 \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (x_i - x_j)^2 > 0$. Кроме того

$\frac{\partial^2 S}{\partial a^2} = 2 \sum_{i=1}^n x_i^2 > 0$. Следовательно, функция $S(a, b)$ в точке $M(a, b)$ имеет минимум.

Пример. Пусть в результате эксперимента получены пять значений искомой функции y при пяти значениях аргумента x . Данные занесены в таблицу (столбцы 2 и 3). Значения x заносятся в таблицу в порядке возрастания.

Будем искать зависимость между x и y в виде линейной функции $y = ax + b$. Для составления нормальной системы метода наименьших квадратов заполним таблицу.

n	x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
1	1	5,5	5,5	1
2	3	6,3	18,9	9
3	6	6,7	40,2	36
4	18	9,2	165,6	324
5	20	9,6	192,	400
Сумма	48	37,3	422,2	770

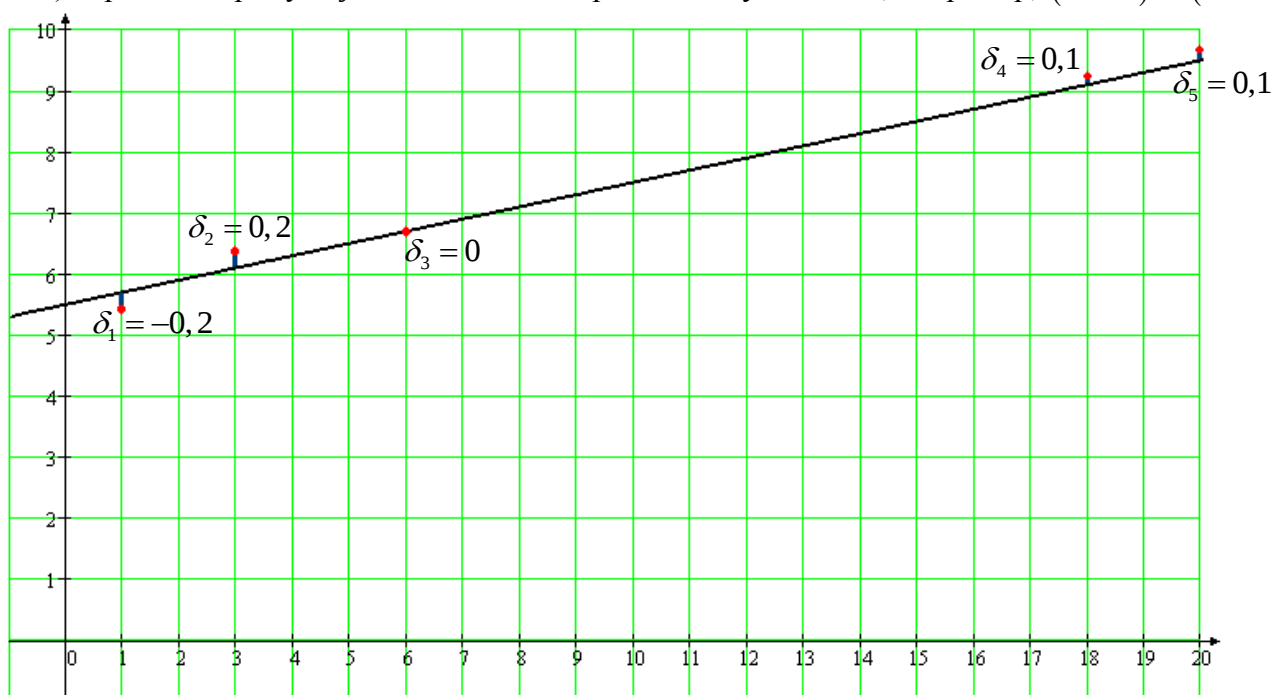
Нормальная система имеет вид $\begin{cases} 770a + 48b = 422,2, \\ 48a + 5b = 37,3. \end{cases}$

Эту систему можно решить, например, по формулам Крамера:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 770 & 48 \\ 48 & 5 \end{vmatrix} = 1546, \quad \Delta_x = \begin{vmatrix} 422,2 & 48 \\ 37,3 & 5 \end{vmatrix} = 320,6, \quad \Delta_y = \begin{vmatrix} 770 & 422,2 \\ 48 & 37,3 \end{vmatrix} = 8455,4.$$

Её решение $a = \frac{\Delta_x}{\Delta} = \frac{320,6}{1546} = 0,21 \approx 0,2$, $b = \frac{\Delta_y}{\Delta} = \frac{8455,4}{1546} = 5,47 \approx 5,5$. Уравнение искомой прямой $y = 0,2x + 5,5$.

На чертеже в системе координат изобразим все точки (x_i, y_i) (показаны красным цветом), построим прямую $y = 0,2x + 5,5$ и покажем погрешности δ_i в виде вертикальных отрезков (показаны синим цветом). При этом прямую $y = 0,2x + 5,5$ построим по двум точкам, например, $(0; 5,5)$ и $(20; 9,5)$.



II. Решите задачу своего варианта по предложенному плану и сдайте преподавателю на проверку

План решения задачи

1. Заполните таблицу, приведённую в примере.
2. Составьте нормальную систему метода наименьших квадратов и решите её. Промежуточные вычисления производите с двумя знаками после запятой. В результате значения a и b округлите до одного знака. Запишите уравнение искомой прямой $y = ax + b$.
3. Изобразите на листочке в клетку в одной системе координат прямую $y = ax + b$ и все точки с координатами (x_i, y_i) . Единица масштаба должна соответствовать двум клеткам.
4. Покажите на чертеже погрешности δ_i .

ВАРИАНТЫ

Вариант 1					
x	1	3	6	13	20
y	-2,1	-1,1	-1,2	0,2	2,1

Вариант 3					
x	1	12	16	18	20
y	-2,1	0,7	1	1,6	2,2

Вариант 5					
x	8	9	11	16	20
y	-0,2	0,1	0,6	1	2,2

Вариант 7					
x	1	3	6	13	20
y	1,3	3,3	5,8	10,3	16,7

Вариант 9					
x	1	5	9	12	18
y	1,3	5,2	7,9	10,3	15,2

Вариант 11					
x	1	8	9	16	18
y	1,3	-6,8	-8,3	-17	-19,2

Вариант 13					
x	1	3	6	12	19
y	1,3	-0,7	-4,3	-11,8	-20,1

Вариант 15					
x	1	4	9	16	18
y	1,3	-2,7	-8,3	-17	-19,2

Вариант 17					
x	2	6	9	11	16
y	7,6	3,9	1,5	-0,6	-4,9

Вариант 19					
x	1	3	6	13	20
y	8,5	6,6	3,9	-2,2	-8

Вариант 21					
------------	--	--	--	--	--

Вариант 2					
x	3	10	15	16	19
y	-1,1	0	1,2	1	1,6

Вариант 4					
x	2	8	9	15	18
y	-1,6	-0,2	0,1	1,2	1,6

Вариант 6					
x	4	8	9	16	19
y	4,4	7,9	8,9	14,7	16,7

Вариант 8					
x	3	10	15	18	19
y	2,7	7,9	11,9	14,7	15,2

Вариант 10					
x	5	6	16	17	20
y	5,2	5,8	13,3	14,7	16,7

Вариант 12					
x	4	8	9	16	19
y	-2,7	-6,8	-8,3	-17	-20,1

Вариант 14					
x	3	10	15	16	19
y	-0,7	-9,4	-15,2	-17	-20,1

Вариант 16					
x	5	9	11	13	18
y	4,5	1,5	-0,6	-2,2	-7,3

Вариант 18					
x	4	8	9	16	19
y	6	1,9	1,5	-4,9	-8

Вариант 20					
x	3	10	13	14	19
y	6,6	0,2	-2,2	-3,3	-8

Вариант 22					
------------	--	--	--	--	--

x	1	5	8	11	16
y	1,1	3,3	3,8	5	7,5

Вариант 23					
x	8	9	11	16	20
y	3,8	4,4	5	7,5	8,8

Вариант 25					
x	2	8	9	15	20
y	1,7	3,8	4,4	7,1	8,8

x	5	9	10	16	19
y	3,3	4,4	5,1	7,5	8,6

Вариант 24					
x	4	9	10	15	18
y	2,9	4,4	5,1	7,1	8,2