Ю.В. Горошко
Чернігівський педагогічний
університет імені Т.Г.Шевченка

Метод найменших квадратів та його реалізація засобами НІТ

Важливою в експериментальних дослідженнях є проблема представлення експериментальних даних аналітичною формулою, тобто набір точок (x_i, y_i), $i=\overline{1,m}$, потрібно представити у вигляді виразу $y=f(x)$.

У багатьох випадках важливо знайти $f(x)$ як поліном, тобто

$$y=a_0+a_1x+a_2x^2+...+a_nx^n.$$

При $n \geq m$(кількості експериментальних точок) можливо підібрати коефіцієнти так, щоб полігон проходив через всі експериментальні точки. Вирази для таких поліномів можна отримати, використовуючи формули Лагранжа або Ньютона, причому степінь таких поліномів дорівнює кількості експериментальних точок. Проте досить часто потрібно отримати поліном цілком певного степеня або аналітичну функцію іншого виду. З іншого боку, теоретична крива не обов'язково повинна точно проходити через всі експериментальні точки, оскільки вони отримані, як правило, з певною похибкою.

Виникає задача: знайти функцію $y=f(x)$ певного, наперед заданого виду і таку, що проходить якомога близько до експериментальних точок (x_i, y_i), $i=\overline{1,m}$. Метод найменших квадратів полягає у такому підборі аналітичного вигляду функції, щоб різниця квадратів абсцис експериментальних точок та відповідних значень функції була мінімальною, тобто:

$$\sum_{i=1}^{m}(f(x_i)-y_i)^2=S\to\min. \qquad (1)$$

Зауважимо, що метод найменших квадратів розроблено Гауссом у сімнадцятирічному віці.

Дані експерименту доцільно представити графічно, особливо в тих випадках, коли вид функціональної залежності наперед не відомий.

Виходячи з виду графіка або з деяких теоретичних міркувань, вибирають емпіричну залежність, наприклад $y=a_1x+a_2$ або $y=a_1e^{a_2x}+a_3$, для якої і потрібно за методом найменших квадратів визначити значення коефіцієнтів a_1, a_2, a_3. Вважається також, що виміри значень функції зроблені незалежно один від одного і похибки вимірювань підкоряються нормальному закону розподілу Гаусса.

Нехай шукана функція залежить від *n* параметрів: $y=f(x,a_1,a_2,...,a_n)$. Тоді формула (1) набуде вигляду

$$\sum_{i=1}^{m}(f(x_i,a_1,...,a_n)-y_i)^2=S\to\min. \qquad (2)$$

В основі принципу найменших квадратів лежить твердження, що витікає з розподілу похибок за законом Гаусса, згідно з яким найбільш ймовірним значенням, отриманим з ряду вимірів однакової точності, є таке, для якого сума квадратів різниць цього значення і результатів вимірів є найменшою. З цього випливає, що відшукання параметрів $a_1, a_2,..., a_n$ на основі методу найменших квадратів зводиться до розв'язання системи рівнянь, отриманих з (2) при дослідженні величини *S* на екстремум:

$$\frac{\partial S}{\partial a_1}=0, \frac{\partial S}{\partial a_2}=0,..., \frac{\partial S}{\partial a_n}=0.$$

Нехай нам потрібно отримати аналітичну функцію у лінійному вигляді, тобто $y=a_1+a_2x$, при цьому

$$S=\sum_{i=1}^{m}(a_1+a_2x_i-y_i)^2=(a_1+a_2x_1-y_1)^2+(a_1+a_2x_2-y_2)^2+...+$$
$$+(a_1+a_2x_m-y_m)^2.$$

Отримаємо систему рівнянь:

$$\frac{\partial S}{\partial a_1}=2(a_1+a_2x_1-y_1)+...+2(a_1+a_2x_m-y_m)=0,$$
$$\frac{\partial S}{\partial a_2}=2x_1(a_1+a_2x_1-y_1)+...+2x_m(a_1+a_2x_m-y_m)=0.$$

Розділимо обидва рівняння на 2 і зведемо подібні доданки, отримаємо:

$$ma_1+(\sum_{i=1}^{m}x_i)a_2=\sum_{i=1}^{m}y_i,$$

$$(\sum_{i=1}^{m} x_i)a_1 + (\sum_{i=1}^{m} x_i^2)a_2 = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \;. \qquad (3)$$

Знайденими формулами можна скористатися при розв'язуванні конкретної задачі.

Задача 1.[3] В "Основах химии" Д.І.Менделєєва наводяться дані про розчинність азотнокислого натрію $NaNO_3$ в залежності від температури води. В 100 частинах води розчинюється наступна кількість умовних частин $NaNO_3$ при відповідних температурах:

Т-ра	0^0	4^0	10^0	15^0	21^0	29^0	36^0	51^0	68^0
К-ть умов. одиниць	66,7	71,0	76,3	80,6	85,7	92,9	99,4	113,6	125,1

Теоретичні міркування дозволяють думати, що кількісна сторона цього явища достатньо точно описується лінійною залежністю $y = a_1 + a_2 x$. Необхідно за методом найменших квадратів визначити коефіцієнти a_1 і a_2 даної лінійної емпіричної функції. Для розв'язування скористаємося ситемою рівнянь (3):

$$\sum_{i=1}^{9} x_i = 234, \;\; \sum_{i=1}^{9} y_i = 811{,}3, \;\; \sum_{i=1}^{9} x_i^2 = 10144, \;\; \sum_{i=1}^{9} x_i y_i = 24695{,}3\,.$$

Розв’язавши систему, отримаємо:

$$y = 67{,}5 + 0{,}87x$$

що і було доведено Мендєлєєвим у 1881 р.

Як добре видно з наведеної вище задачі, визначення за методом найменших квадратів навіть такої простої емпіричної функції, як лінійна, вимагає значної кількості обчислень, тому при розв'язанні таких задач доцільно застосовувати програмні засоби. Ми пропонуємо скористатися ППЗ Granl, який широко використовується при вивченні математики у школах і вищих навчальних закладах України. Ця програма дозволяє наближати (апроксимувати) за методом найменших квадратів таблиці експериментальних даних поліномами до сьомого степеня включно.

Для побудови апроксимуючого поліному потрібно у вікні **"Список об'єктів"** встановити тип майбутнього об'єкту **"Таблична: Xi, Y(Xi)"** і скористатися командою **"Об'єкт/Створити..."**. На екрані з'явиться діалогове вікно, в якому потрібно ввести таблицю експериментальних даних та степінь полінома. На рис.1 зображено заповнене даними розглянутої вище задачі діалогове вікно.

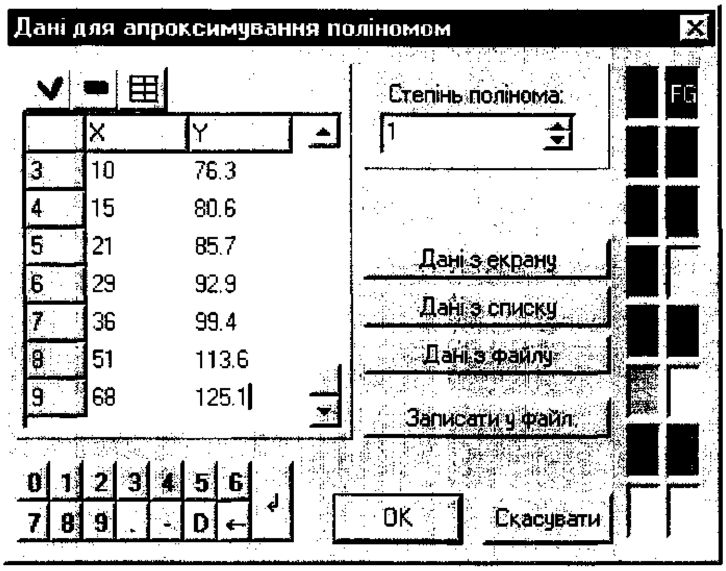

Рис. 1.

Після натиснення кнопки "ОК" визначається поліном, який записується до списку об'єктів (рис.2).

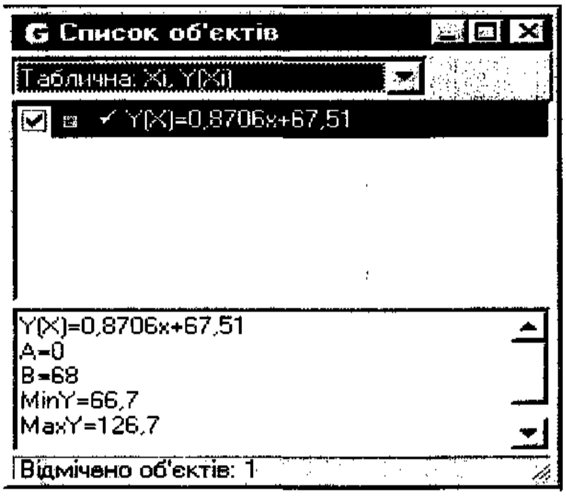

Рис.2.

Якщо скористатися командою **"Графік/Побудувати"**, то отримаємо графік апроксимуючого поліному з указаниям точок таблиці (рис.3):

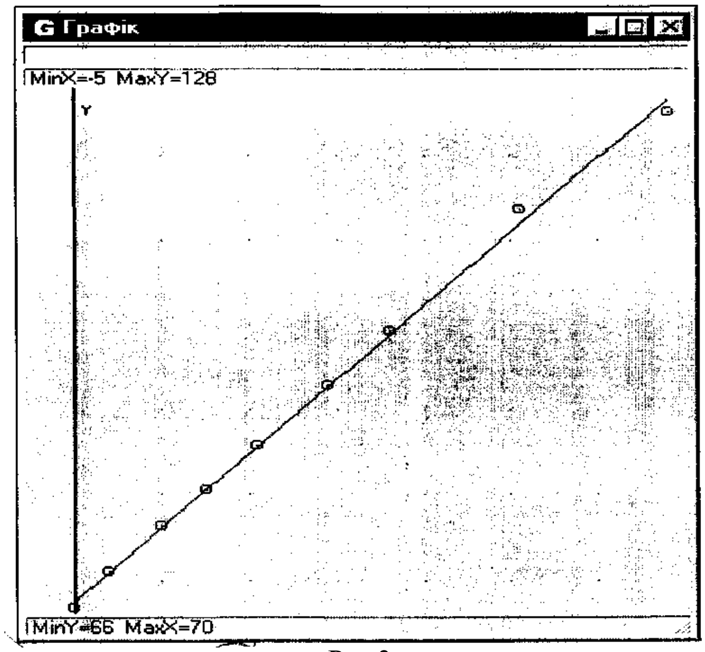

Рис.3

Крім введення даних з клавіатури, програма Granl дозволяє інші способи створення таблиці даних, а саме:

1. Завантажити з текстового файлу (числа в файлі повинні розділятися пропусками або починатися з нового рядка), натиснувши кнопку **«Дані з файлу».**
2. Перенести зі списку точок на графіку (якщо такий список був сформований раніше) за допомогою кнопки **«Дані з списку».**
3. За допомогою кнопки **«Дані з екрану»** перейти до вікна **«Графік»,** визначити точки, клацаючи мишкою (або натискаючи клавіші «Пропуск» чи «Enter» на клавіатурі) у необхідних місцях і, натиснувши кнопку "ОК", повернутися до діалогової панелі.

Легкість визначення апроксимуючого поліному дозволяє експериментувати, змінюючи його степінь та спостерігаючи, як проходить його графік у кожному випадку.

Можливості програми Granl по визначенню поліномів за методом найменших квадратів дозволяють запропонувати альтернативний спосіб розв'язування класичної шкільної задачі про знаходження параболи, що проходить через три задані точки (x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3). Як відомо, коефіцієнти параболи a, b, c можна визначити, розв'язавши систему рівнянь

$$(x_1)^2 a + x_1 b + c = y_1,$$

$$(x_2)^2 a + x_2 b + c = y_2,$$

$$(x_3)^2 a + x_3 b + c = y_3.$$

Якщо таку задачу вчитель пропонує для формування навичок розв'язування системи лінійних рівнянь, програму можна використати для перевірки отриманого розв'язку.

Якщо виникає потреба апроксимувати не поліномом, а деякими іншими класами функцій, можна скористатися певними перетвореннями, як у задачі, наведеній нижче.

Задача 2. Дана експериментальна таблиця

x_i	0,1	0,2	0,3	0,4
y_i	2,5	5,1	9,8	20,0

Потрібно визначити вид емпіричної функції, та її параметри.

Для визначення виду емпіричної функції можна скористатися правилом, яке говорить про те, що якщо значення аргументу формують точно або майже точно арифметичну прогресію, а відповідні значення функції формують майже геометричну прогресію, то шукану залежність між аргументом і функцією потрібно шукати у вигляді

$$y = a^{bx+c},\ a > 0.$$

Зручно за основу брати число *e*.

Дані задачі підлягають сформованому вище правилу, тому будемо шукати функцію у виді $y = e^{bx+c}$. Проте програма Granl знаходить апроксимуючі функції тільки у вигляді поліномів, тому прологарифмуємо вираз шуканої функції і отримаємо $\ln(y) = bx + c$. Введемо таблицю даних, записуючи $\ln(y_i)$ замість y_i, тобто таблицю

x_i	0,1	0,2	0,3	0,4
$ln(y_i)$	0,92	1,63	2,28	3,00

і встановимо степінь апроксимуючого поліному 1. Отримаємо $y = 6{,}89x + 0{,}235$. Таким чином, шуканою є функція $y = e^{6{,}89x+0{,}235}$.

Щоб впевнитися, що .знайдена функція вдало апроксимує експериментальні дані, робимо наступні операції:

1. Вводимо таблицю експериментальних значень; оскільки апроксимуючий поліном зараз нас не цікавить, можна вказати його степінь 0.
2. Вводимо функцію y=exp(6.89*x+0.235) на проміжку [0; 0.4].
3. Будуємо графік цієї функції (рис.4).

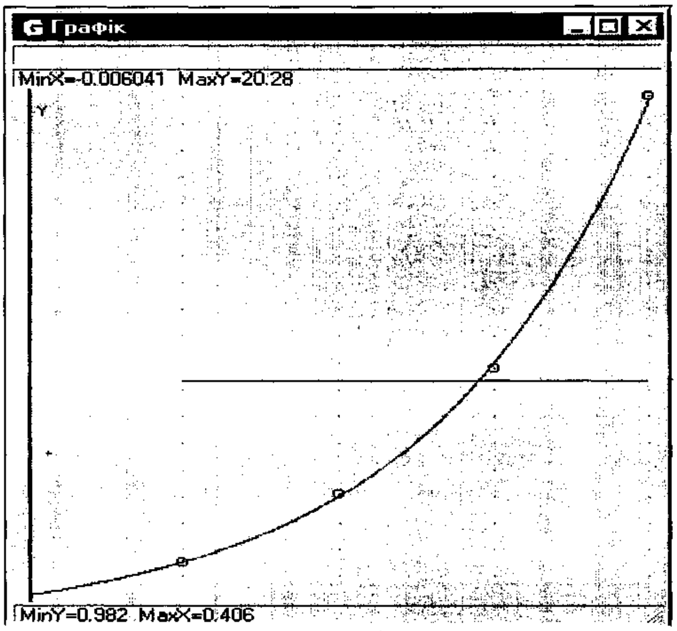

Рис.4

ЛІТЕРАТУРА

1. Дринфельд Г.И. Интерполирование и способ наименьших квадратов.– К.: Вища школа.–1984.– 103 с.
2. Калоша В.К., Лобко С.И., Чикова Т.С. Математическая обработка результатов эксперимента.– Мн.: Выш. школа.–1982.–103 с.
3. Линник Ю.В.Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической обработки наблюдений.-Л.: Физматгиз.–1962.– 352 с.
4. I.S.Sokolnikoff, R.M.Redheffer Mathematics of phisics and modern engineering.– McGraw-Hill, Inc.–1966.– 752 с.