Vähimruutude meetod

Vähimruutude meetod ehk ruutkeskmine lähendamine on interpoleerimismeetodi üldistus, kus me ei nõua lähendpolünoomi ja esialgsete andmesõlmede kokkulangevust.

Vähimruutude meetodit kasutatakse sagedamini siis, kui meil on tegu mittetäpsete andmetega, nt katsetulemustega. Vähimruutude meetod võimaldab meil ka väga suure arvu sõlmede korral kasutada madala astme lähendpolünoomi (interpoleerimismeetodi korral m+1 sõlme korral saame üldiselt m-astme polünoomi). See madalama astme polünoom võib aga peegeldada paremini meie andmete sõltuvust ja siluda mõõte- ja katsevead. Vähimruutude meetodil saadud lähend on seda täpsem, mida rohkem sõlmi me kasutame.

Vähimruutude meetodi tingimuseks on, et

$$S = \sum_{i=0}^{m} \left[f(x_i) - Q_n(x_i) \right]^2$$

oleks minimaalne, kus $f(x)$ - $Q_n(x)$ nimetakse antud lähendpolünoomi $Q_n(x)$ hälbeks punktis x. See tähendab, et sõlmede kauguste ruutude summa lähendpolünoomist on minimaalne.

Vähimruutude meetod lineaarsel juhul

Vähimruutude meetodi lineaarse juhu korral leitakse sirge $y = ax + b$, mis kõige paremini lähendab meie punktide kogumit.

Olgu meil antud andmesõlmed (x_1, y_1), (x_2, y_2), …, (x_n, y_n) ja me otsime lähendsirget $y = ax + b$. Siis vähimruutude meetod võtab kuju

$$S = [y_1 - (ax_1 + b)]^2 + [y_2 - (ax_2 + b)]^2 + \ldots + [y_n - (ax_n + b)]^2 = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (ax_i + b)]^2$$

Miinimumi tingimuse kohaselt peavad osatuletised S-ist muutujate a ja b järgi olema võrdsed nulliga:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{n} [y_i - (ax_i + b)]^2}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} 2[y_i - (ax_i + b)](-x_i) = 0 \quad ,$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{n} [y_i - (ax_i + b)]^2}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} 2[y_i - (ax_i + b)](-1) = 0 \quad .$$

Saame võrrandisüsteemi

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

$$\begin{cases} -\sum_{i=1}^{n} y_i x_i + \sum_{i=1}^{n} a x_i^2 + \sum_{i=1}^{n} b x_i = 0 \\ -\sum_{i=1}^{n} y_i + \sum_{i=1}^{n} a x_i + \sum_{i=1}^{n} b = 0 \end{cases} \quad .$$

Teades, et $\sum_{i=1}^{n} x_i = n\bar{x}$ ja $\sum_{i=1}^{n} y_i = n\bar{y}$, saame võrrandite süsteemi esimese võrrandi avaldada järgmiselt:

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - bn\bar{x} \ ,$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \left(n\overline{y} - an\overline{x}\right)\overline{x} \ ,$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - an\overline{x}^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y} \ ,$$

$$a(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y} \ ,$$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2} \ .$$

Teise võrrandi saame avaldada järgnevalt:

$$an\overline{x} + bn = n\overline{y} \quad \Big|:n \ ,$$

$$a\overline{x} + b = \overline{y} \ ,$$

$$b = \overline{y} - a\overline{x} \, ,$$

$$b = \overline{y} - \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2}\overline{x} = \frac{\overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2\overline{y} - \overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i + n\overline{x}^2\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2} = \frac{\overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2}$$

.

Saime süsteemi kujul

$$\begin{cases} a = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2} \\ b = \dfrac{\overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2} \end{cases}$$

Seega on otsitav sirge $y = ax + b$ kujul

$$y = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2} x + \frac{\overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2} \ .$$

Juhul kui vähimruutude meetodil leitakse kõrgemat järku lähendpolünoom, siis leitakse polünoomi kordajad põhimõtteliselt sarnaselt, ainult et võrrandisüsteemi järk on suurem ja arvutus- ning teisendustööd on suuremahulisemad. Ja seepärast kasutatakse juhul, kui on tarvis leida vähimruutude meetodil kõrgemat järku lähendpolünoome, arvutiprogrammide abi (nt Mathematica, Microsoft Office Excel).