1 Προσέγγιση παραγώγων

Η παράγωγος σε σημείο $\bar{x}$, τάξης m, της $f(x)$, για την οποία γνωρίζουμε ότι περνά από τα (x_i, y_i) με $i = 0, \ldots, n-1$ και $n > m$, είναι

$$f^{(m)}(\bar{x}) \approx \sum_{i=0}^{n-1} w_i\, f(x_i) \ .$$

Τα w_i είναι λύσεις του γραμμικού συστήματος

$$\begin{bmatrix} (1)^{(m)} \\ (\bar{x})^{(m)} \\ (\bar{x}^2)^{(m)} \\ \vdots \\ (\bar{x}^{n-1})^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 & \cdots & x_{n-1} \\ x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_{n-1}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^{n-1} & x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \cdots & x_{n-1}^{n-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{n-1} \end{bmatrix} \ .$$

2 Μέθοδος ελάχιστων τετραγώνων

Προσέγγιση στα σημεία $x_i, y_i)$ με $i = 1, \ldots, n$ με ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των διαφορών.

2.1 Ευθεία ελάχιστων τετραγώνων

Αν η προσέγγιση είναι γραμμική, $g(x) = \alpha x + \beta$, έχουμε

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2} = \frac{\overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^{\,2}} \ , \\ \beta &= \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2} = \overline{y} - \alpha \overline{x} \ , \end{aligned}$$

όπου

$$\overline{w} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} w_i \ ,$$

η μέση τιμή ενός μεγέθους w.

Ο συντελεστής συσχέτισης, r^2 είναι

$$r^2 \equiv \frac{\left(n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i \right)^2}{\left(n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2 \right) \left(n \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i \right)^2 \right)} = \alpha^2 \frac{\overline{x^2} - \overline{x}^{\,2}}{\overline{y^2} - \overline{y}^{\,2}} \ .$$

Ισχύει πάντα ότι $0 \leq r^2 \leq 1$. Το $r^2 = 1$ υποδηλώνει τέλεια προσαρμογή (η ευθεία περνά από όλα τα σημεία), ενώ η τιμή γίνεται τόσο μικρότερη από 1 όσο πιο διασκορπισμένα είναι τα σημεία γύρω από την ευθεία.

2.2 Πολυώνυμο ελάχιστων τετραγώνων

Αν

$$p(x) = \sum_{i=0}^{m} \alpha_i x^i$$

Τα α_i είναι οι λύσεις γραμμικού συστήματος με συντελεστές

$$A_{kj} = \sum_{i=1}^{n} x_i^{k+j} \qquad \text{με } k = 0, 1, \ldots, m\ , \quad j = 0, 1, \ldots, m$$

και σταθερούς όρους τα

$$b_k = \sum_{i=1}^{n} x_i^k y_i\ .$$

2.3 Καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων $h(y) = \alpha g(x) + \beta$

Αν η καμπύλη είναι της μορφής $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ θέτουμε $\tilde{x}_i = g(x_i)$ και $\tilde{y}_i = h(y_i)$ και εφαρμόζουμε για αυτά τους τύπους για ευθεία ελάχιστων τετραγώνων.