

# Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση

Σταμάτης Σταματιάδης  
[stamatis@materials.uoc.gr](mailto:stamatis@materials.uoc.gr)

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών,  
Πανεπιστήμιο Κρήτης

# ΟΓΔΟΗ ΔΙΑΛΕΞΗ

# Προσέγγιση παραγώγων

Εισαγωγή (1/2)

## Μαθηματικό Πρόβλημα

Για μια άγνωστη συνάρτηση  $f(x)$  ξέρουμε τις τιμές της,  $\dots, f_{-1}, f_0, f_1, \dots$ , στα σημεία  $\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots$ . Τα σημεία  $x_i$  έχουν αύξουσα σειρά. Επιθυμούμε να υπολογίσουμε παράγωγο κάποιας τάξης της  $f(x)$  σε σημείο  $\bar{x}$  στο διάστημα στο οποίο γνωρίζουμε την  $f(x)$ .

# Προσέγγιση παραγώγων

Εισαγωγή (1/2)

## Μαθηματικό Πρόβλημα

Για μια άγνωστη συνάρτηση  $f(x)$  ξέρουμε τις τιμές της,  $\dots, f_{-1}, f_0, f_1, \dots$ , στα σημεία  $\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots$ . Τα σημεία  $x_i$  έχουν αύξουσα σειρά. Επιθυμούμε να υπολογίσουμε παράγωγο κάποιας τάξης της  $f(x)$  σε σημείο  $\bar{x}$  στο διάστημα στο οποίο γνωρίζουμε την  $f(x)$ .

## Λύση

Προσεγγίζουμε τη συνάρτηση  $f(x)$  με άλλη συνάρτηση (π.χ. πολυώνυμο, λόγο πολυωνύμων, τμηματική συνάρτηση με ευθύγραμμα τμήματα ή πολυώνυμο όχι ελάχιστου βαθμού (spline) κλπ.). Κατόπιν, παραγωγίζουμε τη νέα συνάρτηση.

# Προσέγγιση παραγώγων

Εισαγωγή (2/2)

## Παράδειγμα

Το πολυώνυμο παρεμβολής με τον τύπο Lagrange είναι

$$p(x) = \sum_i f_i \ell_i(x) ,$$

όπου

$$\ell_i(x) = \prod_{j, j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} ,$$

και το άθροισμα και το γινόμενο είναι πάνω σε όλα τα σημεία.  
Επομένως, π.χ. η δεύτερη παράγωγος της  $f(x)$  στο  $\bar{x}$  είναι

$$f''(\bar{x}) \approx p''(\bar{x}) = \sum_i f_i \ell_i''(\bar{x}) .$$

**Πολλές πράξεις!**

Μπορώ να βρω αλλιώς (πιο γρήγορα) τους αριθμούς  $\ell_i''(\bar{x})$ ;

## Τύποι που παράγονται από τον ορισμό (1/3)

### Ορισμός πρώτης παραγώγου

$$f'(\bar{x}) = \lim_{x \rightarrow \bar{x}} \frac{f(x) - f(\bar{x})}{x - \bar{x}} .$$

### Εφαρμογή

Αν ξέρουμε ότι η  $f$  περνά από τα σημεία  $(x_i, f_i)$  με  $i = \dots, -1, 0, 1, \dots$  τότε η παράγωγος στο  $x_0$  είναι προσεγγιστικά

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} ,$$
$$f'(x_0) \approx \frac{f_{-1} - f_0}{x_{-1} - x_0} .$$

# Τύποι που παράγονται από τον ορισμό (2/3)

## Σφάλματα

### Ανάπτυγμα Taylor

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \dots$$

### Εφαρμογή

$$\begin{aligned} f(x_1) &= f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x_1 - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x_1 - x_0)^3 \dots \Rightarrow \\ f'(x_0) &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} - \frac{x_1 - x_0}{2!}f''(x_0) - \frac{(x_1 - x_0)^2}{3!}f'''(x_0) - \dots \end{aligned}$$

Άρα

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} + \mathcal{O}(x_1 - x_0),$$

και αντίστοιχα

$$f'(x_0) = \frac{f_{-1} - f_0}{x_{-1} - x_0} + \mathcal{O}(x_{-1} - x_0).$$

## Τύποι που παράγονται από τον ορισμό (3/3)

Έστω ότι  $x_{-1}, x_0, x_1$  ισαπέχουν, δηλαδή έστω ότι  $x_0 - x_{-1} = x_1 - x_0 = h$ . Τα αναπτύγματα Taylor της  $f$  στα  $x_1, x_{-1}$  δίνουν για την  $f'(x_0)$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!}f''(x_0) - \frac{h^2}{3!}f'''(x_0) - \dots,$$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h} + \frac{h}{2!}f''(x_0) - \frac{h^2}{3!}f'''(x_0) - \dots.$$

Το ημίαθροισμά τους δίνει

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} - \frac{h^2}{3!}f'''(x_0) - \dots = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2).$$

Το σφάλμα είναι ανάλογο του  $h^2$  παρόλο που χρησιμοποιούμε πάλι μόνο δύο τιμές της  $f$ .



## Τύποι που παράγονται από τον ορισμό (3/3)

Έστω ότι  $x_{-1}$ ,  $x_0$ ,  $x_1$  ισαπέχουν, δηλαδή έστω ότι  $x_0 - x_{-1} = x_1 - x_0 = h$ . Τα αναπτύγματα Taylor της  $f$  στα  $x_1$ ,  $x_{-1}$  δίνουν για την  $f'(x_0)$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!}f''(x_0) - \frac{h^2}{3!}f'''(x_0) - \dots,$$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h} + \frac{h}{2!}f''(x_0) - \frac{h^2}{3!}f'''(x_0) - \dots.$$

Το ημίαθροισμά τους δίνει

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} - \frac{h^2}{3!}f'''(x_0) - \dots = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2).$$

Το σφάλμα είναι ανάλογο του  $h^2$  παρόλο που χρησιμοποιούμε πάλι μόνο δύο τιμές της  $f$ .

### Παρατήρηση

*Ο υπολογισμός της παραγώγου με τιμές σε σημεία που περικλείουν το σημείο υπολογισμού της είναι πιο ακριβής από τον υπολογισμό με τύπο που έχει το σημείο υπολογισμού σε άκρο του.*

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

## Εισαγωγή

Η παράγωγος της  $f(x)$  οποιασδήποτε τάξης  $m$  (ακόμα και μηδενικής), σε κάποιο σημείο  $\bar{x}$  στο πεδίο ορισμού της συνάρτησης, μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός γνωστών τιμών της συνάρτησης σε σημεία  $x_i$ , με  $i = 0, \dots, n - 1$  και  $n > m$ :

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

Οι άγνωστοι συντελεστές  $w_i$  εξαρτώνται από το  $\bar{x}$  και τα  $x_i$ .

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

Μέθοδος A' (1/3)

Προσεγγίζουμε με το ανάπτυγμα Taylor τις τιμές των  $f(x_i)$  για  $i = 0, \dots, n - 1$  στο  $\bar{x}$ :

$$f(x_i) = f(\bar{x}) + (x_i - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{2!}f''(\bar{x}) + \frac{(x_i - \bar{x})^3}{3!}f'''(\bar{x}) + \dots$$

Τότε

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(x_i) &= w_0 \left( f(\bar{x}) + (x_0 - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2!}f''(\bar{x}) + \dots \right) \\ &+ w_1 \left( f(\bar{x}) + (x_1 - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{(x_1 - \bar{x})^2}{2!}f''(\bar{x}) + \dots \right) \\ &+ \dots \\ &+ w_{n-1} \left( f(\bar{x}) + (x_{n-1} - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{(x_{n-1} - \bar{x})^2}{2!}f''(\bar{x}) + \dots \right) \\ &= f(\bar{x})(w_0 + w_1 + \dots + w_{n-1}) \\ &+ f'(\bar{x})(w_0(x_0 - \bar{x}) + w_1(x_1 - \bar{x}) + \dots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x})) \\ &+ \frac{f''(\bar{x})}{2!} (w_0(x_0 - \bar{x})^2 + w_1(x_1 - \bar{x})^2 + \dots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x})^2) + \dots \end{aligned}$$

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

Μέθοδος A' (2/3)

Βρήκαμε ότι

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(x_i) &= f(\bar{x})(w_0 + w_1 + \cdots + w_{n-1}) \\ &+ f'(\bar{x})(w_0(x_0 - \bar{x}) + w_1(x_1 - \bar{x}) + \cdots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x})) \\ &+ \frac{f''(\bar{x})}{2!} (w_0(x_0 - \bar{x})^2 + w_1(x_1 - \bar{x})^2 + \cdots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x})^2) + \cdots \end{aligned}$$

Απαιτούμε να ισχύει ακριβώς

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

Εξισώνουμε τους συντελεστές των παραγώγων στα δύο μέλη και ...

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

Μέθοδος A' (3/3)

...καταλήγουμε στο σύστημα

$$\begin{aligned}w_0 + w_1 + \cdots + w_{n-1} &= 0 \\w_0(x_0 - \bar{x}) + w_1(x_1 - \bar{x}) + \cdots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x}) &= 0 \\&\vdots \\w_0(x_0 - \bar{x})^m + w_1(x_1 - \bar{x})^m + \cdots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x})^m &= m! \\&\vdots \\w_0(x_0 - \bar{x})^{n-1} + w_1(x_1 - \bar{x})^{n-1} + \cdots + w_{n-1}(x_{n-1} - \bar{x})^{n-1} &= 0.\end{aligned}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις αποτελούν ένα γραμμικό σύστημα για τους άγνωστους συντελεστές  $w_i$ , με στοιχεία του πίνακα συντελεστών τα  $A_{ij} = (x_j - \bar{x})^i$ , με  $i, j = 0, 1, \dots, n-1$ , και σταθερούς όρους το διάνυσμα  $b_i = m! \delta_{im}$  (με όλα τα στοιχεία δηλαδή 0 εκτός από το  $b_m$  που είναι  $m!$ ).

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

Μέθοδος B'

Απαιτούμε η σχέση

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

να είναι ακριβής όταν η  $f(x)$  είναι διαδοχικά οι συναρτήσεις  $g_0(x) = 1$ ,  $g_1(x) = x$ ,  $g_2(x) = x^2$ , ...,  $g_{n-1}(x) = x^{n-1}$ . Παράγεται έτσι ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων με άγνωστους τους συντελεστές  $w_i$ , το οποίο έχει μοναδική λύση:

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

Υπάρχει γρήγορος αλγόριθμος (Fornberg) για τη λύση του.

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

Παράδειγμα (1/2)

Πρώτη παράγωγος της  $f$  στο  $\bar{x}$  από τις τιμές στα σημεία  $x_0 - h, x_0, x_0 + h$ :

$$f'(\bar{x}) \approx af(x_0 - h) + bf(x_0) + cf(x_0 + h) .$$

Όταν η  $f(x)$  είναι διαδοχικά  $1, x, x^2$  έχουμε

$$f(x) = 1 \quad \Rightarrow \quad 0 = a + b + c ,$$

$$f(x) = x \quad \Rightarrow \quad 1 = a(x_0 - h) + bx_0 + c(x_0 + h) ,$$

$$f(x) = x^2 \quad \Rightarrow \quad 2\bar{x} = a(x_0 - h)^2 + bx_0^2 + c(x_0 + h)^2 .$$

Η λύση του γραμμικού συστήματος δίνει

$$a = -\frac{1}{2h} + \frac{\bar{x} - x_0}{h^2} ,$$

$$b = -2\frac{\bar{x} - x_0}{h^2} ,$$

$$c = \frac{1}{2h} + \frac{\bar{x} - x_0}{h^2} .$$

# Συστηματική παραγωγή τύπων προσέγγισης παραγώγου

Παράδειγμα (2/2)

Αν  $\bar{x} \equiv x_0$  έχουμε  $a = -1/2h$ ,  $b = 0$ ,  $c = 1/2h$ , δηλαδή

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} .$$

Αν  $\bar{x} \equiv x_0 + h$  έχουμε  $a = 1/2h$ ,  $b = -2/h$ ,  $c = 3/2h$ . Επομένως

$$f'(x_0 + h) \approx \frac{f(x_0 - h) - 4f(x_0) + 3f(x_0 + h)}{2h} .$$



## Προσέγγιση με Ελάχιστα Τετράγωνα (1/3)

### Πρόβλημα

Πώς θα προσεγγίσουμε συνάρτηση  $f(x)$  για την οποία έχουμε ένα σύνολο σημείων  $(x_i, y_i)$  με  $i = 1, \dots, n$  αλλά  $y_i \approx f(x_i)$  (και όχι  $y_i = f(x_i)$ );

**Παράδειγμα:** πειραματικές μετρήσεις, με σφάλματα δηλαδή, για τις τιμές  $f(x_i)$ .

Δεν έχει νόημα να την προσεγγίσουμε με συνάρτηση  $p(x)$  που περνά από τα  $(x_i, y_i)$ .

## Προσέγγιση με Ελάχιστα Τετράγωνα (1/3)

### Πρόβλημα

Πώς θα προσεγγίσουμε συνάρτηση  $f(x)$  για την οποία έχουμε ένα σύνολο σημείων  $(x_i, y_i)$  με  $i = 1, \dots, n$  αλλά  $y_i \approx f(x_i)$  (και όχι  $y_i = f(x_i)$ );

**Παράδειγμα:** πειραματικές μετρήσεις, με σφάλματα δηλαδή, για τις τιμές  $f(x_i)$ .

Δεν έχει νόημα να την προσεγγίσουμε με συνάρτηση  $p(x)$  που περνά από τα  $(x_i, y_i)$ .

### Πρόβλημα

Πώς θα απλοποιήσουμε πολύπλοκη συνάρτηση  $f(x)$ , γνωστή σε κάποια σημεία, χρησιμοποιώντας απλούστερη συνάρτηση  $p(x)$  με λιγότερες ελεύθερες παραμέτρους απ' ό,τι σημεία;

Το (γενικά μη γραμμικό) σύστημα  $p(x_i) = f(x_i)$  έχει περισσότερες εξισώσεις απ' ό,τι αγνώστους. Να απορρίψω σημεία;

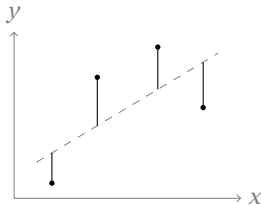
## Προσέγγιση με Ελάχιστα Τετράγωνα (2/3)

### Λύση

Με τη μέθοδο ελάχιστων τετραγώνων προσαρμόζουμε στα δεδομένα μας μια συνάρτηση  $g(x)$  προκαθορισμένης μορφής, με παραμέτρους, ώστε το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων από τα  $y_i$ ,

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

να γίνεται ελάχιστο ως προς αυτές τις παραμέτρους.



### Παρατήρηση

Επιλέγουμε να ελαχιστοποιήσουμε το άθροισμα των **τετραγώνων** αντί για τις **απόλυτες τιμές** των αποκλίσεων καθώς θέλουμε να σχηματίσουμε μια συνεχή και παραγωγίσιμη συνάρτηση: προσέξτε ότι π.χ. η παράγωγος του  $|x|$  δεν ορίζεται στο 0, ενώ, αντίθετα, η  $x^2$  έχει παραγώγους σε όλο το πεδίο ορισμού της.

## Ευθεία ελάχιστων τετραγώνων (1/4)

Έστω ότι γνωρίζουμε από τη θεωρία ότι η συνάρτηση  $f(x)$  που έδωσε τις μετρήσεις  $(x_i, y_i)$  είναι γραμμική.

Σχηματίζουμε τη συνάρτηση  $g(x) = \alpha x + \beta$  με άγνωστους συντελεστές  $\alpha$ ,  $\beta$ . Αυτοί θα προκύψουν από την απαίτηση να ελαχιστοποιείται το άθροισμα

$$E(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n (\alpha x_i + \beta - y_i)^2 .$$

Η συνάρτηση  $E(\alpha, \beta)$  γίνεται ακρότατη όταν  $\partial E / \partial \alpha = 0$ ,  $\partial E / \partial \beta = 0$ . Οι εξισώσεις γίνονται

$$2 \sum_{i=1}^n (\alpha x_i + \beta - y_i) x_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha \sum_{i=1}^n x_i^2 + \beta \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$2 \sum_{i=1}^n (\alpha x_i + \beta - y_i) = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha \sum_{i=1}^n x_i + \beta \sum_{i=1}^n 1 = \sum_{i=1}^n y_i$$

## Ευθεία ελάχιστων τετραγώνων (2/4)

Η λύση του συστήματος είναι

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

όπου

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

η μέση τιμή ενός μεγέθους  $w$ .

Ο παρονομαστής στα κλάσματα δείχνεται εύκολα ότι είναι θετικός.

## Ευθεία ελάχιστων τετραγώνων (3/4)

Το ακρότατο της  $E(\alpha, \beta)$  στις παραπάνω τιμές των  $\alpha, \beta$  είναι **ελάχιστο** καθώς ο εσσιανός πίνακας

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \beta \partial \alpha} & \frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & n \end{bmatrix}$$

είναι συμμετρικός θετικά ορισμένος (δείτε τις σημειώσεις για την απόδειξη).

## Ευθεία ελάχιστων τετραγώνων (4/4)

### Συντελεστής συσχέτισης

Ο συντελεστής συσχέτισης,  $r^2$ , που προσδιορίζει την ποιότητα της προσέγγισης, είναι

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

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.



## Πολυώνυμο ελάχιστων τετραγώνων (1/3)

Έστω ότι γνωρίζουμε από τη θεωρία ότι η συνάρτηση  $f(x)$  που έδωσε τις μετρήσεις  $(x_i, y_i)$  είναι πολυωνυμική βαθμού  $m$  ως προς  $x$ . Σχηματίζουμε τη συνάρτηση

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

με άγνωστους συντελεστές τα  $\alpha_i$ . Αυτοί θα προκύψουν από την απαίτηση να ελαχιστοποιείται το άθροισμα

$$E(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m) = \sum_{i=1}^n (p(x_i) - y_i)^2 ,$$

δηλαδή,

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_k} = 0 , \text{ για } k = 0, 1, \dots, m .$$

## Πολυώνυμο ελάχιστων τετραγώνων (2/3)

Οι εξισώσεις γίνονται

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_k} = 2 \sum_{i=1}^n x_i^k \left( \sum_{j=0}^m \alpha_j x_i^j - y_i \right) = 0 \Rightarrow \sum_{j=0}^m \alpha_j \sum_{i=1}^n x_i^{k+j} = \sum_{i=1}^n x_i^k y_i .$$

Στο γραμμικό σύστημα για τα  $\alpha_j$ , ο πίνακας των συντελεστών  $A$ , με διαστάσεις  $(m+1) \times (m+1)$ , έχει στοιχεία

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

Οι σταθεροί όροι είναι

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

Το σύστημα αυτό έχει μοναδική λύση αν  $m < n$ . Αν  $n = m + 1$ , η λύση αντιστοιχεί στο πολυώνυμο παρεμβολής  $m$  βαθμού.

## Πολυώνυμο ελάχιστων τετραγώνων (3/3)

### Παράδειγμα

Έστω ότι τα σημεία  $(x_i, y_i)$  είναι  $\{(0.0, 1.0), (0.25, 1.284), (0.5, 1.6487), (0.75, 2.117), (1.0, 2.7183)\}$ ,  $i = 1, \dots, 5$ . Το δευτεροβάθμιο πολυώνυμο που εξάγεται από τη μέθοδο ελάχιστων τετραγώνων προκύπτει ως λύση της

$$\begin{bmatrix} 5.0 & 2.5 & 1.8750 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.768 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \alpha_0 = 1.0052 \\ \alpha_1 = 0.8641 \\ \alpha_2 = 0.8437 \end{cases} .$$

Επομένως,

$$p(x) = 1.0052 + 0.8641x + 0.8437x^2.$$

Η ευθεία ελάχιστων τετραγώνων είναι η  $p(x) = 0.89968 + 1.70784x$ . Όπως παρατηρούμε, οι συντελεστές της δεν έχουν σχέση με τους δυο πρώτους συντελεστές του δευτεροβάθμιου πολυωνύμου.

## Καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ (1/2)

### Πρόβλημα

Έστω ότι έχουμε πειραματικά σημεία με θεωρητική σχέση της μορφής  $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ , όπου  $h(y)$  και  $g(x)$  κάποιες συναρτήσεις. Ποια είναι η καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων;

## Καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ (1/2)

### Πρόβλημα

Έστω ότι έχουμε πειραματικά σημεία με θεωρητική σχέση της μορφής  $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ , όπου  $h(y)$  και  $g(x)$  κάποιες συναρτήσεις. Ποια είναι η καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων;

### Λύση

Ορίζουμε τα σημεία  $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)$  με  $\tilde{x}_i = g(x_i)$  και  $\tilde{y}_i = h(y_i)$ , και εφαρμόζουμε για αυτά τις σχέσεις για τα  $\alpha, \beta$  της ευθείας ελάχιστων τετραγώνων καθώς η σχέση των  $\tilde{x}, \tilde{y}$  είναι γραμμική.

# Καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ (2/2)

## Παραδείγματα

- Έστω ότι η θεωρητική σχέση είναι  $y = a + be^x$ . Ορίζουμε

$$\tilde{y} = y, \quad \tilde{x} = e^x, \quad \tilde{\alpha} = b, \quad \tilde{\beta} = a.$$

Η εξίσωση γίνεται  $\tilde{y} = \tilde{\beta} + \tilde{\alpha}\tilde{x}$ . Η εφαρμογή των τύπων για τα  $\alpha, \beta$  της ευθείας ελάχιστων τετραγώνων υπολογίζει τα  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$  άρα και τα  $a, b$ .

## Καμπύλη ελάχιστων τετραγώνων $h(y) = \alpha g(x) + \beta$ (2/2)

### Παραδείγματα

- Έστω ότι η θεωρητική σχέση είναι  $y = a + be^x$ . Ορίζουμε

$$\tilde{y} = y, \quad \tilde{x} = e^x, \quad \tilde{\alpha} = b, \quad \tilde{\beta} = a.$$

Η εξίσωση γίνεται  $\tilde{y} = \tilde{\beta} + \tilde{\alpha}\tilde{x}$ . Η εφαρμογή των τύπων για τα  $\alpha, \beta$  της ευθείας ελάχιστων τετραγώνων υπολογίζει τα  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$  άρα και τα  $a, b$ .

- Έστω ότι η θεωρητική σχέση είναι  $y = ax^b$ . Η εξίσωση μπορεί να γραφεί στη μορφή  $\ln y = \ln a + b \ln x$ . Ορίζουμε

$$\tilde{y} = \ln y, \quad \tilde{x} = \ln x, \quad \tilde{\alpha} = b, \quad \tilde{\beta} = \ln a.$$

Η εξίσωση γίνεται  $\tilde{y} = \tilde{\beta} + \tilde{\alpha}\tilde{x}$ . Η εφαρμογή των τύπων για τα  $\alpha, \beta$  της ευθείας ελάχιστων τετραγώνων υπολογίζει τα  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$  άρα και τα  $a, b$ .