Approximation au sens des moindres carrés d'un nuage de points dans une base de fonctions

Dans l'espace $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$, on est en présence d'un nuage de n points $(\mathbf{x}_i, y_i)$.

On veut approcher « *au mieux* » ces points par une combinaison linéaire de k fonctions $(f_j)_{1 \leqslant j \leqslant k}$.

On cherche à trouver les a_j qui minimisent l'erreur quadratique :

$$\varepsilon^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=1}^{k} a_j \, f_j(\mathbf{x}_i) \right)^2 = {}^{\mathrm{t}}\,(\mathbf{y} - \mathbf{F}\,\mathbf{a}) \; (\mathbf{y} - \mathbf{F}\,\mathbf{a}) \quad ,$$

où $\mathbf{a}$ est le vecteur-colonne des a_j, $\mathbf{y}$ est le vecteur-colonne des y_i, et $\mathbf{F}$ la matrice $(n \times k)$ des $f_j(\mathbf{x}_i)$.

On peut démontrer que le vecteur $\mathbf{a}$ qui minimise l'erreur quadratique est solution du système linéaire suivant :

$$ {}^{\mathrm{t}}\mathbf{F}\,\mathbf{F}\,\mathbf{a} = {}^{\mathrm{t}}\mathbf{F}\,\mathbf{y} \; .$$

L'erreur quadratique devient alors :

$$\varepsilon^2_{\min} = {}^{\mathrm{t}}\mathbf{y} \; (\mathbf{y} - \mathbf{F}\,\mathbf{a}) \quad .$$