УДК 378.147

МАТРИЧНЫЙ ПОДХОД В МНК

В. Э. Гарист, И. В. Гарист, Л. И. Рыдевская
Могилевский государственный университет продовольствия,
г. Могилев, Республика Беларусь

Пусть в результате наблюдений получены n значений $x_1, x_2, \ldots, x_n$ величины X и n значений $y_1, y_2, \ldots, y_n$ величины Y. По полученным данным требуется отыскать аналитическую зависимость между величинами X и Y. Формулу, выражающую эту зависимость приближенно, называют эмпирической.

Эмпирические формулы широко применяются в физике, химии и других естественных науках. Один из наиболее широко распространенных методов решения поставленной задачи – метод наименьших квадратов (МНК) изучается в курсе высшей математики в разделе “Функции нескольких переменных”. Суть метода МНК – минимизация суммы квадратов отклонений экспериментальных значений y_i от значенийрасчетных, вычисленных по эмпирической формуле. Работа достаточно громоздкая. Например, в простейшем случае, когда зависимость между величинами X и Y линейная: $Y = aX + b$, поиск параметров зависимости сводится к решению *нормальной* системы линейных уравнений: $\begin{cases} a \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i + b \cdot n = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{cases}$. В случае нелинейной зависимости нормальная система уравнений еще более громоздкая. В связи с вышесказанным представляет интерес метод решения поставленной задачи, изложенный в теореме 8.1 [1, с. 59].

Указанную теорему 8.1 переформулируем следующим образом: для системы линейных уравнений $AX = C$ существует единственное решение этой системы X^* со свойством $(AX^* - C, AX^* - C) \to \min$. Здесь же приводится явный вид этого решения: $X^* = (A^T \cdot A)^{-1} \cdot (A^T \cdot C)$. Здесь, как обычно, A – матрица системы линейных уравнений, C – столбец свободных членов, через X обозначена матрица-столбец неизвестных (параметров) функциональной зависимости между величинами X и Y. Очевидный плюс этого метода – решение задачи МНК сводится к элементарному перемножению матриц, реализованному не только во всех системах компьютерной математики, но даже в офисных пакетах и программируемых микрокалькуляторах.

Оценим трудоемкость решения типичной задачи для студента-технолога[2, с. 71] каждым из указанных способов.

Задача. Зависимость теплоемкости C_p фторида магния от температуры T выражается следующими данными из таблицы 1. Найти аналитическое выражение этой зависимости методом МНК.

Таблица 1.

T, K	300	400	500	600	700	800	900	1000
C_p, $\frac{Дж}{моль \cdot K}$	70,35	75,38	80,53	85,81	91,26	96,83	102,53	108,27

Решение. Для составления нормальной системы составим вспомогательную таблицу 2.

Таблица 2.

x_i	300	400	500	600	700	800	900	1000	5200
y_i	70,35	75,38	80,53	85,81	91,26	96,83	102,53	108,27	710,96
$x_i y_i$	21105	30152	40265	51486	63882	77464	92277	108270	484901
x_i^2	90000	160000	250000	360000	490000	640000	810000	1000000	3800000
									$\sum$

Тогда нормальная система будет иметь вид: $\begin{cases} 3800000\cdot a+5200\cdot b=484901 \\ 5200\cdot a+8\cdot b=710{,}96 \end{cases}$ и ее решение любым известным способом даст результат: $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0{,}054 \\ 53{,}62 \end{pmatrix}$, искомая зависимость $C_p=0{,}054\cdot T+53{,}62$.

Для решения поставленной задачи выпишем явно матрицы, с помощью которых будет получено решение: $A=\begin{pmatrix} 300 & 1 \\ 400 & 1 \\ 500 & 1 \\ 600 & 1 \\ 700 & 1 \\ 800 & 1 \\ 900 & 1 \\ 1000 & 1 \end{pmatrix}$, $C=\begin{pmatrix} 70.35 \\ 75.38 \\ 80.53 \\ 85.81 \\ 91.26 \\ 96.83 \\ 102.53 \\ 108.27 \end{pmatrix}$,

$$A^T=\begin{pmatrix} 300 & 400 & 500 & 600 & 700 & 800 & 900 & 1000 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда искомое решение $X^*=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\left(A^T\cdot A\right)^{-1}\cdot\left(A^T\cdot C\right)=\begin{pmatrix} 0{,}054 \\ 53{,}62 \end{pmatrix}$.

Очевидно, трудозатраты во втором случае ниже и в учебном процессе указанным методом можно пользоваться уже в первом семестре.

Список литературы

1. Черняк А. А., Новиков В. А., Мельников О. И., Кузнецов А. В. Математика на базе Mathcad. СПб: БХВ-Петербург, 2003.

2. Брановицкая С. В., Медведев Р. Б., Фиалков Ю. Я. Вычислительная математика в химии и химической технологии. К: Вища шк. Головное изд-во, 1986.