УДК 378.147

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ В СИСТЕМАХ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ

В. Э. ГАРИСТ
Могилевский государственный университет имени А. А. Кулешова
Могилев, Беларусь

Метод наименьших квадратов (сокращённо МНК) используется в двух контекстах. Во-первых, это важнейший инструмент регрессионного анализа при построении моделей на основе зашумленных экспериментальных данных. Во-вторых, МНК работает как метод аппроксимации, вне связи с математической статистикой.

В классической модели парной линейной регрессии $y(x)=\beta_0+\beta_1 x$ по экспериментальному набору значений $(x_i; y_i)$, где $i=1,2,\ldots,n$, расчёт коэффициентов модели МНК традиционно производится как решение нормальной системы алгебраических уравнений $\begin{cases}\beta_0\cdot n+\beta_1\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}x_i=\sum\limits_{i=1}^{n}y_i;\\ \beta_0\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}x_i+\beta_1\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2=\sum\limits_{i=1}^{n}x_i\cdot y_i.\end{cases}$ С учётом принятых в математической статистике обозначений искомое решение удобно получить в форме $\begin{cases} \beta_1 = \dfrac{\overline{x \cdot y} - \overline{x} \cdot \overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2}; \\ \beta_0 = \overline{y} - \beta_1 \cdot \overline{x}. \end{cases}$

На решаемую задачу сглаживания экспериментальных данных можно смотреть так же, как на решение несовместной системы линейных алгебраических уравнений $\begin{cases} \beta_0 + \beta_1 \cdot x_1 = y_1; \\ \beta_0 + \beta_1 \cdot x_2 = y_2; \\ \quad \ldots \\ \beta_0 + \beta_1 \cdot x_n = y_n \end{cases}$ или $\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \ldots & \ldots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{pmatrix}$ в матричной форме.

Набор $\begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$ – псевдорешение СЛАУ $\begin{cases} \beta_0 + \beta_1 \cdot x_1 = y_1; \\ \beta_0 + \beta_1 \cdot x_2 = y_2; \\ \quad \ldots \\ \beta_0 + \beta_1 \cdot x_n = y_n. \end{cases}$

Матричная форма МНК решения поставленной задачи имеет вид: $\begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \left(F^T \cdot F\right)^{-1} \cdot F^T \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{pmatrix}$. Здесь $F = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \ldots & \ldots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$ – матрица плана эксперимента, построенная в соответствии с видом модели $y(x) = \beta_0 + \beta_1 x$. При этом построенная матрица $\left(F^T \cdot F\right)^{-1} \cdot F^T$ фактически является псевдообратной для матрицы системы $F = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \ldots & \ldots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$. Поскольку указанные матричные операции реализованы в любой системе компьютерной математики, то принципиально задача решена. При этом в некоторых системах компьютерной математики также реализовано явное обращение к псевдообратной матрице.

Проиллюстрируем указанные подходы к решению конкретной задачи с применением систем СКМ: SMath Studio [1], Mathcad. Причины выбора СКМ SMath Studio указаны в [2].

Пусть имеются следующие экспериментальные данные (табл. 1).

Считая, что между величинами x и y существует линейная зависимость, установить параметры этой зависимости.

Расчёты удобно свести в таблицу (табл. 2).

Табл. 1

x_i	17,30	17,08	18,30	18,80	19,20	18,50
y_i	537	534	550	555	560	552

Табл. 2

i	x_i	y_i	$x_i \cdot y_i$	x_i^2
1	17,3	537	9290,1	299,29
2	17,08	534	9120,72	291,7264
3	18,3	550	10065	334,89
4	18,8	555	10434	353,44
5	19,2	560	10752	368,64
6	18,5	552	10212	342,25
$\sum$	109,18	3288	59873,82	1990,236
	$\overline{x}$	$\overline{y}$	$\overline{x \cdot y}$	$\overline{x^2}$
	18,197	548,000	9978,970	331,706

Согласно МНК, рассчитаем $\begin{cases} \beta_1 = \dfrac{\overline{x \cdot y} - \overline{x} \cdot \overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2}; \\ \beta_0 = \overline{y} - \beta_1 \cdot \overline{x} \end{cases}$ или $\begin{cases} \beta_1 = 12,252; \\ \beta_0 = 325,055. \end{cases}$

Получим тот же результат в матричной форме. В СКМ SMath Studio последовательно строим матрицы: F^T, $F^T \cdot F$, $\left(F^T \cdot F\right)^{-1}$, $\left(F^T \cdot F\right)^{-1} \cdot F^T$ (рис. 1).

$$f^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 17,3 & 17,08 & 18,3 & 18,8 & 19,2 & 18,5 \end{bmatrix} \qquad f^{\mathrm{T}} \cdot f = \begin{bmatrix} 6 & 109,18 \\ 109,18 & 1990,2364 \end{bmatrix}$$

$$\left(f^{\mathrm{T}} \cdot f\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 94,119 & -5,163 \\ -5,163 & 0,284 \end{bmatrix}$$

$$\left(f^{\mathrm{T}} \cdot f\right)^{-1} \cdot f^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 4,796 & 5,932 & -0,367 & -2,948 & -5,014 & -1,399 \\ -0,254 & -0,317 & 0,029 & 0,171 & 0,285 & 0,086 \end{bmatrix}$$

Рис. 1. Построение матриц в СКМ SMath Studio

Теперь искомый набор коэффициентов модели $\begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$ есть результат матричного умножения (рис. 2).

$$\left(f^{\mathrm{T}} \cdot f\right)^{-1} \cdot f^{\mathrm{T}} \cdot y = \begin{bmatrix} 325{,}055 \\ 12{,}252 \end{bmatrix}$$

Рис. 2. Расчет коэффициентов модели в СКМ SMath Studio

В некоторых СКМ генерация псевдообратной матрицы возможна с помощью встроенных функций. В частности, такая функция присутствует в СКМ Mathcad. Результат обращения к ней (и проверка) представлены на рис. 3.

$$\mathrm{geninv}(f) = \begin{pmatrix} 4.796 & 5.932 & -0.367 & -2.948 & -5.014 & -1.399 \\ -0.254 & -0.317 & 0.029 & 0.171 & 0.285 & 0.086 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{geninv}(f) \cdot f = \begin{pmatrix} 1 & 1.172 \times 10^{-13} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{geninv}(f) \cdot y = \begin{pmatrix} 325.055 \\ 12.252 \end{pmatrix}$$

Рис. 3. Построение псевдообратной матрицы в СКМ Mathcad

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Официальный сайт программы SMath Studio [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://ru.smath.com/обзор/SMathStudio/резюме. – Дата доступа: 03.01.2024.

2. **Гарист, В. Э.** Элементы аналитической геометрии в системах компьютерной математики / В. Э. Гарист // Преподавание математики в высшей школе и работа с одаренными студентами в современных условиях: материалы Междунар. науч.-практ. семинара, Могилев, 18 февр. 2021 г. – Могилев: Белорус.-Рос. ун-т, 2021. – С. 35–37.