зависимостью массы c-кварка от температуры можно пренебречь ввиду ее слабости.

Таким образом, вероятность трехглюонной рекомбинации J/ψ может составлять величину порядка нескольких процентов от вероятности диссоциации J/ψ в кварк-глюонной плазме [1], что необходимо учитывать при описании процессов рождения J/ψ в столкновениях тяжелых ионов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Matsui T., Satz H.//Phys. Lett. 1986. **178B**. P. 416. [2] Karsch F., Satz H. Preprint CERN-TH. 5900/90. [3] Blaizot J.-P., Ollitrault J.-Y.//Phys. Rev. 1989. **D39**. P. 232. [4] Gavin S., Gyulassy M., Jackson A.//Phys. Lett. 1988. **207B**. P. 263. [5] Vogt R., Gavin S. Preprint HU-TFT-90-57. 1990. [6] Capella A. et al.//Phys. Lett. 1988. **206B**. P. 354. [7] Vogt R., Brodsky S. J., Hoyer P. Preprint SLAC-PUB-5421. 1991. [8] Prorok D. Preprint ITP UWr. 732/89. [9] Prorok D. Preprint ITP UWr. 770/90. [10] Prorok D. Preprint ITP UWr. 754/90. [11] Faustov R. N.//Ann. of Phys. (N. Y.) 1973. **78**. P. 176.

Поступила в редакцию
27.01.92

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 6

УДК 519.21

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ В СЛУЧАЕ НЕТОЧНО ЗАДАННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ФУНКЦИИ И ЕЕ АРГУМЕНТА

А. Б. Кнуренко, Ю. П. Пытьев
(*кафедра физики атмосферы и математической геофизики*)

Предложен новый вариант метода наименьших квадратов в задаче восстановления функциональной зависимости по данным измерений с ошибками значений функции и ее аргумента.

Метод наименьших квадратов (МНК) является одним из наиболее распространенных среди методов, используемых при анализе и интерпретации экспериментальных данных. В значительной степени это связано с простотой его формулировки и алгоритмической реализации. МНК включен в десятки различных программных пакетов, предназначенных в основном для обработки данных экспериментальных исследований.

Суть МНК сводится к следующему.

Пусть

$$\xi_i = u(a_0,\ a_1,\ \ldots,\ a_n,\ x_i) + \nu_i \tag{1}$$

— результат измерения значения $u(a_0, a_1, \ldots, a_n, \cdot)$ с ошибкой ν_i, $i=1, \ldots, k$. По результатам k измерений $\xi_1, \ldots, \xi_k$ требуется определить $a_0, a_1, \ldots, a_n$. В равенстве (1) значение $x=x_i$ считается известным, $i=1, \ldots, k$, значения $a_0, a_1, \ldots, a_n$ — неизвестными, но предполагается, что $a=(a_0, a_1, \ldots, a_n) \in \mathscr{A}$, где $\mathscr{A}$ — заданное множество в $\mathscr{R}_{n+1}$. Тогда в общем виде задачи, решаемые МНК, могут быть сформулированы следующим образом: требуется определить $\mathring{a}=(\mathring{a}_0, \mathring{a}_1, \ldots, \mathring{a}_n)$ так, чтобы

$$\sum_{i=1}^{k} \|\xi_i - u(\mathring{a},\ x_i)\|^2 = \min_{a \in \mathscr{A}} \sum_{i=1}^{k} \|\xi_i - u(a,\ x_i)\|^2.$$

Вектор $\hat{a}$ интерпретируется как оценка параметров модели схемы измерения (1).

Однако в значительном числе задач с погрешностью измеряются не только значения $u(a, x_i)$, но и сам аргумент x_i, $i=1, ..., k$. Рассмотрим МНК в частном случае, когда с погрешностью заданы значения как функции, так и аргумента, а $u(a, x)$ — линейная функция, т. е. $u=a_1x+a_0$. Подобного рода задача рассмотрена в ряде работ (см., напр., [1]). Речь идет о часто встречающейся задаче проведения прямой через «экспериментальные точки» (x_i, y_i), $i=1, ..., k$, полученные с погрешностью.

Запишем уравнение искомой прямой в виде

$$(\mathbf{n}, \mathbf{r}-\mathbf{r}_0)=0, \tag{2}$$

где $\mathbf{n}$ — единичная нормаль к прямой, $\mathbf{r}_0$ — фиксированная точка на прямой, $\mathbf{r}$ — «текущая» точка. Заметим, что если $\mathbf{r}$ не лежит на прямой, то $h=(\mathbf{n}, \mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\neq 0$ и равно уклонению точки $\mathbf{r}$ от прямой.

Пусть в эксперименте измерены пары $(x_i, y_i)=r_i$, причем каждая координата $\mathbf{r}_i$ — со своей погрешностью. Мы можем учесть это, определив «вклад» ошибок по x и по y в значение уклонения измеренной точки от прямой с помощью должным образом заданного положительно определенного оператора W, положив

$$h=(W\mathbf{n}, \mathbf{r}-\mathbf{r}_0).$$

Если W задан диагональной матрицей $\mathrm{diag}(w_{11}, w_{22})$, то

$$h=w_{11}n_x(x-x_0)+w_{22}n_y(y-y_0)$$

и w_{11}, w_{22} можно определить равными обратным значениям среднеквадратичной ошибки измерения x и y координат точки соответственно. Тем самым вклады ошибок измерений x и y координат в значение h будут выравнены.

Будем для начала считать, что погрешность измерения не меняется вдоль прямой, т. е. может быть описана в каждой точке оператором W. Тогда задача нахождения наилучшей в среднеквадратичном прямой, аппроксимирующей результаты эксперимента, может быть записана следующим образом:

$$\sum_{i=1}^{k}(W\mathbf{n}, \mathbf{r}_i-\mathbf{r}_0)^2 \sim \min_{n, r_0}. \tag{3}$$

Для ее решения воспользуемся методом множителей Лагранжа, позволяющим записать условие (1) в виде задачи на безусловный минимум:

$$\sum_{i=1}^{k}(W\mathbf{n}, \mathbf{r}_i-\mathbf{r}_0)^2+w(\mathbf{n}, \mathbf{n}) \sim \min_{n, r_0}. \tag{4}$$

Продифференцировав левую часть (4) по $\mathbf{r}_0$, получим

$$(W\mathbf{n}, \mathbf{r}_m)=(W\mathbf{n}, \mathbf{r}_0), \tag{5}$$

где $\mathbf{r}_m=(1/k)\sum_{i=1}^{k}\mathbf{r}_i$.

В свою очередь, подставляя (5) в (4) и дифференцируя по $\mathbf{n}$, получим

$$\sum_{i=1}^{k} (W\mathbf{n},\ \mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)\,W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)+w\mathbf{n}=0. \tag{6}$$

Умножив (6) скалярно на $W(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_m)$ и обозначив $(W\mathbf{n},\ \mathbf{r}_j-\mathbf{r}_m)=z_j$, найдем

$$\sum_{i=1}^{k} z_i\,[(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m),\ W(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_m))+w\delta_{ij}]=0,\ j=1,\ldots,k, \tag{7}$$

где

$$\delta_{ij}=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases},\ i,\ j=1,\ldots,k.$$

Лемма. *Пусть* $A=(a_{ij})$, $a_{ij}=(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m),\ W(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_m))$. *Тогда* $\operatorname{rank}A\leqslant 2$, *причем*:

a) $\operatorname{rank}A=0$ *тогда и только тогда, когда* $\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_j$ *для всех* $i,\ j=1,\ldots,k$;

b) $\operatorname{rank}A=1$ *тогда и только тогда, когда существует единственная прямая, проходящая через все точки одновременно*;

c) $\operatorname{rank}A=2$, *если точки* $\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_k$ *не лежат на прямой.*

Доказательство. Определим оператор B, действующий из евклидова пространства $\mathcal{R}_k$ в евклидово пространство $\mathcal{R}_2$, по формуле

$$B\mathbf{z}=\sum_{i=1}^{k} W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)\,\mathbf{z}_i,\ \mathbf{z}=(z_1,\ldots,z_k)^*\in\mathcal{R}_k.$$

Ранг оператора B равен размерности пространства его значений, т. е. размерности линейной оболочки векторов $W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)$, $i=1,\ldots,k$. Сопряженный с B оператор B^* действует из $\mathcal{R}_2$ в $\mathcal{R}_n$:

$$B^*\mathbf{x}=\begin{pmatrix}(W(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_m),\ \mathbf{x})\\ \cdots\cdots\cdots\\ (W(\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_m),\ \mathbf{x})\end{pmatrix},\ \mathbf{x}\in\mathcal{R}_2,$$

т. е. $(B^*\mathbf{x})_i=(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m),\ \mathbf{x})$, $i=1,\ldots,k$. Следовательно,

$$(B^*B\mathbf{z})_i=\Big(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m),\ \sum_{j=1}^{k} W(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_m)\,\mathbf{z}_j\Big)=\sum_{i=1}^{k}(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m),$$

$$W(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_m))\cdot z_j,\ i=1,\ldots,k.$$

А поскольку $\operatorname{rank}B=\operatorname{rank}B^*B=\operatorname{rank}A$, то последний равен числу линейно независимых векторов среди $W(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_m)$, ..., $W(\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_m)$, или, что то же самое, среди $\mathbf{r}_1$, ..., $\mathbf{r}_k$, поскольку оператор W невырожден, а $\mathbf{r}_m=(1/k)\sum_{i=1}^{k}\mathbf{r}_i$. ■

Умножив (6) скалярно на $\mathbf{n}$, получим

$$-w=\sum_{i=1}^{k}(W\mathbf{n},\ \mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)^2,$$

т. е. $-w$ — погрешность метода. Так как согласно уравнениям (7) $-w$ — одно из собственных значений неотрицательно определенной

матрицы A, то согласно лемме в общем случае, когда $\operatorname{rank} A=2$, необходимо выбрать наименьшее ненулевое собственное значение $-w_*$ матрицы A. При этом согласно (6)

$$\mathbf{n}=-\frac{1}{w_*}\sum_{i=1}^{k} z_i^* \cdot W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m), \tag{8}$$

где $z^*=\{z_i^*\}$, $i=1, \ldots, k$ — соответствующий w_* собственный вектор, что с учетом (5) полностью определяет искомую прямую.

Заметим, что ненулевые собственные значения матрицы A и собственно оператора B^*B совпадают с ненулевыми собственным значениями оператора BB^*, действующего по формуле

$$BB^*\mathbf{x}=\sum_{i=1}^{k} W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)\cdot(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m),\ \mathbf{x}),\ \ \mathbf{x}\in\mathcal{R}_2.$$

А поскольку оператору BB^* соответствует матрица размерности 2×2 с матричными элементами

$$(BB^*)_{\alpha\beta}=\sum_{i=1}^{k}(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m))_\alpha\cdot(W(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_m)_\beta),\ \ \alpha,\ \beta=1,\ 2,$$

то проблема собственных значений становится тривиальной. Таким образом, доказана

Теорема. *Решение задачи* (3) *дается уравнением прямой* (2), *где* $\mathbf{r}_0=\mathbf{r}_m$ *и*

a) $\mathbf{n}$ — *любой единичный вектор, если* $\operatorname{rank} BB^*=0$;

b) $\mathbf{n}$ — *нормаль к прямой, проходящей через любые две точки* $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_j$, $i\neq j$, $i, j=1, \ldots, k$, *если* $\operatorname{rank} BB^*=1$;

c) $\mathbf{n}$ *определяется равенством* (8), *где* $-w_*$ — *наименьшее собственное значение матрицы* BB^*, *если* $\operatorname{rank} BB^*=2$. *При этом* $-w_*$ *равно минимальному значению левой части* (3) (*погрешность метода*).

Заметим, что возможно и другое, более простое решение задачи (3). Для этого достаточно вспомнить, что $\mathbf{n}=(\cos\varphi,\ \sin\varphi)$, $0\leqslant\varphi<2\pi$. Тогда, учитывая (5) и перебирая φ с некоторым шагом, можно непосредственно найти минимум (3) с требуемой точностью.

Рассмотрим случай, когда погрешность в каждом измерении своя, т. е. когда в i-й точке на плоскости распределение погрешности задается матрицей W_i. Тогда задача нахождения наилучшей в среднеквадратичном прямой, аппроксимирующей экспериментальные точки, будет иметь вид

$$\sum_{i=1}^{k}(W_i\mathbf{n},\ \mathbf{r}_i-\mathbf{r}_0)^2\sim\min_{n,r_0}. \tag{9}$$

Необходимое условие минимума:

$$\sum_{i=1}^{k}(W_i\mathbf{n},\ \mathbf{r}_i)\,W_i n=\sum_{i=1}^{k}(W_i\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0)\,W_i\mathbf{n}.$$

Введем оператор V такой, что

$$V\mathbf{x}=\sum_{i=1}^{k}(W_i\mathbf{n},\ \mathbf{x})\,W_i\mathbf{n}.$$

Ограничимся случаем, когда W_i — диагональные матрицы. Тогда

$$\mathbf{r}_0 = V^{-1} \sum_{i=1}^{k} (W_i \mathbf{n},\ \mathbf{r}_i)\, W_i \mathbf{n},$$

где

$$V^{-1} = \frac{1}{\det V} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{k} (w_{22}^i n_y)^2 & -\sum_{i=1}^{k} w_{11}^i w_{22}^i n_x n_y \\ -\sum_{i=1}^{k} w_{11}^i w_{22}^i n_x n_y & \sum_{i=1}^{k} (w_{11}^i n_x)^2 \end{bmatrix},$$

$$\det V = \sum_{i=1}^{k} (w_{11}^i n_x)^2 \cdot \sum_{i=1}^{k} (w_{22}^i n\ )^2 - \Big(\sum_{i=1}^{k} w_{11}^i w_{22}^i n_x n_y\Big)^2;$$

$w^i{}_{11}$, $w^i{}_{22}$ — диагональные элементы W_i, $\mathbf{n} = (n_x,\ n_y)$.

Поскольку $\mathbf{n} = (\cos\varphi,\ \sin\varphi)$, $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$, то, как и в предыдущем случае, перебирая φ с некоторым шагом, найдем минимум в (9) с требуемой точностью.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Cameron Reed B.//Amer. J. Phys. 1989. **57**, N 7. P. 642.

Поступила в редакцию
10.02.92

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 6

УДК 536.75

ЦЕПОЧКА УРАВНЕНИЙ БОГОЛЮБОВА ДЛЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ НА СВЯЗНЫХ КЛАСТЕРАХ

И. П. Базаров, П. Н. Николаев
(кафедра квантовой статистики)

Получена система уравнений для частичных статистических операторов Боголюбова на связных кластерах, которая дает возможность построить единую теорию возмущений для однородной и упорядоченной фаз вне зависимости от типа симметрии системы многих частиц.

Метод Боголюбова позволяет построить полную статистическую термодинамику систем многих частиц, причем для квантовых систем данный метод особенно плодотворен, поскольку из-за вычислительных трудностей сведение многочастичной задачи к задаче с меньшим числом переменных является единственным способом упрощения [1]. Однако решение квантовой цепочки уравнений сопряжено со многими сложностями как для однородной, так и для упорядоченной систем. Поэтому выбор теории возмущений должен быть достаточно эффективным, особенно в области фазовых переходов, где, как правило, скорость сходимости рядов теории возмущений значительно замедляется. С этой точки зрения построение единого способа описания двух фаз вещества с единых позиций является весьма актуальным [2].