В изложении доцента БГТУ Сахарова В.Ю.

Пусть произведено n взаимно независимых экспериментов с двумерной случайной величиной (X, Y). Получены пары чисел (X_1, Y_1), (X_2, Y_2), … , (X_n, Y_n). Построим в Microsoft Office Excel точечную диаграмму (эллипс рассеяния). И пусть построенная фигура не до конца напоминает эллипс в том смысле, что его большая полуось явно изогнута и это скорее уже не эллипс, а полумесяц. В таком случае полагать, что случайные величины X и Y связаны линейной корреляционной зависимостью $Y=kX+b+\varepsilon$ не совсем правильно. Можно предложить построить регрессионную модель в виде линейной комбинации других функций: $Y=a_1\cdot \mathrm{V}_1(X)+a_2\cdot \mathrm{V}_2(X)+\ldots+a_m\cdot \mathrm{V}_m(X)+\varepsilon$. Набор функций $\mathrm{V}_1(X)$, $\mathrm{V}_2(X)$, … , $\mathrm{V}_m(X)$ желательно знать из физического смысла задачи. В простейшем случае линейной корреляционной зависимости были использованы всего две функции $\mathrm{V}_1(X)=1$ и $\mathrm{V}_2(X)= X$.

Коэффициенты a_1, a_2, … , a_m можно найти как и в простейшем случае методом наименьших квадратов. Для этого нужно минимизировать функцию m аргументов: $f(a_1,a_2,...,a_m)=\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)\right)\right)^2$. Согласно теоремам математического анализа функция многих переменных будет достигать минимума в той точке, где все её частные производные равны нулю. Найдём эти производные:

$$\frac{\partial f(a_1,a_2,...,a_m)}{\partial a_k}=\frac{\partial}{\partial a_k}\left(\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)\right)\right)^2\right)=$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial a_k}\left(\left(Y_i-\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)\right)\right)^2\right)=$$

$$=\sum_{i=1}^{n}2\left(Y_i-\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)\right)\right)\frac{\partial}{\partial a_k}\left(Y_i-\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)\right)\right)=$$

напомним, что при дифференцировании по a_k все остальные a_j мыслятся константами и производные от них равны нулю.

$$=\sum_{i=1}^{n}2\left(Y_i-\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)\right)\right)\left(-V_k(X_i)\right)=$$

$$=2\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\left(a_1\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_m(X_i)-Y_i\right)=$$

$$=2\sum_{i=1}^{n}\left(a_1\cdot V_k(X_i)\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot V_k(X_i)\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot V_k(X_i)\cdot V_m(X_i)-V_k(X_i)\cdot Y_i\right)=$$

$$=2\left(\sum_{i=1}^{n}a_1\cdot V_k(X_i)\cdot V_1(X_i)+\sum_{i=1}^{n}a_2\cdot V_k(X_i)\cdot V_2(X_i)+...+\sum_{i=1}^{n}a_m\cdot V_k(X_i)\cdot V_m(X_i)-\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot Y_i\right)=$$

$$=2\left(a_1\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_m(X_i)-\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot Y_i\right).$$

Где k=1, 2, … , m.

Теперь приравняем все эти m частных производных нулю. Получатся m уравнений вида:

$$2\left(a_1\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_m(X_i)-\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot Y_i\right)=0$$

$$a_1\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_m(X_i)-\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot Y_i=0$$

$$a_1\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_1(X_i)+a_2\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_2(X_i)+...+a_m\cdot\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot V_m(X_i)=\sum_{i=1}^{n}V_k(X_i)\cdot Y_i$$

Фактически получена система m линейных уравнений относительно m неизвестных: a_1, a_2, …, a_m. Эту систему можно записать в матричной форме:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_1(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_2(X_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_m(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot V_1(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot V_2(X_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot V_m(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot Y_i \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \sum_{i=1}^{n} V_m(X_i)\cdot V_1(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_m(X_i)\cdot V_2(X_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{n} V_m(X_i)\cdot V_m(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_m(X_i)\cdot Y_i \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \sum_{i=1}^{n} (V_1(X_i))^2 & \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_2(X_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_m(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_2(X_i) & \sum_{i=1}^{n} (V_2(X_i))^2 & \ldots & \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot V_m(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot Y_i \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \sum_{i=1}^{n} V_1(X_i)\cdot V_m(X_i) & \sum_{i=1}^{n} V_2(X_i)\cdot V_m(X_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{n} (V_m(X_i))^2 & \sum_{i=1}^{n} V_m(X_i)\cdot Y_i \end{array}\right)$$

Линейную систему уравнений можно решить, сразу записав ответы по формулам Крамера. Для удобства вычисления определителей можно использовать встроенную в Microsoft Office Excel функцию МОПРЕД(массив), возвращающую определитель матрицы.

Приведём конкретный пример. Будем полагать регрессионную модель параболической. Тогда $Y=aX^2+bX+c+\varepsilon$. Это означает, что будут использованы три функции $V_1(X)=X^2$, $V_2(X)=X$ и $V_3(X)=1$. Получающаяся система трёх уравнений относительно трёх неизвестных a, b и c в матричной форме будет иметь вид:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} \sum_{i=1}^{n} (X_i)^4 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2\cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} X_i\cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} Y_i \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} \sum_{i=1}^{n} (X_i)^4 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2\cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} X_i\cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i & n & \sum_{i=1}^{n} Y_i \end{array}\right)$$

Запишем её решение с помощью формул Крамера:

$a=\dfrac{\Delta_a}{\Delta}$, $b=\dfrac{\Delta_b}{\Delta}$, $c=\dfrac{\Delta_c}{\Delta}$, где

$$\Delta=\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} (X_i)^4 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i & n \end{vmatrix}$$

$$\Delta_a = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 \cdot Y_i & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 \\ \sum_{i=1}^{n} X_i \cdot Y_i & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i \\ \sum_{i=1}^{n} Y_i & \sum_{i=1}^{n} X_i & n \end{vmatrix}$$

$$\Delta_b = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} (X_i)^4 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 \cdot Y_i & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} X_i \cdot Y_i & \sum_{i=1}^{n} X_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} Y_i & n \end{vmatrix}$$

$$\Delta_c = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} (X_i)^4 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 \cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^3 & \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i \cdot Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} (X_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} Y_i \end{vmatrix}$$