## 8. СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

#### 8.1. Статистический анализ и обработка данных

В предыдущих разделах были рассмотрены методы определения характеристик, описывающих свойства случайных объектов (величин, векторов, функций). Однако цель обработки экспериментальных данных в конечном счёте состоит в выявлении причинно-следственных связей, определяющих состояние и развитие изучаемого явления. Установление этих связей позволяет не только глубоко анализировать различные процессы, но и определять оптимальные пути управления ими.

Решение указанной задачи осуществляется с помощью ряда методов, объединяемых единым названием — методы статистического анализа экспериментальных данных. В число этих методов входят методы дисперсионного, корреляционного, регрессионного, компонентного и факторного анализов, метод наименьших квадратов.

Все эти методы целесообразно разделить на две группы:

- методы статического статистического анализа (CCA), в которых фактор времени в явном виде не учитывается;
- методы динамического статистического анализа (ДСА), в которых экспериментальные данные представляются в форме динамических или временных рядов.

Из всего многообразия методов статистического анализа ниже будут изложены широко распространённые методы — наименьших квадратов и регрессионного анализа. Они рассматриваются как методы ССА.

В методах ССА признак, характеризующий причины, принято называть факторным признаком или для краткости — фактором. Признак, характеризующий следствия, принято называть результативным признаком или для краткости — результатом (результатом наблюдений).

При получении и обработке данных предполагается, что результат наблюдения у зависит от одного или нескольких факторов  $x_1, x_2, ..., x_m$ , и фиксируется по отношению к данным факторам. В процессе обработки решается ряд вопросов.

- 1. Справедливо ли предположение о зависимости результата y от факторов  $x_1, x_2, ..., x_m$ ?
  - 2. Как оценить степень этой зависимости?

- 3. Как выделить среди факторов наиболее существенные?
- 4. Нельзя ли сократить число факторов, используемых при анализе?
- 5. Какой вид имеет причинно-следственная зависимость между факторами и результатом?

Прежде чем приступить к рассмотрению данных вопросов, остановимся на процедуре формального представления причинно-следственных связей между результатом y и факторами  $x_1, x_2, ..., x_m$ . Указанная процедура сводится к определению зависимости

$$y = f(x_1, x_2,...,x_m).$$

Подход к решению данной задачи различен в зависимости от свойств факторов  $X_{< m>}$ , функции f и, наконец, свойств результатов наблюдений. По этой причине постановка задачи анализа и методы её решения могут быть существенно различными. Для описания данной задачи будем обозначать символом f функциональную (детерминированную), а символом  $\hat{f}$  — стохастическую зависимость между  $X_{< m>}$  и y.

Напомним, что детерминированная — это зависимость величины y или её некоторой характеристики, например математического ожидания, от факторов  $X_{< m>}$ . Зависимость закона распределения результата y от факторов  $X_{< m>}$  является стохастической.

Тогда могут иметь место следующие виды зависимостей результата y от факторов  $X_{< m>}$ .

1. Функциональная зависимость от неслучайных факторов

$$\hat{y} = f(x_1, x_2, ..., x_m) + \hat{\varepsilon},$$
 (8.1.1)

при которой случайный характер результата y обусловливается только ошибками  $\hat{\epsilon}$  при наблюдении данного результата.

2. Стохастическая зависимость от неслучайных факторов

$$\hat{y} = \hat{f}(x_1, x_2, ..., x_m), \tag{8.1.2}$$

при которой случайный характер результата y обусловливается стохастическим характером зависимости  $\hat{f}$  .

3. Функциональная зависимость от случайных факторов

$$\hat{y} = f(\hat{x}_1, \hat{x}_2, ..., \hat{x}_m), \tag{8.1.3}$$

при которой случайный характер результата у обусловливается случайным характером факторов.

4. Полная стохастическая зависимость

$$\hat{y} = \hat{f}(\hat{x}_1, \, \hat{x}_2, ..., \hat{x}_m). \tag{8.1.4}$$

Решение задачи анализа для зависимостей типа (8.1.1) и (8.1.3) опирается на метод наименьших квадратов, а для (8.1.2) и (8.1.4) — на методы регрессионного и корреляционного анализов.

### 8.2. Сущность метода наименьших квадратов

Метод наименьших квадратов (МНК) получил широкое распространение при обработке экспериментальных данных в целях исследования различных функциональных зависимостей, определения параметров распределений и т.д.

Существует широкий класс задач, в которых МНК является оптимальным методом обработки данных. В других классах задач использование МНК часто оправдывается алгоритмической простотой его реализации ценой небольших потерь в оптимальности получаемого результата. Для нелинейных задач статистического анализа данных зачастую невозможно использование каких-либо других методов, кроме МНК.

Эти и другие причины объясняют широкое распространение МНК при статистическом анализе экспериментальных данных, в частности, при выявлении функциональных зависимостей. Исторически МНК возник значительно раньше других методов обработки данных. Вероятностное обоснование МНК дано К. Гауссом в начале XIX в. и А.А. Марковым в начале XX в.

Предположим, что требуется определить компоненты вектора

$$A_{< k>} = (a_1, a_2, ..., a_k)^{\mathsf{T}},$$

который в общем случае не поддаётся непосредственному наблюдению. Однако можно наблюдать вектор

$$Y_{\langle n \rangle} = (y_1, y_2, ..., y_n)^{\mathsf{T}},$$

функционально связанный с искомым вектором  $A_{< k}$ :

$$Y_{\langle n \rangle} = F_{\langle n \rangle}(t; A_{\langle k \rangle}).$$
 (8.2.1)

При этом соотношение размерностей векторов A и Y может быть произвольным. В частном случае A может быть скалярной величиной, а Y – вектором, и наоборот.

В общем случае вектор-функция F является нелинейной. Схема оценивания, в которой по наблюдениям в некоторые моменты времени  $t_i$ ,  $i=\overline{1,N}$  одного набора параметров (в данном случае компонентов вектора Y) необходимо оценить компоненты другого набора параметров (компоненты вектора A), функционально связанного с первым, называется схемой косвенных наблюдений.

Процесс наблюдения всегда сопровождается ошибками. Наблюдаемое значение функции (8.2.1) в момент времени  $t_i$  отклоняется от теоретического вследствие случайных факторов. Следовательно, результат наблюдения всегда представляет собой реализацию случайной величины. В общем случае ошибка наблюдения нелинейным образом связана с наблюдаемой функцией.

На практике часто удаётся путём линеаризации уравнений модели (8.2.1) относительно случайных ошибок свести уравнения к форме, когда случайные ошибки входят аддитивно или мультипликативно (см. §1.1). Однако наиболее простым и самым распространённым типом связи ошибок наблюдения и наблюдаемых величин является линейная аддитивная связь, когда модель наблюдения может быть представлена уравнениями

$$\hat{Y}_{\langle n \rangle_i} = F_{\langle n \rangle_i}(t_i; A_{\langle k \rangle}) + \hat{E}_{\langle n \rangle_i}, \quad i = \overline{1, N},$$
(8.2.2)

где  $\hat{\mathbf{E}}_i$  — вектор аддитивной ошибки в i-й момент наблюдения.

В дальнейшем будем рассматривать эту схему наблюдения. Уравнения типа (8.2.2) называются *уравнениями наблюдения*. Поскольку компоненты вектора  $\hat{\mathbf{E}}_i$  являются случайными неизвестными наблюдателю величинами, то для поиска оценок вектора  $A_{<\!k\!>}$  используется уравнение вида

$$\hat{Y}_{\langle n \rangle_i} = F_{\langle n \rangle_i}(t_i; A_{\langle k \rangle}), \qquad (8.2.3)$$

которое может оказаться и несовместным, поскольку отражает наблюдаемый процесс приближённо. Поэтому уравнение (8.2.3) принято называть *условным*.

Если моменты времени  $t_i$ ,  $i = \overline{1,N}$  представляют собой известные и в данной задаче фиксированные величины, то фактически векторфункция F является функцией только вектора A. Поэтому в дальнейшем в число аргументов будем включать моменты времени  $t_i$  тогда, когда они либо неизвестны, либо известны с ошибкой. С учётом сказанного уравнение наблюдения запишется в виде

$$\hat{Y}_{\langle n \rangle} = F_{\langle n \rangle}(A_{\langle k \rangle}) + \hat{E}_{\langle n \rangle}. \tag{8.2.4}$$

В соответствии с методом наименьших квадратов оценки компонентов вектора A отыскиваются на основе минимизации суммы квадратов отклонений между Y и F:

$$\hat{V}(\tilde{A}) = \min_{A \in \mathbf{R}^k} \{ (\hat{Y} - F(A))^{\mathsf{T}} (\hat{Y} - F(A)) \}, \tag{8.2.5}$$

где  $\widetilde{A}$  — вектор, представляющий собой решение задачи (8.2.5);  $\mathbf{R}^k$  — k-мерное вещественное пространство.

Часто вместо минимизации квадратичной функции (8.2.5) для оценивания вектора A используют минимизацию квадратичной функции более общего вида:

$$\hat{V}(\tilde{A}) = \min_{A \in \mathbf{R}^k} \{ (\hat{Y} - F(A))^{\mathsf{T}} Q_{[n]} (\hat{Y} - F(A)) \}, \tag{8.2.6}$$

где  $Q_{[n]}$  — неотрицательно определённая симметричная матрица, которая называется весовой.

Очевидно, что задача (8.2.5) является частным случаем задачи (8.2.6), если в качестве весовой выбрать единичную матрицу.

Показатель качества оценивания (8.2.5) в скалярной форме имеет вид

$$\hat{V}(\widetilde{A}) = \min_{A \in \mathbf{R}^k} \left\{ \left( \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - f_i(A))^2 \right) \right\}, \tag{8.2.7}$$

где  $\hat{y}_i$  и  $f_i$ ,  $i = \overline{1,n}$  — компоненты вектора Y и вектор-функции F соответственно.

Скалярная форма показателя (8.2.6):

$$\hat{V}(\tilde{A}) = \min_{A \in \mathbf{R}^k} \left\{ \left( \sum_{i,j=1}^n (\hat{y}_i - f_i(A)) q_{ij} (\hat{y}_j - f_j(A)) \right) \right\}, \tag{8.2.8}$$

Для сокращения записей, а также упрощения некоторых выкладок в последующем будем использовать в основном векторно-матричную запись показателя качества оценивания вектора A.

Необходимое условие минимума функции (8.2.5) или (8.2.6) состоит в том, что её частные производные по всем компонентам  $a_i$  вектора Aдолжны быть равны нулю:

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial a_i} = 0, \quad i = \overline{1, k}. \tag{8.2.9}$$

Развёрнутый вид условий (8.2.9) в скалярной форме представляется следующей системой уравнений:

$$\begin{cases}
\frac{\partial \hat{V}}{\partial a_{1}} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_{i} - f_{i}(a_{1}, a_{2}, ..., a_{k})) \frac{\partial f_{i}(a_{1}, a_{2}, ..., a_{k})}{\partial a_{1}} = 0 \\
\frac{\partial \hat{V}}{\partial a_{j}} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_{i} - f_{i}(a_{1}, a_{2}, ..., a_{k})) \frac{\partial f_{i}(a_{1}, a_{2}, ..., a_{k})}{\partial a_{j}} = 0 \\
\frac{\partial \hat{V}}{\partial a_{k}} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_{i} - f_{i}(a_{1}, a_{2}, ..., a_{k})) \frac{\partial f_{i}(a_{1}, a_{2}, ..., a_{k})}{\partial a_{n}} = 0
\end{cases} (8.2.10)$$

Система уравнений (8.2.10) в теории МНК называется системой **нормальных уравнений**. Её решение, т.е. вектор  $\widetilde{A}$  будем в дальнейшем называть МНК-оценкой.

<u>**П** р и м е р 8.1</u>. Требуется оценить скалярную величину a, для которой уравнение наблюдения имеет вид

$$\hat{y}_i = a + \hat{\varepsilon}_i, \quad i = \overline{1, n}.$$

ightharpoonup Предположим, что оценку параметра a необходимо отыскивать минимизацией суммы квадратов отклонений

$$\hat{V}(a) = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - a)^2$$
.

Тогда необходимое условие минимума этой суммы квадратов в соответствии с (8.2.9) запишется в виде

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - a) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a) = 0.$$

Оценка искомой величины

$$\widetilde{a} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \hat{y}_{i}.$$

Следует заметить, что при решении данной задачи обоснование выбора функции V(a) отсутствовало, хотя ранее в § 2.4 указывалось, что оптимальный выбор данной функции диктуется условиями задачи.

Замечание приведено в связи с тем, что в дальнейшем будет даваться и иное решение этой же задачи.

В общем случае система нормальных уравнений нелинейная относительно искомых параметров, а искомые параметры — компоненты вектора A — выражаются нелинейным образом через компоненты вектора наблюдения  $\hat{Y}$ .

# 8.3. Метод наименьших квадратов при линейной связи наблюдаемых и оцениваемых параметров

#### 8.3.1. Линейная модель наблюдения

Рассматриваемый ниже метод наименьших квадратов при линейной модели наблюдения получил название схемы Гаусса—Маркова.

Пусть наблюдаемые параметры и параметры искомой функциональной зависимости связаны линейным уравнением, а ошибки наблюдения аддитивны, причём имеют равные нулю математические ожидания:

$$\hat{Y}_{} = X_{[n:k]} A_{} + \hat{E}_{}, \tag{8.3.1}$$

$$M[\hat{E}_{< n>}] = 0,$$
 (8.3.2)

где  $X_{[n;k]}$  — прямоугольная матрица, называемая матрицей наблюдения;  $\hat{Y}_{< n>}$  и  $\hat{\mathbb{E}}_{< n>}$ , как и ранее, соответственно случайные векторы наблюдения и ошибок наблюдения.

На основании равенства (8.3.2) можно записать

$$M[\hat{Y}_{< n>}] = X_{[n:k]} A_{< k>}. \tag{8.3.3}$$

В модели Гаусса—Маркова предполагается, что относительно вектора  $\hat{E}$  известна некоторая дополнительная информация. Рассмотрим возможные варианты использования данной информации.

Один из наиболее простых случаев тот, когда известно, что наблюдения некоррелированы и равноточны. В этом варианте корреляционная матрица вектора  $\hat{E}$  или, что то же самое, вектора  $\hat{Y}$  выражается формулой

$$K_{\hat{\mathbf{E}}[n]} = \sigma^2 E_{[n]},$$
 (8.3.4)

где  $\sigma^2$  – дисперсия наблюдения;  $E_{[n]}$  – единичная матрица.

Дисперсия наблюдения может быть и неизвестной, тогда она подлежит оценке наряду с компонентами вектора A. При неизвестной дисперсии  $\sigma^2$  не представляется возможным получить какие-либо характеристики точности оценивания.

Более общим является случай, когда наблюдения коррелированны и равноточны, однако для них известна только нормированная корреляционная матрица  $G_{[n]}$ , а корреляционная матрица вектора  $\hat{E}$  имеет вид

$$K_{\hat{\mathbf{E}}[n]} = \sigma^2 G_{[n]},$$
 (8.3.5)

причём  $\sigma^2$  – в общем случае неизвестная дисперсия наблюдения.

Покажем, что модель наблюдения (8.3.3), (8.3.4) легко сводится к модели (8.3.3), (8.3.5). Из линейной алгебры известно, что любая симметричная положительно-определённая матрица (а матрица G является таковой) может быть представлена в виде

$$G_{[n]} = D_{[n]}D_{[n]}^{\mathsf{T}},$$
 (8.3.6)

где  $D_{[n]}$  – невырожденная матрица.

Произведём замену переменных по формуле

$$\hat{Z} = D^{-1}\hat{Y} \,, \tag{8.3.7}$$

тогда

$$\hat{Y} = D\hat{Z}$$
.

Корреляционная матрица вектора  $\hat{Z}$  вычисляется следующим образом:  $K_{\hat{Z}[n]} = M \Big( (\hat{Z} - M_{\hat{Z}}) (\hat{Z} - M_{\hat{Z}})^{\mathsf{T}} \Big) =$ 

$$K_{\hat{Z}[n]} = M \left( (Z - M_{\hat{Z}})(Z - M_{\hat{Z}})^{\mathsf{T}} \right) =$$

$$= M \left( D^{-1} (\hat{Y} - M_{\hat{Y}})(\hat{Y} - M_{\hat{Y}})^{\mathsf{T}} D^{-1\mathsf{T}} \right) =$$

$$= D^{-1} K_{\hat{E}} D^{-1\mathsf{T}} = \sigma^{2} D^{-1} D D^{\mathsf{T}} D^{-1\mathsf{T}} = \sigma^{2} E_{[n]}.$$

Получили выражение, аналогичное выражению (8.3.4). Условное уравнение (8.3.3) с учётом (8.3.7) приобретает вид

$$M_{\hat{Z}} = D^{-1}XA = \overline{X}A.$$

Таким образом, модель наблюдения (8.3.3), (8.3.5) с помощью невырожденного линейного преобразования сводится к соотношениям

$$\hat{Z} = \overline{X}A + \hat{E}$$
,  $M[\hat{E}] = 0$ ,  $K_{\hat{E}} = \sigma^2 E$ .

Это и есть исходная модель наблюдения.

Если наблюдения коррелированы и неравноточны, то корреляционная матрица ошибок наблюдения

$$K_{\hat{\mathbf{E}}[n]} = R_{[n]}, \tag{8.3.8}$$

где  $R_{[n]}$  — известная симметричная положительно-определённая матрица, которая, как и матрица G в формуле (8.3.5), может быть представлена в виде произведения двух невырожденных квадратных матриц аналогично равенству (8.3.6). Это означает, что преобразованием, аналогичным преобразованию (8.3.7), модель наблюдения (8.3.3), (8.3.8) сводится к исходной модели.

По этим причинам в данном подразделе детально рассматривается только наиболее простая модель наблюдения (8.3.3), (8.3.4), а в конце его с помощью преобразования типа (8.3.6) получаются аналогичные результаты для схем наблюдения с корреляционными матрицами ошибок (8.3.5) и (8.3.8).

## 8.3.2. Нормальные уравнения и оценки наименьших квадратов

Для линейной модели наблюдения (8.3.1) квадратичная функция (8.2.6), при минимизации которой отыскиваются оценки компонентов вектора A, будет иметь вид

$$\hat{V} = (\hat{Y} - XA)^{\mathsf{T}} Q(\hat{Y} - XA),$$
 (8.3.9)

а нормальные уравнения (8.2.9) – вид

$$X^{\mathsf{T}}QXA - X^{\mathsf{T}}QY = 0.$$
 (8.3.10)

Можно показать, что система нормальных уравнений (8.3.10) всегда совместна [10]. Будем считать, что матрица X имеет ранг k (предполагается, что  $n \ge k$ ), а матрица весов Q — невырожденная. Тогда матрица  $X^{\mathsf{T}}QX$  будет невырожденной, а потому из равенства (8.3.10) можно получить выражение для оценки вектора A:

$$\widetilde{A} = (X^{\mathsf{T}}QX)^{-1}X^{\mathsf{T}}Q\widehat{Y}. \tag{8.3.11}$$

Если весовая матрица единичная (Q = E), то вместо соотношения (8.3.11) получим равенство

$$\tilde{A} = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}\hat{Y}.$$
 (8.3.12)

Если относительно вектора ошибок ничего не известно, то ничего нельзя сказать и о свойствах оценок (8.3.11) или (8.3.12). Если же соот-

ношение (8.3.2) выполняется, то оценки (8.3.11), (8.3.12) являются несмещёнными. Действительно

$$\begin{split} M_{\widetilde{A}} &= M[(X^{\mathsf{T}}QX)^{-1}X^{\mathsf{T}}Q\hat{Y}] = M[(X^{\mathsf{T}}QX)^{-1}X^{\mathsf{T}}Q(XA + \hat{\mathbf{E}})] = \\ &= M[(X^{\mathsf{T}}QX)^{-1}(X^{\mathsf{T}}QX)A] + M[(X^{\mathsf{T}}QX)^{-1}X^{\mathsf{T}}Q\hat{\mathbf{E}})] = \\ &= M_A + (X^{\mathsf{T}}QX)^{-1}X^{\mathsf{T}}QM_{\hat{\mathbf{E}}} = M_A = A, \end{split}$$

поскольку  $M_{\hat{E}} = 0$ .

Пусть корреляционная матрица вектора ошибок наблюдений имеет вид (8.3.4). Вычислим корреляционную матрицу вектора оценок  $\widetilde{A}$  . Обозначим

$$X^{\mathsf{T}}QX = S_{[n]}; \quad (X^{\mathsf{T}}QX)^{-1} = C_{[n]}.$$

В этих обозначениях формула для МНК-оценки (8.3.11) перепишется в виде

$$\widetilde{A} = CX^{\mathsf{T}}Q\widehat{Y} = C\widehat{Z},$$

где  $\hat{Z} = X^{\mathsf{T}} Q \hat{Y}$ .

Тогда корреляционная матрица вектора оценок  $\widetilde{A}$  вычисляется по формуле

$$K_{\tilde{A}[k]} = M[(CX^{\mathsf{T}}Q\hat{Y} - CX^{\mathsf{T}}QM_{\hat{Y}})(CX^{\mathsf{T}}Q\hat{Y} - CX^{\mathsf{T}}QM_{\hat{Y}})^{\mathsf{T}}] =$$

$$= CX^{\mathsf{T}}QM[(\hat{Y} - M_{\hat{Y}})(\hat{Y} - M_{\hat{Y}})^{\mathsf{T}}]Q^{\mathsf{T}}XC^{\mathsf{T}} =$$

$$= CX^{\mathsf{T}}QK_{\hat{Y}[n]}Q^{\mathsf{T}}XC^{\mathsf{T}} = \sigma^{2}CX^{\mathsf{T}}QQ^{\mathsf{T}}XC^{\mathsf{T}}.$$
(8.3.13)

В процессе преобразований в выражении (8.3.13) учтено, что

$$(CX^{\mathsf{T}}Q)^{\mathsf{T}} = Q^{\mathsf{T}}XC^{\mathsf{T}}, \quad K_{\hat{Y}[n]} = \sigma^2 E_{[n]}.$$

Если Q = E, то

$$K_{\widetilde{A}[k]} = \sigma^2 (X^{\mathsf{T}} X)^{-1} X^{\mathsf{T}} X (X^{\mathsf{T}} X)^{-1} = \sigma^2 (X^{\mathsf{T}} X)^{-1} = \sigma^2 C. \quad (8.3.14)$$

На практике наиболее часто используется вариант МНК-оценивания, при котором в качестве весовой матрицы Q выбирается матрица  $K_{\hat{Y}}^{-1}$ , поскольку в таком случае МНК-оценка получается эффективной. Доказательство этого факта можно найти, например, в [10]. Для такого варианта корреляционная матрица оценки вычисляется по формуле

$$K_{\widetilde{A}} = (X^{\mathsf{T}} K_{\widehat{Y}}^{-1} X)^{-1},$$

которая при  $K_{\hat{Y}} = \sigma^2 E$  совпадает с выражением (8.3.14).

Когда величина  $\sigma^2$  известна, формулы (8.3.13), (8.3.14) позволяют отыскать корреляционную матрицу вектора  $\widetilde{A}$ . Из данных формул следует, что даже при некоррелированных равноточных наблюдениях компоненты вектора оценок оказываются коррелированными. Для их некорре-

лированности необходима ещё ортогональность столбцов матрицы наблюдений X (при Q = E) или столбцов матрицы  $CX^{\mathsf{T}}Q$  в общем случае.

Если дисперсия наблюдений  $\sigma^2$  неизвестна, её необходимо оценить наряду с компонентами вектора A, иначе невозможно отыскать корреляционную матрицу вектора  $\widetilde{A}$ , которая даёт характеристики точности оценивания.

Покажем, каким образом можно получить оценку величины  $\sigma^2$ . В математической статистике доказывается, что остаточная сумма квадратов

$$\hat{V}(\tilde{A}) = (\hat{Y} - X\tilde{A})^{\mathsf{T}} (\hat{Y} - X\tilde{A}) \tag{8.3.15}$$

 $(\tilde{A}-\text{MHK}$ -оценка при линейной модели наблюдения) имеет закон распределения  $\sigma^2\chi^2_{n-k}$ , если вектор ошибок наблюдения  $\hat{E}$  характеризуется корреляционной матрицей  $\sigma^2E$  (n – размерность вектора  $\hat{Y}$ , k – число оцениваемых параметров).

В скалярной форме выражение (8.3.15) имеет вид

$$V(\widetilde{a}_1, \ \widetilde{a}_2, ..., \widetilde{a}_k) = \sum_{i=1}^n \left( y_i - \sum_{j=1}^k x_{ij} \widetilde{a}_j \right)^2.$$

На основании свойств  $\sigma^2\chi^2_{n-k}$  - распределения получается, что

$$M[V(\widetilde{A})] = (n-k)\sigma^2$$
,

а потому оценку для величины  $\sigma^2$  можно приближённо вычислять по формуле

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{V(\tilde{A})}{n-k} \,. \tag{8.3.16}$$

Отметим, что это оценка несмещённая.

Без доказательства укажем, что МНК-оценки не всегда получаются эффективными. Ранее уже отмечалось со ссылкой на работу [10], что свойством эффективности обладают МНК-оценки для моделей наблюдения (8.3.3), (8.3.4) при Q = E, (8.3.3), (8.3.5) при  $Q = G^{-1}$  и (8.3.3), (8.3.8) при  $Q = R^{-1}$ . Это следует, в частности, для нормального распределения вектора ошибок  $\hat{E}$  из эффективности оценок, получаемых по методу максимального правдоподобия, поскольку МНК и ММП-оценки совпадают при указанном способе выбора весовых матриц. При всех остальных способах выбора матрицы весов МНК-оценки неэффективны. Однако это не означает, что варианты выбора матрицы весов Q, приводящие к неэффективным оценкам, нецелесообразны. Различные соображения могут привести к выбору матрицы весов в другой форме.

<u>Пример 8.2.</u> Известно, что величина a – постоянная, схема оценивания имеет вид

$$\hat{y}_i = a + \hat{\varepsilon}_i, \quad i = \overline{1, n},$$

где  $\hat{y}_i$  — наблюдаемая величина,  $\hat{\epsilon}_i$  — ошибка наблюдения. Требуется по результатам наблюдения определить оценку величины a с использованием МНК, а также получить характеристики точности оценивания при известных моментных характеристиках ошибки  $\hat{\epsilon}_i$ :

$$M[\hat{\varepsilon}_i] = 0$$
,  $M[\hat{\varepsilon}_i^2] = \sigma^2$ ,  $i = \overline{1, n}$ .

Данная задача совпадает с задачей из примера 8.1, однако там ничего не говорилось о статистических свойствах ошибок измерения  $\hat{\epsilon}_i$ .

lacktriangle Случайную величину  $\hat{y}$  представим в виде вектора

$$\hat{Y} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, ..., \hat{y}_n)^{\mathsf{T}}.$$

Роль вектора оцениваемых параметров играет скалярная величина a, т.е. k=1. Поэтому матрица X, имеющая размерность  $n \times k$ , представляет собой вектор-столбец, состоящий из единиц:

$$X = (1, 1, ..., 1)^{\mathsf{T}}$$

В качестве матрицы весов Q выбираем единичную матрицу  $E_{[n]}$ . МНК-оценку скалярной величины a вычисляем по формуле (8.3.12). Предварительно найдём матрицы  $(X^{\mathsf{T}}X)^{-1}$  и  $X^{\mathsf{T}}Y$ :

$$X^{\mathsf{T}}X = (1, 1, ..., 1)(1, 1, ..., 1)^{\mathsf{T}} = n;$$
  
 $(X^{\mathsf{T}}X)^{-1} = \frac{1}{n};$ 

$$X^{\mathsf{T}}Y = (1, 1, ..., 1)(\hat{y}_1, \hat{y}_2, ..., \hat{y}_n)^{\mathsf{T}} = \sum_{i=1}^n \hat{y}_i.$$

Окончательно получим

$$\tilde{a} = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}\hat{Y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{y}_{i}.$$

Заметим, что решение совпадает с полученным в примере 8.1.

Эта оценка является несмещённой и эффективной. Определим точность оценки  $\tilde{a}$  . На основании формулы (8.3.14) получим

$$C = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1} = \frac{1}{n},$$

$$K_{\tilde{a}} = \frac{\sigma^2}{n}.$$
(8.3.17)

Если бы величина  $\sigma^2$  не была априори известной, то её оценку можно было бы получить на основании формулы (8.3.16):

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \tilde{a})^2}{n-1}.$$

Затем можно найти дисперсию оценки  $K_{\tilde{a}}$  по формуле (8.3.17) с заменой  $\sigma^2$  на  $\tilde{\sigma}^2$ .

Данный пример фактически указывает, каким образом следует оценивать математическое ожидание случайной величины и каковы при этом точечные характеристики этих оценок. Напомним, что ранее тот же результат для оценки математического ожидания был получен с помощью предельных теорем.

<u>Примере 8.3.</u> Рассмотрим задачу, аналогичную приведённой в примере 8.2, с тем отличием, что независимые измерения величины a производятся с различной от эксперимента к эксперименту точностью, которая характеризуется дисперсией  $\sigma_i^2$ ,  $i = \overline{1, n}$ .

▼ Итак, имеем схему неравноточных наблюдений:

$$\hat{y}_i = a + \hat{\varepsilon}_i; \quad \hat{Y}_{\langle n \rangle} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, ..., \hat{y}_n)^{\mathsf{T}}; \quad diagK_{\hat{Y}[n]} = (\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_n^2).$$

Корреляционная матрица  $K_{\hat{Y}}$  взята в диагональной форму в силу независимости измерений.

Данную задачу сводим к предыдущей, используя преобразования (8.3.6), (8.3.7). При этом

$$K_{\hat{Y}[n]} = D_{[n]}D_{[n]}^\mathsf{T},$$

где D – диагональная матрица с диагональю

$$diagD_{[n]} = (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n).$$

Тогда формула (8.3.7) приводит к новому вектору

$$\hat{Z} = D^{-1}\hat{Y} = \left(\frac{\hat{y}_1}{\sigma_1}, \frac{\hat{y}_2}{\sigma_2}, ..., \frac{\hat{y}_n}{\sigma_n}\right)^{\mathsf{T}}.$$

Легко убедиться, что корреляционная матрица вектора  $\hat{Z}$  получается при этом единичной, а задача сводится к предыдущей. Уравнение (8.3.3) записывается в виде

$$\hat{Z} = D^{-1}XA = \overline{X}A,$$

где 
$$\overline{X} = D^{-1}X = \left(\frac{1}{\sigma_1}, \frac{1}{\sigma_2}, \dots, \frac{1}{\sigma_n}\right)^{\mathsf{T}}.$$

Далее находим, как и в примере 8.2:

$$\overline{X}^{\mathsf{T}} \overline{X} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}}; \quad (\overline{X}^{\mathsf{T}} \overline{X})^{-1} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}}}; \quad \overline{X}^{\mathsf{T}} \hat{Z} = \overline{X}^{\mathsf{T}} D^{-1} \hat{Y} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\hat{y}_{i}}{\sigma_{i}^{2}};$$

$$\widetilde{a} = (\overline{X}^{\mathsf{T}} \overline{X})^{-1} \overline{X}^{\mathsf{T}} \hat{Z} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{i}^{2}}} \sum_{j=1}^{n} \frac{\hat{y}_{j}}{\sigma_{j}^{2}}.$$

Данная оценка является несмещённой и эффективной, причём

$$K_{\widetilde{a}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2}}.$$

Сравнивая полученное решение с решением задачи 8.1 или 8.2, видим, что учёт неравноточности измерений приводит к иному решению. Возвращаясь к замечанию, указанному в примере 8.1, можно опять же подчеркнуть, что учёт статистических свойств ошибок измерений приводит к необходимости иного выбора функции V(a), чем это было сделано в примере 8.1 или 8.2.