УДК 519.2

Савкіна М. Ю.[1], к.ф.-м.н.,с.н.с.

Оцінювання параметрів лінійної регресійної моделі неповного рангу

[1]Інститут математики НАН України, 01601, м. Київ, вул. Терещенківська, 3,
e-mail: marta@imath.kiev.ua

M.Yu.Savkina[1],PhD.,Senior Scientific Researcher

Estimation of parameters of linear regression model of incomplete grade

[1] Institute of mathematics of NASU, 01601, Kyiv,Tereschenkovskaya street, 3,
e-mail:marta@imath.kiev.ua

Розглядається модель лінійної регресії, матриця плану якої має неповний ранг. Ранг матриці плану r на одиницю менше кількості факторних змінних в моделі. Знайдено зв'язок між оцінкою невідомих параметрів такої моделі, отриманої за допомогою метода ідентифікуючих обмежень, та оцінкою, отриманою завдяки зведенню вихідної моделі до моделі повного рангу.

Ключові слова: матриця плану, модель неповного рангу, ідентифікуючі обмеження.

The linear regression model, the matrix of plan of which has an incomplete grade, is examined. Grade of matrix of plan r is on unit less amount of factor variables in the model. Connection is found between estimation of unknown parameters of such model, got by method of identifying limitations, and estimation, got due to bringing of initial model to model of complete grade. First estimation - vector of order r, second -vector of order r-1.

More precisely, a transition matrix from one vector to other is found. This matrix has dimension $r\times(r-1)$, it is sum of two matrices. First $r-1$ lines of the first matrix form a single matrix, last line is zeroline. The second matrix is the product of a column vector to a row vector and a certain number.First $r-1$ elements of the column vector are coefficients of decomposition of r-th factor variable for other, last element is equal to minus one. The row vector consists from first $r-1$ coefficients of identifying limitation. The number is the difference between the last coefficient of identifying limitation and number obtained by multiplying the above-mentioned row vector to the above-mentioned column vector.

Keywords: matrix of plan, model of incomplete grade, identifying limitations.

Статтю представив д.т.н.,проф. Кудін В.І.

Розглянемо модель лінійної регресії

$$\vec{y} = X\vec{\beta} + \vec{\varepsilon},$$

де $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$- відклик,

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix} -$$

регресійна матриця розміру $n\times m$ $(n \ge m)$, j-й стовпець якої $-n$ спостережень регресора x_j , $\vec{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)^T$ –вектор випадкових відхилень, $\vec{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)^T$- вектор невідомих параметрів, який підлягає оцінюванню.

В класичній регресії передбачається, що $rang\, X = m$, тобто стовпці матриці X лінійно незалежні.

Поширенішим методом оцінювання невідомих параметрів в регресійному аналізі є метод найменших квадратів (МНК), який полягає в мінімізації суми

$$\sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j^2$$

відносно вектора $\vec{\beta}$.Для знаходження оцінки $\vec{\beta}$ маємо систему нормальних рівнянь [1]

$$X^T X\vec{b} = X^T\vec{y}, \qquad (1)$$

єдиний розв'язок якої

$$\vec{b} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y},$$

а мінімальне значення $\sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j^2$, яке називається залишковою сумою квадратів, дорівнює $\vec{y}^T\vec{y} - \vec{b}^T X^T X\vec{b}$. Вектор $\vec{b} = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$ називається оцінкою МНК вектора $\vec{\beta}$.

Але в деяких випадках буває, що $rang\, X = r$ $(r < m)$(наприклад, при плануванні експерименту елементи матриці вибирають рівними тільки нулю та одиниці, при цьому стовпці матриці можуть виявитися лінійно залежними). Система нормальних рівнянь (1) в цьому випадку має ціле сімейство розв'язків, а величина $\sum_{j=1}^{n}\varepsilon_j^2$досягає мінімума при $\vec{\beta}=\vec{b}$, де $\vec{b}$-будь-який з розв'язків системи (1), причому длякожного ненульового вектора $\vec{y}$ значення $\vec{y}^T\vec{y}-\vec{b}^T X^T\vec{y}$ єдине.

Одним з методів відшукання розв'язку системи у випадку, коли матриця плану маєнеповнийранг, є метод ідентифікуючих обмежень.

Нехай

$$H=\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1m}\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ h_{m-r,1} & h_{m-r,2} & \dots & h_{m-r,m}\end{pmatrix}$$

матриця розміру $(m-r)\times m$ така, що матриця

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1m}\\ \cdot & \cdot & \cdot\\ x_{n1} & \dots & x_{nm}\\ h_{11} & \dots & h_{1m}\\ \cdot & \cdot & \cdot\\ h_{m-r,1} & \dots & h_{m-r,m}\end{pmatrix}$$

має ранг m.

Метод ідентифікуючих обмежень полягає в введенні сукупності обмежень вигляду

$$H\vec{\beta}=\vec{\theta}, \qquad (2)$$

яка дозволяє запобігти невизначеності при відшуканні розв'язку системи (1).

Розглянемо випадок, коли $r=m-1$. Матрицю X без обмеження узагальненості можна подати у вигляді

$$X=\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{1i}\\ x_{21} & \dots & x_{2,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{2i}\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ x_{n1} & \dots & x_{n,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{ni}\end{pmatrix},$$

де $\alpha_1,\dots,\alpha_{m-1}$- деякі сталі, а сукупність обмежень (2) перетворюється на

$$h_{11}\beta_1+\dots+h_{1m}\beta_m=0. \qquad (3)$$

Інший метод відшукання розв'язку системи (1) у випадку, коли матриця плану має неповний ранг, полягає в зведенні вихідної моделі до моделі повного рангу.

Позначимо

$$\vec{b}^{(-)}=\left(\overline{X}^T\overline{X}\right)^{-1}\overline{X}^T\vec{y},$$

де

$$\overline{X}=\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1,m-1}\\ x_{21} & \dots & x_{2,m-1}\\ \cdot & \cdot & \cdot\\ x_{n1} & \dots & x_{n,m-1}\end{pmatrix}.$$

При цьому

$$X=\overline{X}I^{(\alpha)}, \qquad (4)$$

де

$$I^{(\alpha)}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & \alpha_1\\ 0 & 1 & \dots & 0 & \alpha_2\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ 0 & 0 & \dots & 1 & \alpha_{m-1}\end{pmatrix}.$$

Використовуючи факторізацію (4), можна подати $X\vec{\beta}$ у вигляді$X\vec{\beta}=\overline{X}I^{(\alpha)}\vec{\beta}=\overline{X}\vec{\beta}^{(-)}$. Нехай $\vec{b}^{(H)}=\left(b_1^{(H)},b_2^{(H)},\dots,b_m^{(H)}\right)^T$ – оцінка МНК вектора$\vec{\beta}$принаявності обмежень (3). Наступна теорема дає зв'язок між оцінками $\vec{\beta}^{(-)}$ та $\vec{b}^{(H)}$.

Теорема. Нехай

$$\vec{\alpha}^{(1)}=(\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_{m-1},-1)^T;$$

$$\vec{h}_m=\left(h_{11},h_{12},\dots,h_{1,m-1}\right)^T;$$

$$s=h_{1m}-\alpha_1h_{11}-\dots-\alpha_{m-1}h_{1,m-1};$$

$I_{m-1}^{(0)}$ – матриця порядку $m\times(m-1)$, перші $m-1$ строк якої утворюють одиничну матрицю, остання строка –нульова.

Тоді

$$\vec{b}^{(H)}=\left(I_{m-1}^{(0)}+s^{-1}\vec{\alpha}^{(1)}\vec{h}_m^T\right)\vec{b}^{(-)}. \qquad (5)$$

Доведення. Згідно з [1] оцінку невідомого вектора $\vec{\beta}$ при наявності обмежень (3) можна знайти як розв'язок системи рівнянь

$$G^TG\vec{b}^{(H)}=X^T\vec{y},$$

де

$$G=\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{1i}\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ x_{n,1} & \dots & x_{n,m-1} & \sum_{i=1}^{m-1}\alpha_i x_{ni}\\ h_{11} & \dots & h_{1,m-1} & h_{1m}\end{pmatrix}.$$

За правилом Крамера маємо

$$b_j^{(H)}=\frac{\Delta_j}{\Delta}, \qquad j=1,\dots,m, \quad (6)$$

де $\Delta = \det G^T G$, Δ_j - визначник матриці , яка утворена з матриці $G^T G$ заміною j-го стовпця на стовпець вільних членів$X^T \vec{y}$.
Таким чином, маємо

$$G^T G = \begin{pmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1,m-1} & g_{1m} \\ . & . & . & . \\ g_{m-1,1} & \cdots & g_{m-1,m-1} & g_{m-1,m} \\ g_{m1} & \cdots & g_{m,m-1} & g_{mm} \end{pmatrix},$$

де

$$g_{11} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1}^2 + h_{11}^2 \quad , \dots ,$$

$$g_{1,m-1} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1} x_{i,m-1} + h_{11} h_{1,m-1},$$

$$g_{1m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{11} h_{1m} ,$$

$$\dots ,$$

$$g_{m-1,1} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} x_{i1} + h_{1,m-1} h_{11} ,$$

$$\dots , g_{m-1,m-1} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1}^2 + h_{m-1,m-1}^2,$$

$$g_{m-1,m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{m-1,1} h_{1m} ,$$

$$g_{1m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{11} h_{1m} \ , \dots,$$

$$g_{m-1,m} = \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} + h_{m-1,1} h_{1m} ,$$

$$g_{mm} = \left(\sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} \right)^2 + h_{1m}^2.$$

Позначимо $D = \overline{X}^T \overline{X}$, тобто

$$D = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_{i1}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_{i1} x_{i,m-1} \\ . & . & . \\ \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1} x_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_{i,m-1}^2 \end{pmatrix}.$$

За допомогою перетворень над рядками та стовпцями матриці $\mathrm{G^T G}$, які не змінюють значення визначника, отримаємо

$$\Delta = \mathrm{s}^2 \widetilde{\Delta} , \tag{7}$$

де $\widetilde{\Delta} = \det \mathrm{D}$.

Далі, згідно теоремі Лапласа про розкладання визначника по елементах рядка або стовпця маємо

$$\Delta_j = \Delta'_{1j} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \Delta'_{m-1,j} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1} + \\ + \Delta'_{mj} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k x_{ik} \right), \tag{8}$$

$$j = 1, \dots , m,$$

де $\Delta'_{1j}, \dots , \Delta'_{mj}$ – алгебраїчні доповнення до елементів $g_{1j}, \dots , g_{mj}$матриці $G^T G$ відповідно.

Перепишемо (8) у вигляді

$$\Delta_j = \left(\Delta'_{1j} + \alpha_1 \Delta'_{mj} \right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + \\ + \left(\Delta'_{m-1,j} + \alpha_{m-1} \Delta'_{mj} \right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1} , \tag{9}$$

$$j = 1, \dots , m.$$

Позначимо

$$\vec{h}_1 = \begin{pmatrix} s + \alpha_1 h_{11} \\ \alpha_1 h_{12} \\ \vdots \\ \alpha_1 h_{1,m-1} \end{pmatrix},$$

$$\vec{h}_j = \begin{pmatrix} \alpha_j h_{11} \\ \vdots \\ \alpha_j h_{1,j-1} \\ s + \alpha_1 h_{1j} \\ \alpha_j h_{1,j+1} \\ \vdots \\ \alpha_j h_{1,m-1} \end{pmatrix}, j = 2, \dots , m-2,$$

$$\vec{h}_{m-1} = \begin{pmatrix} \alpha_{m-1} h_{11} \\ \vdots \\ \alpha_{m-1} h_{1,m-2} \\ s + \alpha_1 h_{1,m-1} \end{pmatrix}.$$

Розглянемо сімейство матриць $\{D_{jk}, j = 1, \dots , m, k = 1, \dots , m-1\}$, в якому матриця D_{jk} утворена з матриці D таким чином, що замість k-го стовпця стоїть стовпець $\vec{h}_j$.

За допомогою перетворень над рядками та стовпцями матриці, які не змінюють значення визначника, отримаємо

$$\Delta'_{kj} + \alpha_k \Delta'_{mj} = s\det D_{jk}, \quad j = 1, \dots, m-1, k = 1, \dots, m, \tag{10}$$

$$\Delta'_{km} + \alpha_k \Delta'_{mm} = -s \det D_{mk}, \tag{11}$$

Підставляємо (10) та (11) в (9); отримаємо

$$\Delta_j = s\left[\det D_{j1} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + \det D_{j,m-1} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1}\right], \tag{12}$$
$$j = 1, \dots, m.$$

Далі,

$$\det D_{jk} = s \det D_{jk}^{(0)} + \alpha_j \det D_{mk}, \quad j = 1, \dots, m-1, \tag{13}$$

де $D_{jk}^{(0)}$ - матриця, яка утворена з матриці D таким чином, що замість j-го стовпця стоїть j-й стовпець одиничної матриці.

З (6), (7), (12) та (13) маємо

$$b_j^{(H)} == s^{-1}\left[\left(s\, z_{j1}^{(0)} + \alpha_j z_1\right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + \left(s\, z_{j,m-1}^{(0)} + \alpha_j z_{m-1}\right) \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1}\right], \tag{14}$$
$$j = 1, \dots, m-1,$$

$$b_m^{(H)} = s^{-1}\left[z_1 \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i1} + \dots + z_{m-1} \sum_{i=1}^{n} y_i x_{i,m-1}\right], \tag{15}$$

де
$z_{j1}^{(0)}, j = 1, \dots, m-1, k = 1, \dots, m-1,$- елементиматриці$D^{-1}$,
$\vec{z}^{(H)} = (z_1, \dots, z_{m-1})^T$ - розв'язок системи рівнянь $D\vec{z} = \vec{h}_m$.

Далі, з (14) та (15) отримаємо

$$\vec{b}^{(H)} = \left(I_{m-1}^{(0)}\, D^{-1} + s^{-1}\vec{\alpha}\left(\vec{z}^{(H)}\right)^T\right)\overline{X}\vec{y} = \left(I_{m-1}^{(0)} D^{-1} + s^{-1}\vec{\alpha}\left(D^{-1}\vec{h}_m\right)^T\right)\overline{X}\vec{y} = \left(I_{m-1}^{(0)} + s^{-1}\vec{\alpha}^{(0)}\vec{h}_m^T\right) D^{-1}\overline{X}\vec{y}. \tag{16}$$

Враховуючи $D = \overline{X}^T\overline{X}$ маємо

$$\vec{b}^{(-)} = D^{-1}\overline{X}\vec{y},$$

тобто з (16) отримаємо (5) .

Теорему доведено.

Список використаних джерел

1. *Себер Дж.* Линейный регрессионный анализ /Себер Дж.– Москва: Мир, 1980. – 336 с.
2. *Курош А.Г.* Курс высшей алгебры. /Курош А.Г. – Москва: Наука, 1971. – 432 с.

References

1. SEBER G. (1980) Linear regression analysis. Moscow: Mir.
2. KUROSH A.G. (1971) Course of higher algebra. Moscow: Nauka.

Надійшла до редколегії 17.04.2014.