УДК 519.233.2+681.5
DOI: https://doi.org/10.17721/1812-5409.2025/2.31

Олександр СЛАБОСПИЦЬКИЙ, канд. фіз.-мат. наук, доц.
ORCID ID: 0009-0007-8753-2075
e-mail: alexsl@knu.ua
Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ ВІДНОСНИХ ПОХИБОК ДЛЯ ОЦІНЮВАННЯ ПАРАМЕТРІВ СИСТЕМ ЗА НЕКЛАСИЧНИХ ПРИПУЩЕНЬ

Розглянуто задачу оптимального оцінювання параметрів регресійної моделі за доступними спостереженнями залежної змінної й усіх регресорів. Запропоновано для розв'язання цієї проблеми використовувати метод найменших квадратів відносних похибок. Оцінка цього методу – це точка, у якій досягає свого мінімуму сума квадратів відносних похибок регресійної моделі, а не сума квадратів абсолютних похибок моделі, як у звичайному методі найменших квадратів, який можна назвати методом найменших квадратів абсолютних похибок. Значення функціонала якості розглянутого методу вже не залежить від одиниць виміру доступних спостережень.

У роботі явна форма представлення оптимальної оцінки методу найменших квадратів відносних похибок у ситуації, коли справедливо класичне припущення, що гарантує її єдиність, поширена на випадок, коли це припущення порушено й оцінка вже не є єдиною. В останній ситуації виникає потреба у використанні оператора псевдообернення матриць за Муром – Пенроузом. Також для обох випадків представлені відповідні явні вирази для похибки оцінювання цим методом.

Крім цього, як наслідок для зваженого методу найменших квадратів, у випадку використання як вагової матриці довільної позитивно визначеної матриці, для обох згаданих ситуацій за аналогією також наведено явні форми представлення відповідної оптимальної оцінки цього методу та виразу для похибки оцінювання.

Ключові слова: ***регресійна модель, оцінювання параметрів, некласичне припущення, оператор псевдообернення за Муром – Пенроузом, метод найменших квадратів, зважений метод найменших квадратів, метод найменших квадратів відносних похибок.***

Класифікація відповідно до AMS 2020: 93E24, 62H12.

Вступ

Ефективне дослідження різних складних класів систем важко уявити без конструювання для них відповідних адекватних математичних моделей. Причому, якщо маємо справу із задачею ідентифікації об'єкта у вузькому розумінні, то доступна інформація про математичну модель буде відома з точністю до деяких невідомих параметрів, тобто проблема конструювання потрібної моделі зводиться до розв'язання задачі знаходження оцінок цих параметрів моделі, оптимальних у деякому розумінні.

Один із поширених підходів до розв'язання згаданої проблеми ідентифікації параметрів математичної моделі полягає у використанні відомого методу найменших квадратів (МНК) (Gauss, 1809; Legendre, 1805). Оцінка МНК була досліджена як у ситуації справедливості класичного припущення, що гарантує її єдиність, так і в ситуації його можливого порушення (Albert, 1972; Björck, 1996; Hansen et al., 2013; Rao et al., 2008; Weisberg, 2014). В останній ситуації виникає потреба звернутися до використання оператора псевдообернення за Муром – Пенроузом (Moore, 1920; Penrose, 1955).

Відомо, що оцінкою звичайного МНК є точка, у якій досягає свого мінімуму сума квадратів похибок моделі, точніше сума квадратів абсолютних похибок моделі. У подальших модифікаціях МНК перейшли до мінімізації квадратичних форм від вектора абсолютних похибок моделі з ваговими позитивно визначеними матрицями спеціальної структури (Rao et al., 2008; Weisberg, 2014).

У представленій роботі запропоновано для оцінки параметрів регресійної моделі використовувати МНК відносних похибок (Chengsi, 2001; Tofallis, 2008), оптимальна оцінка якого мінімізує суму квадратів відносних похибок моделі на відміну від оцінки звичайного МНК, що базується на мінімізації суми квадратів абсолютних похибок моделі. У публікаціях (Chengsi, 2001; Tofallis, 2008) для цієї моделі оцінка МНК відносних похибок аналізується тільки у випадку, коли справедливо класичне припущення, що гарантує її єдиність. У дослідженні цей результат поширено на випадок, коли це класичне припущення може бути порушено. Також для обох випадків представлені необхідні вирази для похибок оцінювання МНК відносних похибок.

Як наслідок, за аналогією, наведені відповідні результати у всіх згаданих випадках для оцінки зваженого методу найменших квадратів (ЗМНК) з довільною позитивно визначеною ваговою матрицею.

1. Основні результати

Розглянемо задачу знаходження оцінки вектора невідомих стаціонарних параметрів α для регресійної моделі

$$y(k) = x^T(k)\alpha + e(k), \quad k = \overline{1,N}, \tag{1}$$

де $y(k)$ – відомі скалярні спостереження над залежною змінною, $x(k)$ – доступні вектори регресорів, $\alpha \in \mathbb{R}^p$, $e(k)$ – похибки моделі.

Необхідно за отриманими вимірами $\{y(k), x(k)\}_{k=1}^{N}$ знайти оптимальну оцінку вектора параметрів α системи (1). Оптимальність будемо розуміти як у роботах (Chengsi, 2001; Tofallis, 2008).

Означення. Нехай для об'єкта (1) справедливо $y(k) \neq 0, \quad k = \overline{1, N}$. Оцінкою вектора невідомих параметрів α для системи (1) методом найменших квадратів відносних похибок є оцінка $\hat{\alpha}$, на якій досягається мінімум такого функціонала

$$Q(\alpha) = \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{e(k)}{y(k)} \right)^2 . \tag{2}$$

Потрібно підкреслити інваріантність значення критерію оптимальності (2) відносно одиниць виміру доступних спостережень $\{y(k), x(k)\}_{k=1}^{N}$.

Перепишемо систему рівнянь (1) у матричному вигляді

$$y = X\alpha + e ,$$

де

$$y = \begin{pmatrix} y(1) \\ y(2) \\ \vdots \\ y(N) \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x^T(1) \\ x^T(2) \\ \vdots \\ x^T(N) \end{pmatrix} \in M_{N,p}(\mathbb{R}), \quad e = \begin{pmatrix} e(1) \\ e(2) \\ \vdots \\ e(N) \end{pmatrix}.$$

Теорема 1. *Оцінка* $\hat{\alpha}$ *вектора невідомих параметрів* α *моделі (1) методом найменших квадратів відносних похибок буде:*

1) єдиною тоді і тільки тоді, коли $rank(X) = p$ *, і має вигляд*

$$\hat{\alpha} = \left(X^T D X \right)^{-1} X^T D y , \tag{3}$$

причому її похибка оцінювання

$$\Delta(\hat{\alpha}) = \hat{\alpha} - \alpha = \left(X^T D X \right)^{-1} X^T D e ; \tag{4}$$

2) не єдиною тоді і тільки тоді, коли $rank(X) < p$ *, а множина усіх цих оцінок буде задаватися згідно з*

$$\hat{\alpha}(c) = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^{+} D^{\frac{1}{2}} y + \left[E_p - \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^{+} \left(D^{\frac{1}{2}} X \right) \right] c, \quad c \in \mathbb{R}^p , \tag{5}$$

причому відповідна похибка оцінювання

$$\Delta(\hat{\alpha}(c)) = \hat{\alpha}(c) - \alpha = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^{+} D^{\frac{1}{2}} e + \left[E_p - \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^{+} \left(D^{\frac{1}{2}} X \right) \right] (c - \alpha), \quad c \in \mathbb{R}^p . \tag{6}$$

Найменшу норму серед усіх оцінок (5) *буде мати оцінка*

$$\hat{\alpha} = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^{+} D^{\frac{1}{2}} y ,$$

причому формула останньої оцінки суттєво спрощується, якщо матриця X *має повний ранг по рядках (* $rank(X) = N$ *) і набуває вигляду*

$$\hat{\alpha} = X^T \left(X X^T \right)^{-1} y .$$

Тут $D = diag\left(y^{-2}(1), y^{-2}(2), \cdots, y^{-2}(N) \right)$, $(^{+})$ *– оператор псевдообернення за Муром – Пенроузом,* E_p *– одинична матриця порядку* p *.*

Доведення. Очевидно, що оцінка $\hat{\alpha}$ методу найменших квадратів відносних похибок по структурі є частинним випадком оцінки зваженого методу найменших квадратів (ЗМНК) (Björck, 1996; Rao et al., 2008; Strutz, 2016), на якій досягається мінімум функціонала

$$e^T W e, \quad W > 0 ,$$

у ситуації, коли як позитивно визначену матриці W взято діагональну матрицю D .

Це дає змогу спростити аналіз оцінки методу найменших квадратів відносних похибок $\hat{\alpha}$. Розглянемо послідовно обидві ситуації.

1) Припустимо, що $rank(X) = p$. Очевидно, що ця умова буде необхідною та достатньою умовою єдиності оцінки МНК відносних похибок $\hat{\alpha}$, а вигляд безпосередньо оцінки $\hat{\alpha}$ та її похибки оцінювання $\Delta(\hat{\alpha})$ набудуть представлення (3) та (4) відповідно, як частинні випадки відповідних формул для оцінки ЗМНК (Björck, 1996; Rao et al., 2008; Strutz, 2016), коли вагова матриця $W = D$. Відмітимо, що оцінка $\hat{\alpha}$ для цього випадку у вигляді (3) була вже отримана у роботі (Tofallis, 2008).

2) Нехай $rank(X) < p$. Зрозуміло, що в цьому випадку оцінка МНК відносних похибок не буде єдиною. Спочатку критерій (2) трансформуємо до вигляду

$$Q(\alpha) = \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{e(k)}{y(k)} \right)^2 = e^T D e = \left\| D^{\frac{1}{2}} y - D^{\frac{1}{2}} X \alpha \right\|^2 ,$$

де $\|\bullet\|$ – евклідова норма.

Останнє дає змогу стверджувати, що множина усіх оцінок МНК відносних похибок збігається із множиною всіх псевдорозв'язків відносно α такої системи лінійних алгебраїчних рівнянь (Чарін, 2004)

$$D^{\frac{1}{2}} X \alpha = D^{\frac{1}{2}} y ,$$

і задається так (Albert, 1972):

$$\hat{\alpha}(c) = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ D^{\frac{1}{2}} y + \left[E_p - \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ \left(D^{\frac{1}{2}} X \right) \right] c, \quad c \in \mathbb{R}^p .$$

А відповідна похибка оцінювання

$$\Delta\left(\hat{\alpha}(c)\right) = \hat{\alpha}(c) - \alpha = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ D^{\frac{1}{2}} y + \left[E_p - \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ \left(D^{\frac{1}{2}} X \right) \right] c - \alpha =$$

$$= \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ D^{\frac{1}{2}} e + \left[E_p - \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ \left(D^{\frac{1}{2}} X \right) \right] (c - \alpha), \quad c \in \mathbb{R}^p .$$

Серед усіх оцінок МНК відносних похибок на множині (5), згідно з (Albert, 1972), найменшу норму буде мати оцінка

$$\hat{\alpha} = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ D^{\frac{1}{2}} y .$$

Проаналізуємо останню оцінку у випадку, коли матриця X має повний ранг по рядках. Нехай $rank(X) = N$, тоді зрозуміло, що і $rank\left(D^{\frac{1}{2}} X \right) = N$ також. Оскільки $D^{\frac{1}{2}} X$ теж має повний ранг по рядках, то її псевдообернена матриця легко підраховується та згідно з (Albert, 1972) набуває вигляду

$$\left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^T \left[\left(D^{\frac{1}{2}} X \right) \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^T \right]^{-1} = X^T D^{\frac{1}{2}} \left[D^{\frac{1}{2}} \left(X X^T \right) D^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} = X^T \left(X X^T \right)^{-1} D^{-\frac{1}{2}} .$$

Тоді

$$\hat{\alpha} = \left(D^{\frac{1}{2}} X \right)^+ D^{\frac{1}{2}} y = X^T \left(X X^T \right)^{-1} D^{-\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} y = X^T \left(X X^T \right)^{-1} y .$$

Доведення завершено.

Зауваження. *Підкреслимо, що у випадку, коли $rank(X) = p$, також можна користуватися формулами (5) та (6), бо у цьому випадку результати (3) та (4) є частинними випадками формул (5) та (6).*

З доведення останньої теореми випливає, що вона справджується і тоді, коли як оцінку вектора невідомих параметрів α моделі (1) замість оцінки методу найменших квадратів відносних похибок $\hat{\alpha}$ використати оцінку ЗМНК $\hat{\alpha}_W$ з довільною позитивно визначеною ваговою матрицею W. Оцінка $\hat{\alpha}_W$ у випадку, коли справедливе класичне припущення, що гарантує її єдиність, була досліджена у роботах (Björck, 1996; Rao et al., 2008; Strutz, 2016), а останній висновок дозволяє доповнити згадане дослідження результатом у випадку, коли це класичне припущення порушується. А саме, справедливе таке твердження.

Теорема 2. *Нехай $\hat{\alpha}_W$ є оцінкою зваженого методу найменших квадратів для вектора невідомих параметрів α моделі (1), тобто на ній досягає мінімуму функціонал*

$$e^T W e, \quad W > 0 ,$$

де W – довільна позитивно визначена матриця порядку N.

Тоді оцінка зваженого методу найменших квадратів $\hat{\alpha}_W$ буде:

1) єдиною тоді і тільки тоді, коли $rank(X) = p$, і має вигляд

$$\hat{\alpha}_W = \left(X^T W X\right)^{-1} X^T W y ,$$

причому її похибка оцінювання

$$\Delta\left(\hat{\alpha}_W\right) = \hat{\alpha}_W - \alpha = \left(X^T W X\right)^{-1} X^T W e ;$$

2) не єдиною тоді і тільки тоді, коли $rank\left(X\right) < p$ *, а множина усіх цих оцінок буде задаватися згідно з*

$$\hat{\alpha}_W\left(c\right) = \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)^{+} W^{\frac{1}{2}} y + \left[E_p - \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)^{+} \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)\right] c, \quad c \in \mathbb{R}^p , \tag{7}$$

причому відповідна похибка оцінювання набуває вигляду

$$\Delta\left(\hat{\alpha}_W\left(c\right)\right) = \hat{\alpha}_W\left(c\right) - \alpha = \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)^{+} W^{\frac{1}{2}} e + \left[E_p - \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)^{+} \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)\right] \left(c - \alpha\right), \quad c \in \mathbb{R}^p .$$

Найменшу норму серед усіх оцінок буде мати оцінка

$$\hat{\alpha}_W = \left(W^{\frac{1}{2}} X\right)^{+} W^{\frac{1}{2}} y ,$$

причому формула останньої оцінки суттєво спрощується, якщо матриця X *має повний ранг по рядках (*$rank\left(X\right) = N$*), і набуває вигляду*

$$\hat{\alpha}_W = X^T \left(X X^T\right)^{-1} y .$$

Дискусія і висновки

Для оцінки параметрів регресійної моделі запропоновано використовувати оцінку методу найменших квадратів відносних похибок $\hat{\alpha}$. Вираз її явної форми представлення, коли справджується класичне припущення, що гарантує її єдиність, узагальнено на випадок, коли порушується згадане класичне припущення. В останньому випадку дослідження проведено з використанням оператора псевдообернення матриць за Муром – Пенроузом. Для обох випадків наведені явні форми представлення як для оцінки методу найменших квадратів відносних похибок, так і для її похибки оцінювання. На відміну від оцінки звичайного методу найменших квадратів, що мінімізує суму квадратів абсолютних похибок моделі, оцінка методу найменших квадратів відносних похибок мінімізує суму квадратів відносних похибок моделі. З огляду на це звичайний метод найменших квадратів можна називати методом найменших квадратів абсолютних похибок.

Як наслідок для обох згаданих випадків також представлено аналогічні результати для оцінки зваженого методу найменших квадратів, коли в ролі вагової матриці взято довільну позитивно визначену матрицю.

Усі представлені твердження повністю узгоджуються з раніше отриманими відомими результатами.

Джерела фінансування. Дослідження частково профінансовано Київським національний університетом імені Тараса Шевченка.

Список використаних джерел

Чарін, В. С. (2004). *Лінійна алгебра*. Техніка.
Albert, A. (1972). *Regression and the Moore – Penrose Pseudoinverse.* Academic Press.
Björck, Å. (1996). *Numerical Methods for Least Squares Problems*. SIAM.
Chengsi, L. (2001). Least Square Method Based on Relative Error. *Science Direct Working Paper, No S1574-0358(04)70710-8*, 371–380. https://ssrn.com/abstract=3153628
Gauss, C. F. (1809). *Theoria Motus Corporum Coelestium in Sectionibus Conicis Solem Ambientium.* Frid. Perthes et I. H. Besser.
Hansen, P. C., Pereyra, V., & Scherer, G. (2013). *Least Squares Data Fitting with Applications*. Johns Hopkins University Press. https://doi.org/10.1353/book.21076
Legendre, A. M. (1805). *Nouvelles Méthodes pour la Détermination des Orbites des Comètes.* Firmin Didot.
Moore, E. H. (1920). On the reciprocal of the general algebraic matrix. *Bulletin American Mathematical Society*, 26(9), 394–395.
Penrose, R. (1955). A generalized inverse for matrices. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 51(3), 406–413.
Rao, C. R., Toutenburg, H., Shalabh, & Heumann, C. (2008). *Linear Models and Generalizations: Least Squares and Alternatives* (3rd ed.). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-540-74227-2
Strutz, T. (2016). *Data Fitting and Uncertainty: A Practical Introduction to Weighted Least Squares and Beyond* (2nd ed.). Springer Vieweg.
Tofallis, C. (2008). Least Squares Percentage Regression. *Journal of Modern Applied Statistical Methods*, 7(2), 526–534. https://doi.org/10.22237/jmasm/1225513020
Weisberg, S. (2014). *Applied Linear Regression* (4th ed.). Wiley.

References

Albert, A. (1972). *Regression and the Moore – Penrose Pseudoinverse.* Academic Press.
Björck, Å. (1996). *Numerical Methods for Least Squares Problems*. SIAM.
Charin, V. S. (2004). *Linear Algebra*. Technics [in Ukrainian].
Chengsi, L. (2001). Least Square Method Based on Relative Error. *Science Direct Working Paper, No S1574-0358(04)70710-8*, 371–380. https://ssrn.com/abstract=3153628
Gauss, C. F. (1809). *Theoria Motus Corporum Coelestium in Sectionibus Conicis Solem Ambientium.* Frid. Perthes et I. H. Besser.
Hansen, P. C., Pereyra, V., & Scherer, G. (2013). *Least Squares Data Fitting with Applications*. Johns Hopkins University Press. https://doi.org/10.1353/book.21076
Legendre, A. M. (1805). *Nouvelles Méthodes pour la Détermination des Orbites des Comètes.* Firmin Didot.

Moore, E. H. (1920). On the reciprocal of the general algebraic matrix. *Bulletin American Mathematical Society*, 26(9), 394–395.
Penrose, R. (1955). A generalized inverse for matrices. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 51(3), 406–413.
Rao, C. R., Toutenburg, H., Shalabh, & Heumann, C. (2008). *Linear Models and Generalizations: Least Squares and Alternatives* (3rd ed.). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-540-74227-2
Strutz, T. (2016). *Data Fitting and Uncertainty: A Practical Introduction to Weighted Least Squares and Beyond* (2nd ed.). Springer Vieweg.
Tofallis, C. (2008). Least Squares Percentage Regression. *Journal of Modern Applied Statistical Methods*, 7(2), 526–534. https://doi.org/10.22237/jmasm/1225513020
Weisberg, S. (2014). *Applied Linear Regression* (4th ed.). Wiley.

Отримано редакцією журналу / Received: 31.03.25
Прорецензовано / Revised: 12.08.25
Схвалено до друку / Accepted: 10.10.25

Alexander SLABOSPITSKY, PhD (Phys. & Math.), Assoc. Prof.
ORCID ID: 0009-0007-8753-2075
e-mail: alexsl@knu.ua
Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

LEAST SQUARES METHOD OF RELATIVE ERRORS FOR PARAMETER ESTIMATION OF SYSTEMS UNDER NON-CLASSICAL ASSUMPTIONS

The problem of optimal estimation of regression model parameters based on available observations of the dependent variable and all regressors is considered. It is suggested to use the least squares method of relative errors to solve this problem. The estimate of this method is the point at which the sum of squares of relative errors of the regression model reaches its minimum, not the sum of squares of absolute errors of the model, as in the ordinary least squares method, which can be called the least squares method of absolute errors. The value of the quality functional of the considered method no longer depends on the units of measurement of the available observations.

In the paper, the explicit form of the representation of the optimal estimate of the least squares method of relative errors in a situation where the classical assumption is valid, which guarantees its uniqueness, is extended to the case when this assumption is violated and the estimate is no longer unique. In the latter situation, there is a need to use the Moore-Penrose matrix pseudo-inversion operator. Corresponding explicit expressions for the estimation error by this method are also presented for both cases.

In addition, as a consequence, for the weighted least squares method, in the case of using an arbitrary positive definite matrix as the weight matrix, for both of the above-mentioned situations, explicit forms of representation of the corresponding optimal estimate of this method and the expression for the estimation error are also given by analogy.

K e y w o r d s : ***regression model, parameter estimation, non-classical assumption, Moore – Penrose pseudo-inversion operator, least squares method, weighted least squares method, least squares method of relative errors.***

Автор заявляє про відсутність конфлікту інтересів. Спонсори не брали участі в розробленні дослідження; у зборі, аналізі чи інтерпретації даних; у написанні рукопису; в рішенні про публікацію результатів.

The author declares no conflicts of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses or interpretation of data; in the writing of the manuscript; or in the decision to publish the results.