Phụ lục 3: Phương pháp bình phương nhỏ nhất trong phân tích hồi quy

Bởi:

PGS. TS. NGƯT Phạm Văn Huấn

1. Mô hình tuyến tính

Mô hình hồi quy tuyến tính có dạng:

$y = f(x) = ax+b$.

Theo phương pháp bình phương nhỏ nhất, các hệ số hồi quy a và b trong phương trình trên được tìm sao cho tổng bình phương sai số bằng

$E = \sum_{k=1}^{n} (y_k - ax_k - b)^2$

cực tiểu. Lần lượt lấy đạo hàm biểu thức này theo a, b và cho bằng không, ta được hệ phương trình sau đây để xác định a và b:

$a\sum_{k=1}^{n} x_k^2 + b\sum_{k=1}^{n} x_k = \sum_{k=1}^{n} x_k y_k,\ a\sum_{k=1}^{n} x_k + bn = \sum_{k=1}^{n} y_k.$

Vậy các hệ số hồi quy được tính theo các công thức sau:

$a = \frac{\sum_{k=1}^{n} x_k \sum_{k=1}^{n} y_k - n\sum_{k=1}^{n} x_k y_k}{(\sum_{k=1}^{n} x_k)^2 - n\sum_{k=1}^{n} x_k^2}$ (20)

$b = \frac{\sum_{k=1}^{n} x_k \sum_{k=1}^{n} x_k y_k - \sum_{k=1}^{n} x_k^2 \sum_{k=1}^{n} y_k}{(\sum_{k=1}^{n} x_k)^2 - n\sum_{k=1}^{n} x_k^2}$, (21)

hay hệ số b còn có thể tính theo công thức:

$b = \frac{\sum_{k=1}^{n} y_k - a\sum_{k=1}^{n} x_k}{n}$. (22)

2. Mô hình đa thức

Phương pháp bình phương nhỏ nhất cũng có thể áp dụng để tính các hệ số hồi quy đa thức dạng

$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + ...+a_nx^m$.

thí dụ đối với mô hình bậc hai

$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$.

Lấy đạo hàm tổng sai số theo các hệ số và cho bằng không ta có hệ sau đây để xác định các hệ số hồi quy bậc hai:

$$
\begin{aligned}
a_2\sum_{k=1}^{n} x_k^2 + a_1\sum_{k=1}^{n} x_k + a_0 n &= \sum_{k=1}^{n} y_k \\
a_2\sum_{k=1}^{n} x_k^3 + a_1\sum_{k=1}^{n} x_k^2 + a_0\sum_{k=1}^{n} x_k &= \sum_{k=1}^{n} x_k y_k \\
a_2\sum_{k=1}^{n} x_k^4 + a_1\sum_{k=1}^{n} x_k^3 + a_0\sum_{k=1}^{n} x_k^2 &= \sum_{k=1}^{n} x_k^2 y_k
\end{aligned} \quad (23)
$$

{{

Về nguyên tắc ta có thể sử dụng phương pháp này để tìm phương trình đa thức bậc bất kỳ. Tuy nhiên trong thực tế phương pháp trở thành không ổn định khi bậc đa thức lớn hơn vì các sai số làm tròn số trong máy tính.

3. Mô hình phi tuyến

Phương pháp bình phương nhỏ nhất có thể áp dụng cho hàm bất kỳ, nhưng hệ các phương trình để tìm các hệ số có thể phi tuyến, và do đó không thể giải được bằng cách sử dụng các phương trình tuyến tính. Tuy nhiên, trong một số trường hợp, một hàm phi tuyến có thể chuyển thành một hàm tuyến tính. Thí dụ về một hàm có thể tuyến tính hóa là

$f(x) = bx^a$ (24)

Nếu lấy loga hai vế của phương trình này, ta có

$\ln f(x) = a\ln x + \ln b$. (25)

Nếu ký hiệu

$g(x) = \ln f(x)$ (26)

$\tilde{b} = \ln b$ (27)

$\tilde{x} = \ln x$ (28)

$\tilde{y} = \ln y$ (29)

ta có

$g(x) = a\tilde{x} + \tilde{b}$ (30)

Với phương trình (30) các hệ số hồi quy a và $\tilde{b}$ tính theo các công thức

$$a = \frac{\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k\sum_{k=1}^{n}\tilde{y}_k - n\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k\tilde{y}_k}{(\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k)^2 - n\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k^2} \quad (31)$$

$$\tilde{b} = \frac{\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k\tilde{y}_k - \sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k^2\sum_{k=1}^{n}\tilde{y}_k}{(\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k)^2 - n\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k^2} \quad (32)$$

Vậy công việc tính toán gồm: chuyển đổi các giá trị số liệu x_k và y_k theo các công thức (28), (29), tính các tổng, kết quả thế vào các phương trình (31), (32) để tìm a và $\tilde{b}$. Giải phương trình (27) đối với b và đặt vào phương trình (24).