

A legkisebb négyzetek elve: Akár valószínűségi változó függ determinisztikus változó(k)tól, akár determinisztikus szükségünk van egy matematikai összefüggésre (modellre) amelyik a függést leírja, Jelöljük a modellt F-fel. Ilyen modell lehet egy origón áthaladó vagy általános helyzetű egyenes, egy exponenciális függvény stb. A modellnek állandói (konstansai, paraméterei) vannak (meredekség, tengelymetszet) és független változói. Legyen az előbbiek jele a_1, a_2, \dots az utobbiaké x_1, x_2, \dots , de egyszerűség kedvéért tekintsünk most egyetlen x-t.

A független változókat „**regresszoroknak**” is nevezik. A számított érték jel legyen y. A modell tehát általánosan így fest : $Y = F(x_1, x_2, \dots, a_1, a_2, \dots)$ Ha a paraméterek ismertek, beállított független változoknál y kiszámítható. A feladatot azonban általában meg kell előznie a paraméterek meghatározása (becslése). Ismert x értékeknél párhuzamos kísérletekben meghatározzunk y márt értékeket, és a paramétereket tekintjük ismeretleneknek. Ha a mérések pontosak lennének. bármelyikből ki lehetne számolni az ismeretlen a_1, a_2, \dots paramétereket. A kapott y értékeket azonban ismeretlen hibával mérjük: $F(x_1, a_1, a_2, \dots) = y_1 + \varepsilon_1$, $F(x_2, a_1, a_2, \dots) = y_2 + \varepsilon_2 \dots$ ezárt az egyenletekből mérésről mérésre más paraméterek adódnának. Megállapodás szerint azokat a a_1, a_2, \dots értékeket fogadjuk el optimálisnak, amelyeknél a mért és számított értékek különbségnégyzeteinek összege minimális : $Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \min$ \hat{y} az $F(x, a, b)$ modellel számított értéket jelöli.

A lineáris regresszió paramétereinek becslése: A lineáris regressziónál az egyenes ismert egyenletének érvényességét tételezzük fel: $y = F(x, a, b) = a + bx$ A paraméterek becslésére n darab $x_j, y_j \dots$ értékpárt használunk fel. A becslés gondolatmenetének megfelelően minimálni kell a mért és számított y értékek eltérése négyzetének összegét: $Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 = \min$. Az a és b paraméterek függvényében Q négyzetösszeg nyilvánvalóan ott lesz minimális ahol Q-nak a és b szerinti parciális deriváltjai 0 értékűek lesznek. Fenn kell tehát állnia, hogy $\frac{\partial Q}{\partial a} = -2 \sum (y_i - a - bx_i) = 0$ és $\frac{\partial Q}{\partial b} = -2 \sum (y_i - a - bx_i) x_i = 0$ A kapott egyenleteket egyszerűsítve, az összegezéseket tagonként végrehajtva és azokat rendezve az $an + b \sum x = \sum y$ és $a \sum x + b \sum x^2 = \sum xy$ lineáris egyenletrendszer adódik, amelyből megoldás után a meredekségre a $\hat{b} = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}$ összefüggés. a tengelymetszetre pedig $\hat{a} = \bar{y} - b\bar{x}$ képlet adódik. A képlet átalakítható $\hat{b} = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$.