

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ

Лектор

Сенько Олег Валентинович

Лекция 3

Линейная регрессия

Распространённым средством решения задач

прогнозирования величины Y по переменным X_1, \dots, X_n

является использование метода линейной регрессии

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_n X_n + \varepsilon$$

Где $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ регрессионные коэффициенты,

ε - ошибка прогнозирования.

Регрессионные коэффициенты ищутся по обучающей выборке

, где $\tilde{S}_t = \{(y_1, \mathbf{x}_1), \dots, (y_m, \mathbf{x}_m)\}$ $\mathbf{x}_j = (x_{j1}, \dots, x_{jn})$

- вектор значений переменных X_1, \dots, X_n для j -го объекта.

Линейная регрессия

Традиционным способом поиска регрессионных коэффициентов является метод наименьших квадратов (МНК).

МНК заключается в минимизации функционала

$$Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [y_j - \beta_0 - \sum_{i=1}^n x_{ji} \beta_i]^2$$
 То есть в качестве

оценок истинных значений регрессионных коэффициентов

берутся значения $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$, для которых $Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)$

Принимает минимальное значение.

Линейная регрессия

Предположим взаимосвязь между величиной Y и переменными X_1, \dots, X_n

описывается выражением ,

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_n X_n + \varepsilon_N(0, \sigma) \quad (1)$$

Где ошибка ε_N распределена нормально, При этом дисперсия ошибки σ^2 не зависит от X_1, \dots, X_n , а математическое ожидание ошибки равно 0 при произвольных значениях прогностических переменных:

$$E_{\Omega}(\varepsilon_N | \mathbf{x}) = 0, E_{\Omega}(\varepsilon_N^2 | \mathbf{x}) = \sigma^2 \quad \forall \mathbf{x} \in \tilde{X}$$

Линейная регрессия

- В этом случае метод МНК тождественен более общему статистическому методу оценивания параметров статистических распределений – Методу максимального правдоподобия (ММП).
- **Метод максимального правдоподобия**

Предположим, что некоторое пространство событий, с заданным на нём вероятностной мерой \mathbf{P} характеризуется переменными Z_1, \dots, Z_d

Метод максимального правдоподобия

- Метод ММП позволяет восстанавливать плотность распределения вероятностей по случайным выборкам, если общий вид. плотности вероятностного распределения известен

Пусть плотность распределения \mathbf{P} принадлежит семейству функций, задаваемому вектором параметров $(\theta_1, \dots, \theta_r)$, принимающем значения из множества $\tilde{\Theta}$

$$\{p(Z_1, \dots, Z_d, \theta_1, \dots, \theta_r) \mid \boldsymbol{\theta} \in \tilde{\Theta}\}$$

Метод максимального правдоподобия

Предположим, что у нас имеется случайная выборка объектов, описываемых векторами $\{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_m\}$ переменных Z_1, \dots, Z_d

Напомним, что метод МП заключается в выборе в семействе $\{p(Z_1, \dots, Z_d, \theta_1, \dots, \theta_r) \mid \boldsymbol{\theta} \in \tilde{\Theta}\}$ плотности, для которой достигает максимума функция правдоподобия

$$L(\theta_1, \dots, \theta_r) = \prod_{j=1}^m p(\mathbf{z}_j, \boldsymbol{\theta})$$

Метод максимального правдоподобия

Иными словами оценка $\tilde{\theta}$ вектора параметров

$\theta = (\theta_1, \dots, \theta_r)$ вычисляется как

$$\tilde{\theta} = \arg \max_{\theta \in \tilde{\Theta}} \{L(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_m, \theta_1, \dots, \theta_r)\}$$

- Согласно модели (1) разность $Y - \beta_0 - \beta_1 X_1 - \dots - \beta_n X_n$

Подчиняется нормальному распределению с нулевым

математическим ожиданием и дисперсией σ^2

Соответствие ММП и МНК

Плотность распределения в пространстве переменных (Y, X_1, \dots, X_n) может быть восстановлена по обучающей выборке $\tilde{S}_t = \{(y_1, \mathbf{x}_1), \dots, (y_m, \mathbf{x}_m)\}$

путём максимизации функции правдоподобия

$$L(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \prod_{j=1}^m \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^m} \exp\left[-\frac{(y_j - \beta_0 - \sum_{i=1}^n x_{ji}\beta_i)^2}{2\sigma^2}\right]$$

Соответствие ММП и МНК

Очевидно, точка экстремума функции правдоподобия

$L(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)$ совпадает с точкой экстремума функции

$$\ln[L(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)] = \sum_{j=1}^m [-\frac{1}{2} \ln(2\pi) - \ln(\sigma)] + \\ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^m (y_j - \beta_0 - \sum_{i=1}^n x_{ji} \beta_i)^2$$

Очевидно, что точка максимума $\ln[L(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)]$ совпадает с точкой минимума функции $Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)$, оптимизируемой в методе МНК, что позволяет сделать вывод о эквивалентности ММП и МНК

Одномерная линейная регрессия

Метод одномерной регрессии позволяет восстановить линейную зависимость переменной Y от единственной переменной X по обучающей выборке $\tilde{S}_t = \{(y_1, x_1), \dots, (y_m, x_m)\}$

МНК заключается в минимизации функционала

$$Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \beta_1) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [y_j - \beta_0 - \beta_1 x_j]^2$$

Иными словами оценки значений β - параметров

$(\tilde{\beta}_0, \tilde{\beta}_1)$ вычисляются как

$$(\tilde{\beta}_0, \tilde{\beta}_1) = \arg \min_{(\beta_0, \beta_1) \in \tilde{B}} \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [y_j - \beta_0 - \beta_1 x_j]^2$$

Одномерная линейная регрессия

Необходимым условием минимума функционала $Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \beta_1)$

является выполнение системы из двух уравнений

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \beta_1)}{\partial \beta_0} &= -\frac{2\beta_0}{m} \sum_{j=1}^m y_j + \frac{2\beta_1}{m} \sum_{j=1}^m x_j = 0 \\ \frac{\partial Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \beta_1)}{\partial \beta_1} &= -\frac{2\beta_0}{m} \sum_{j=1}^m x_j y_j + \frac{2\beta_1}{m} \sum_{j=1}^m x_j^2 = 0\end{aligned}\quad (2)$$

Оценки $(\tilde{\beta}_0, \tilde{\beta}_1)$ являются решением системы неравенств (2)

относительно параметров (β_0, β_1) соответственно

Одномерная линейная регрессия

Таким образом оценки могут быть записаны в виде

$$\tilde{\beta}_1 = \frac{\sum_{j=1}^m x_j y_j - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_j \sum_{j=1}^m y_j}{\sum_{j=1}^m x_j^2 - \frac{1}{m} \left(\sum_{j=1}^m x_j \right)^2} \quad \tilde{\beta}_0 = \bar{y} - \beta_1 \bar{x} \quad , \text{ где}$$
$$\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m y_j, \quad \bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_j$$

Выражение для $\tilde{\beta}_1$ может быть переписано в виде

$$\tilde{\beta}_1 = \frac{\text{Cov}(Y, X | \tilde{S}_t)}{D(X)}, \quad \text{где} \quad \text{Cov}(Y, X | \tilde{S}_t) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (y_j - \bar{y})(x_j - \bar{x})$$

$$D(X | \tilde{S}_t) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (x_j - \bar{x})^2 \quad - \text{соответственно}$$

выборочные ковариация и дисперсия

Многомерная линейная регрессия

При вычислении оценки вектора β - параметров в случае многомерной линейной регрессии удобно использовать матрицу плана \mathbf{X} размера $m \times (n + 1)$, которая строится по обучающей выборке $\tilde{S}_t = \{(y_1, \mathbf{x}_1), \dots, (y_m, \mathbf{x}_m)\}$

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{j1} & \dots & x_{jn} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{m1} & \dots & x_{mn} \end{pmatrix}$$

Многомерная линейная регрессия

Пусть $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$ - вектор значений переменной Y . Связь значений Y с переменными (X_1, \dots, X_n) на объектах обучающей выборки может быть описана с помощью матричного уравнения $\mathbf{y} = \mathbf{\beta X}^t + \boldsymbol{\varepsilon}$, где

$\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m)$ - вектор ошибок для объектов \tilde{S}_t .

Функционал $Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)$ Может быть записан в виде

$$Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left[y_j - \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji} \right]^2, \text{ где } \hat{x}_{ji} - \text{элемент } \mathbf{X}$$

Многомерная линейная регрессия

Необходимым условием минимума функционала

$Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)$ является выполнение системы из $n + 1$ уравнений

$$\frac{\partial Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)}{\partial \beta_0} = 2 \left[\sum_{j=1}^m y_j \hat{x}_{j1} - \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji} \hat{x}_{j1} \right] = 0 \quad (3)$$

.....

$$\frac{\partial Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)}{\partial \beta_n} = 2 \left[\sum_{j=1}^m y_j \hat{x}_{jn} - \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji} \hat{x}_{jn} \right] = 0$$

Многомерная линейная регрессия

Вектор оценок значений регрессионных коэффициентов

$\tilde{\boldsymbol{\beta}} = (\tilde{\beta}_0, \dots, \tilde{\beta}_n)$ является решением системы уравнений (3)

В матричной форме система (3) может быть записана в виде

$$-2\mathbf{X}^t \mathbf{y}^t + 2\mathbf{X}^t \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^t = 0 \quad (4)$$

Решение системы (4) существует, если $\det(\mathbf{X}^t \mathbf{X}) \neq 0$

Многомерная линейная регрессия

- В этом случае для $\mathbf{X}^t \mathbf{X}$ существует обратная матрица и решение (4) относительно вектора может быть записано в виде: $\tilde{\boldsymbol{\beta}}^t = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{y}^t$

МУЛЬТИКОЛЛИНЕАРНОСТЬ

Явление мультиколлинеарности,

Из теории матриц следует, что $\det(\mathbf{X}^t \mathbf{X}) = 0$ если ранг матрицы \mathbf{X} по строкам менее n . Однако при сильной коррелированности одной из переменной с какой-либо линейной комбинацией других переменных

значение $\det(\mathbf{X}^t \mathbf{X})$ оказывается близким 0

При этом вычисленный вектор оценок $\tilde{\beta}^t$ может сильно изменяться при небольших изменениях в обучающей выборке..

Свойства оптимальных регрессий

- Рассмотрим свойства линейных регрессий, минимизирующих квадрат ошибки на пространстве событий Ω . Пусть $R(X_1, \dots, X_n)$ - регрессионная функция, которая не может быть улучшена с помощью дополнительного линейного преобразования. Иными словами
- $$\forall \alpha_0, \alpha_1 \quad E_{\Omega} (Y - \alpha_0 - \alpha_1 R)^2 \geq E_{\Omega} (Y - R)^2$$

Свойства оптимальных регрессий

- То есть минимум $E_{\Omega}(Y - \alpha_0 - \alpha_1 R)^2$ достигается при

$$\alpha_0 = 0, \quad \alpha_1 = 1$$

$$E_{\Omega}(Y - \alpha_0 - \alpha_1 R)^2 = E_{\Omega}Y^2 - 2\alpha_0 E_{\Omega}Y -$$

$$-2\alpha_1 E_{\Omega}(YR) + \alpha_1^2 E_{\Omega}R^2 + 2\alpha_1 \alpha_0 E_{\Omega}R + \alpha_0^2$$

Необходимым условием экстремума $E_{\Omega}(Y - \alpha_0 - \alpha_1 R)^2$

является равенство 0 частных производных

$$\frac{\partial E_{\Omega}(Y - \alpha_0 - \alpha_1 R)^2}{\partial \alpha_0}, \quad \frac{\partial E_{\Omega}(Y - \alpha_0 - \alpha_1 R)^2}{\partial \alpha_1}$$

Свойства оптимальных регрессий

Что эквивалентно уравнениям

$$2\alpha_1 E_{\Omega}R + 2\alpha_0 - 2\alpha_1 E_{\Omega}Y = 0$$

$$-2E_{\Omega}(YR) + 2\alpha_1 E_{\Omega}R^2 + 2\alpha_0 E_{\Omega}R = 0$$

Принимая во внимание, что в точке экстремума $\alpha_0 = 0$, $\alpha_1 = 1$

получаем следующие свойства оптимального линейного

прогнозирующего алгоритма

$$1) E_{\Omega}R = E_{\Omega}Y \quad 2) E_{\Omega}R^2 = E_{\Omega}(YR)$$

Свойства оптимальных регрессий

- Из свойств 1) 2) следует, что дисперсия R равна ковариации Y и R

$$D(R) = E_{\Omega} (R - E_{\Omega} R)^2 = E_{\Omega} R^2 - (E_{\Omega} R)^2$$

$$\text{cov}(YR) = E_{\Omega} \{ (R - E_{\Omega} R)(Y - E_{\Omega} Y) \} = E_{\Omega} (RY) - (E_{\Omega} R)^2$$

То есть 3) $\text{cov}(YR) = D(R)$

Свойства оптимальных регрессий

Рассмотрим коэффициент корреляции между Y и R

$$3) \quad K(YR) = \frac{\text{cov}(YR)}{\sqrt{D(Y)D(R)}} = \sqrt{\frac{D(R)}{D(Y)}}$$

Величина ошибки прогнозирования Y с помощью R

$$\begin{aligned} 4) \Delta(Y, R) &= E_{\Omega} (Y - R)^2 = E_{\Omega} Y^2 - 2E_{\Omega} (YR) + E_{\Omega} R^2 = \\ &= E_{\Omega} Y^2 - E_{\Omega} R^2 = E_{\Omega} Y^2 - (E_{\Omega} Y)^2 + (E_{\Omega} Y)^2 - E_{\Omega} R^2 = \\ &= E_{\Omega} Y^2 - (E_{\Omega} Y)^2 + (E_{\Omega} R)^2 - E_{\Omega} R^2 = D(Y) - D(R) \end{aligned}$$

Свойства оптимальных регрессий

Из свойств (3) и (4) легко следует свойство для

относительной ошибки $\Delta_r(Y, R) = \Delta_r(Y, R) / D(Y)$

$$5) \Delta_r(Y, R) = 1 - K^2(Y, R)$$

Разложение обобщённой ошибки

Напомним, что обобщающая способность алгоритма прогнозирования $A(\mathbf{x}, \tilde{S}_t)$, обученного по выборке \tilde{S}_t с помощью метода \mathbf{A} измеряется величиной потерь на генеральной совокупности Ω

$$E_{\Omega}\{\lambda[Y, A(\mathbf{x}, \tilde{S}_t)]\} = \int_{\Omega} \lambda[Y, A(\mathbf{x})] P(d\omega)$$

Разложение обобщённой ошибки

- Для оценки эффективности использования метода прогнозирования A для прогнозирования случайного процесса, связанного с генеральной совокупностью Ω при размере обучающей выборки m естественно использовать математическое ожидание потерь по пространству всевозможных обучающих выборок \tilde{S}_m длины m - $\Omega_m = \Omega \times \dots \times \Omega$

$$E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ \lambda[Y, A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)] \}$$

Разложение обобщённой ошибки

При использовании в качестве функции потерь квадрата ошибки $\lambda[y_j, A(\mathbf{x}_j)] = [y_j - A(\mathbf{x}_j)]^2$ обобщённые потери (обобщённая квадратичная ошибка Δ_G) принимает вид

$$\Delta_G = E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [Y - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \}$$

Проведём преобразования

$$\begin{aligned} \Delta_G &= E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [Y - E(Y | \mathbf{x}) + E(Y | \mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \} = \\ &= E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [Y - E(Y | \mathbf{x})]^2 \} + E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [E(Y | \mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \} + \\ &\quad + E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [E(Y | \mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)][Y - E(Y | \mathbf{x})] \} \end{aligned}$$

Разложение обобщённой ошибки

Справедливо равенство

$$E_{\Omega_m} E\{[E(Y | \mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)][Y - E(Y | \mathbf{x})]\} = 0 ,$$

которое следует из того, что для при любом \mathbf{x}

$$E\{[Y - E(Y | \mathbf{x})]\} = \int_M E\{[Y - E(Y | \mathbf{x})] | \mathbf{x}\} p(\mathbf{x}) dx_1 \dots dx_n ,$$

а $E\{[Y - E(Y | \mathbf{x})]\} = 0$

Принимая во внимание, что $[Y - E(Y | \mathbf{x})]^2$ не зависит от \tilde{S}_m

получаем $E_{\Omega_m} E\{[Y - E(Y | \mathbf{x})]^2\} = E\{[Y - E(Y | \mathbf{x})]^2\}$

Разложение обобщённой ошибки

В итоге

$$\Delta_G = E_{\Omega} \{ [Y - E(Y | \mathbf{x})]^2 \} + E_{\Omega_m} E_{\Omega} [E(Y | \mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \}$$

Введём обозначение

$$\tilde{A}(\mathbf{x}) = E_{\Omega_m} \{ A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m) \}$$

Компонента разложения

$$E_{\Omega_m} E_{\Omega} [E(Y | \mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \}$$

Может быть представлена в виде

$$E_{\Omega_m} E_{\Omega} [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x}) + \tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \} =$$

Разложение обобщённой ошибки

$$= E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})]^2 \} + E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \} + \\ + E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)] [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})] \}$$

Справедливо равенство

$$E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)] [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})] \} = 0$$

Действительно

$$E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)] [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})] \} = \\ = E_{\Omega} \{ [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})] E_{\Omega_m} \{ [\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)] \} \}$$

Разложение обобщённой ошибки

Из определения $\tilde{A}(\mathbf{x})$ следует

$$E_{\Omega_m} \{[\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]\} = 0$$

В итоге справедливо трёхкомпонентное разложение обобщённой квадратичной ошибки Δ_G

$$\begin{aligned} \Delta_G &= E_{\Omega} \{[Y - E(Y | \mathbf{x})]^2\} + E_{\Omega} \{[E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})]^2\} + \\ &\quad + E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{[\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2\} = \\ &= \Delta_N + \Delta_B + \Delta_V \end{aligned}$$

Разложение обобщённой ошибки

Шумовая компонента

$$\Delta_N = E_{\Omega} \{ [Y - E(Y | \mathbf{x})]^2 \}$$

является минимально достижимой квадратичной ошибкой прогноза, которая не может быть устранена с использованием только математических средств.

Разложение обобщённой ошибки

Составляющая сдвига (Bias)

$$\Delta_B = E_{\Omega} \{ [E(Y | \mathbf{x}) - \tilde{A}(\mathbf{x})]^2 \}$$

Высокое значение компоненты сдвига в модели $\tilde{M} = \{A: \tilde{X} \rightarrow \tilde{Y}\}$

Алгоритмов, достаточно хорошо аппроксимирующих объективно существующую зависимость Y от переменных X_1, \dots, X_n

Составляющая сдвига может быть снижена путём включения в модель

Дополнительных алгоритмов прогнозирования, позволяющих повысить точность аппроксимации

Разложение обобщённой ошибки

Дисперсионная составляющая (Variance)

$$\Delta_V = E_{\Omega_m} E_{\Omega} \{ [\tilde{A}(\mathbf{x}) - A(\mathbf{x}, \tilde{S}_m)]^2 \}$$

характеризует неустойчивость обученных прогнозирующих алгоритмов при статистически возможных изменениях в обучающих выборках. Дисперсионная составляющая возрастает при небольших размерах обучающей выборки. Дисперсионная составляющая может быть снижена путём выбора сложности модели, соответствующей размеру обучающих данных.

Разложение обобщённой ошибки

Таким образом существует

Bias-Variance дилемма

Составляющая сдвига может быть снижена путём увеличения разнообразия модели. Однако увеличение разнообразия модели при недостаточном объёме обучающих данных ведёт к росту компоненты сдвига.

Наиболее высокая точность прогноза достигается, при поддержании правильного баланса между разнообразием используемой модели и объёмом обучающих данных

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Использование стандартного варианта метода наименьших квадратов ведёт к увеличению неустойчивости обучения при увеличении числа X переменных при ограниченном размере обучающей выборки \tilde{S}_t . Небольшое изменение векторных описаний объектов \tilde{S}_t приводит к значительному изменению оценок регрессионных параметров β_0, \dots, β_n . Подобные изменения оценок β_0, \dots, β_n ведёт к возрастанию вариационной компоненты Δ_V и следовательно к увеличению всей обобщённой ошибки.

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Неустойчивость обучения ещё более возрастает при наличии явления мультиколлинеарности.

Одним из возможных способов борьбы с неустойчивостью является использование методов регуляризации. На первом этапе переходим от исходных переменных X_1, \dots, X_n к стандартизированным X_1^s, \dots, X_n^s , где

$$X_i^s = \frac{X_i - \tilde{X}_i}{\tilde{\sigma}_i}, \quad \tilde{X}_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_{ji}, \quad \tilde{\sigma}_i = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (x_{ji} - \tilde{X}_i)^2}$$

а также от Y к $Y^s = Y - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m y_j$

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

От стандартного функционала метода наименьших квадратов

$$Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left[y_j - \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji} \right]^2$$

переходим к регуляризованному функционалу ,
соответствующему методу гребневая регрессия

$$Q_r(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left[y_j^s - \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji}^s \right]^2 + \gamma \sum_{i=0}^n \beta_i^2$$

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Слагаемое $\gamma \sum_{i=0}^n \beta_i^2$, где γ - положительный вещественный параметр, носит название штрафной функции или просто штрафа. Необходимым условием минимума функционала $Q_r(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)$ является выполнение системы из уравнений

$$\frac{\partial Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)}{\partial \beta_0} = 2 \left[\sum_{j=1}^m y_j \hat{x}_{j1}^s - \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji}^s \hat{x}_{j1}^s + \gamma \beta_0 \right] = 0 \quad (5)$$

.....

$$\frac{\partial Q(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n)}{\partial \beta_n} = 2 \left[\sum_{j=1}^m y_j \hat{x}_{jn}^s - \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji}^s \hat{x}_{jn}^s + \gamma \beta_n \right] = 0$$

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Таким образом вектор оценок регрессионных коэффициентов в методе гребневая регрессия $\tilde{\boldsymbol{\beta}} = (\tilde{\beta}_0, \dots, \tilde{\beta}_n)$ является решением системы (5).

В матричной форме система (5) может быть записана в виде

$$-(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{y}^t + [(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I] \tilde{\boldsymbol{\beta}}^t = 0$$

или в виде

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}}^t = (\mathbf{X}^s)^t (\mathbf{y}^s)^t [(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I]^{-1}$$

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Отметим, что произведение $(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X}$ представляет собой симметрическую неотрицательно определённую матрицу.

Матрица $[(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I]$ также является симметрической матрицей.

Каждому собственному значению λ_i матрицы $(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X}$ соответствует собственное значение матрицы $[(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I]$ -
 $= \lambda_i + \gamma$

Таким образом минимальное собственное значение матрицы

$[(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I]$ удовлетворяет неравенству $\lambda_{\min} \geq \gamma$

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Откуда следует, что всегда $\det[(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I] > 0$, а обратная

матрица $[(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I]^{-1}$ всегда существует.

Большая величина $\det[(\mathbf{X}^s)^t \mathbf{X} + \gamma I]$ приводит к относительно небольшим изменениям оценок регрессионных коэффициентов при небольших изменениях в обучающих выборках.

Методы регрессии, основанные на регуляризации по Тихонову

Наряду с гребневой регрессией в последние годы получил распространение метод Лассо, основанный на минимизации функционала

$$Q_{Lasso}(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [y_j^s - \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji}^s]^2 + \gamma \sum_{i=0}^n |\beta_i|, \text{ а также}$$

метод elastic net, основанный на минимизации функционала

$$Q_r(\tilde{S}_t, \beta_0, \dots, \beta_n) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [y_j^s - \sum_{i=1}^{n+1} \beta_i \hat{x}_{ji}^s]^2 + \gamma \sum_{i=0}^n [\alpha |\beta_i| + (1 - \alpha) \frac{1}{2} \beta_i^2]$$

$$\alpha \in [0, 1]$$