4. Многомерный регрессионный анализ

Использование для решения задачи однооткликового метода наименьших квадратов:

В моделях - объясняющих переменных x_i несколько, результирующая переменная (отклик) y, одна – множественная (многофакторная) регрессия (с 1-откликом).

Общий вид

$$M(y \mid x_1, x_2, \ldots, x_n) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) + \varepsilon$$

Линейная форма (модель)

$$\overset{\Delta}{y} = y + \mathrm{v} = a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k$$

Неизвестных v и a_i больше числа уравнений – надо дополнительная информация, например на поправки v.

Требование: найти такие a_i чтобы $\Phi = [\mathrm{v}^2] = \mathrm{v}^T\mathrm{v}$ была минимальной для всех наборов a_i – метод наименьших квадратов (МНК)

4. Многомерный регрессионный анализ

Общая (теоретическая) последовательность решения для получения коэффициентов и оценки точности для множественной 1-откликовой регрессии – сведения процесса поиска коэффициентов к задаче поиска экстремума целевой функции (функции качества).

Алгебраический и матричный подход. Шаги:

1. Из линейной модели

$$\hat{y} = y + \mathrm{v} = a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k$$

выражаем поправки v

$$\mathrm{v} = \hat{y} - y = \left(a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k \right) - y$$

4. Многомерный регрессионный анализ

2. Запишем целевую функцию Ф

$$\hat{O} = [v^2] = [(y - y)^2] = \left[\left(\left(a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k \right) - y \right)^2 \right]$$

которую надо минимизировать в точке a_i

3. От функции Ф возьмем производные по a_1, a_2 , …,a_k и полученные выражения приравняем к нулю

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \hat{O}}{\partial a_1} = 2\left[\left(\left(a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k \right) - y \right) \cdot x_1 \right] = 0 \\ \dfrac{\partial \hat{O}}{\partial a_2} = 2\left[\left(\left(a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k \right) - y \right) \cdot x_2 \right] = 0 \\ \\ \dfrac{\partial \hat{O}}{\partial a_k} = 2\left[\left(\left(a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k \right) - y \right) \cdot 1 \right] = 0 \end{cases}$$

4. Многомерный регрессионный анализ

4. Систему делим на 2, раскрываем сумму с группировкой и имеем

$$\begin{cases} [x_1^2]a_1 + [x_1x_2]a_2 + \ldots + [x_1x_n]a_k = [x_1y] \\ [x_2x_1]a_1 + [x_2^2]a_2 + \ldots + [x_2x_n]a_k = [x_2y] \\ \vdots \\ [x_nx_1]a_1 + [x_nx_2]a_2 + \ldots + na_k = [y] \end{cases} = \begin{cases} N_{11}a_1 + N_{12}a_2 + \ldots + N_{1n}a_k = b_1 \\ N_{21}a_1 + N_{22}a_2 + \ldots + N_{2n}a_k = b_2 \\ \vdots \\ N_{k1}a_1 + N_{k2}a_2 + \ldots + N_{kk}a_k = b_k \end{cases}$$

совместную систему нормальных уравнений (?). Размер по числу определяемых коэффициентов a_i. Решение – необходимые коэффициенты a_i.

Алгебраический вид: не совсем удобен для выводов, может быть удобен для анализа.

4. Многомерный регрессионный анализ

Минимизация целевой функции в матричном виде по шагам:

1. Линейная модель $\overset{\triangle}{y} = y + \mathrm{v} = a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k$ в матричном виде

$$\mathrm{v} = X \cdot a - y$$

-система уравнений поправок с матрицей плана X и вектором свободных членов y

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \ldots & x_{1(k-1)} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2(k-1)} & 1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 1 \\ x_{n1} & x_{n1} & \ldots & x_{n(k-1)} & 1 \end{pmatrix}, \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{pmatrix}$$

4. Многомерный регрессионный анализ

Условие МНК – Ф = $v^T v = [v^2]$ =min, $v = X \cdot a - y$

Минимизация в матричном виде сразу по всему вектору *a*

$$\frac{\partial \hat{O}}{\partial a} = \frac{\partial \hat{O}}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial a} = 2v^T \cdot X = 0$$

Откуда *лемма Гаусса*

$$X^T \cdot v = 0$$

Подставив вид v - совместная система нормальных уравнений

$$X^T \left(X \cdot a - y \right) = 0 \rightarrow$$

$$X^T X \cdot a = X^T y \rightarrow$$

$$N \cdot a = b$$

4. Многомерный регрессионный анализ

Из вида уравнений поправок

$$\mathrm{v} = X \cdot a - y$$

-левая трансформация Гаусса

$$X^T \cdot \mathrm{v} = X^T \cdot X \cdot a - X^T \cdot y$$

$$\downarrow$$

$$0 = N \cdot a - b$$

- та же совместная система нормальных уравнений. Решение – через обратную матрицу $N^{-1} = Q$

$$a = Q \cdot b$$

4. Многомерный регрессионный анализ

Практическая реализация по шагам:

1. Составляется модель (например линейная многофакторная с 1-откликом)

$$\hat{y} = y + \mathrm{v} = a_1 x_1 + a_1 x_1 + \ldots + a_k$$

2. Строится матрица плана X их коэффициентов при определяемых величинах в модели и вектор свободных членов из элементов моделируемого ряда y

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \ldots & x_{1(k-1)} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2(k-1)} & 1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 1 \\ x_{n1} & x_{n1} & \ldots & x_{n(k-1)} & 1 \end{pmatrix} \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{pmatrix}$$

4. Многомерный регрессионный анализ

3. Для системы нормальных уравнений $N \cdot a = b$ строится матрица нормальных уравнений N и вектор свободных членов системы нормальных уравнений b

$$N = X^{\mathrm{T}} \cdot X$$

$$b = X^{\mathrm{T}} \cdot y$$

4. Решаем систему с полученными матрицами методом обращения

$$N^{-1} = Q \qquad\qquad a = Q \cdot b$$

5. Модельные значения

$$\hat{y} = y + v = X \cdot a$$

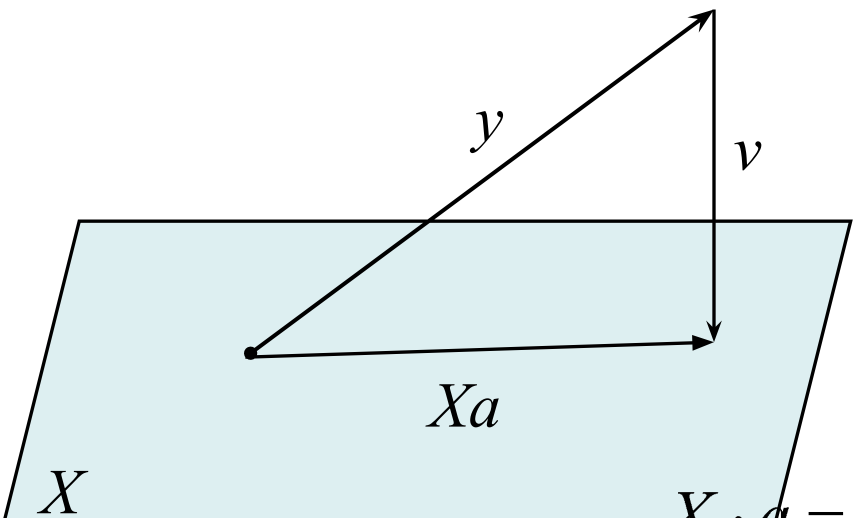
Шаги универсальны для любых моделей линейного (полиномиального) или линеаризованного вида.

4. Многомерный регрессионный анализ

Графическая трактовка метода наименьших квадратов

Модель в векторах - $y + \mathrm{v} = X \cdot a$. Тогда имеем

Гиперплоскость – матрица плана X, вектор моделируемых величин - y



Разложение y на ортогональные составляющие

$$y = X \cdot a - \mathrm{v}$$

$$y = P \cdot y + P^{\perp} \cdot y, \quad P + P^{\perp} = \pm E$$

$$P = X \cdot Q \cdot X^{T}$$

$$P^{\perp} = X \cdot Q \cdot X^{T} - E$$

$$X \cdot a = P \cdot y = X \cdot Q \cdot X^{T} \cdot y \to a = Q \cdot X^{T} \cdot y$$

$$v = P^{\perp} \cdot y = \left(X \cdot Q \cdot X^{T} - E \right) \cdot y = \hat{y} - y$$

4. Многомерный регрессионный анализ

Оценка точности: модель, коэффициенты модели a_i, смоделированные величины $\hat{y}$ и поправки v. Основа – формула погрешности Бесселя и теорема переноса ошибок.

- для оценки модели надо $v = \hat{y} - y$ и тогда по Бесселю

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{\left[\mathrm{v}^2\right]}{n-k}} = \sqrt{\frac{\mathrm{v}^{\mathrm{T}}\mathrm{v}}{n-k}} = \sqrt{\frac{\hat{O}}{t}}$$

Вычисления поправок v

$$\mathrm{v} = X \cdot a - y = \hat{y} - y = (XQX^T - E)y$$

и целевой функции Ф

$$\Phi = \mathrm{v}^{\mathrm{T}}\mathrm{v} = y^T \cdot (E - XQX^T) \cdot y$$

4. Многомерный регрессионный анализ

- для оценки точности вектора коэффициентов регрессии a:

Выражаем коэффициенты линейно через измерения y с известной ковариационной матрицей K_y

$$a = (Q \cdot X^T) \cdot y$$

По теореме переноса ошибок

$$K_a = F \cdot K_y \cdot F^T, \quad F = Q \cdot X^T$$

Окончательно

$$K_a = F \cdot K_y \cdot F^{\mathrm{T}} = \left(QX^{\mathrm{T}}\right) \cdot K_y \cdot \left(XQ\right) = \sigma_0^2 \cdot Q$$

так как y – вектор, и $K_y = \sigma_0^2$

Эта оценка через ковариационную матрицу. Извлечь корень.

4. Многомерный регрессионный анализ

Оценка через матрицу обратных весов Q (матрицу кофакторов)

$$K_a = \sigma_0^2 \cdot Q, \qquad \sigma_{a_i} = \sigma_0 \cdot \sqrt{Q_{ii}}$$

Оценка смоделированных значений $\hat{y}$. Линейное выражение

$$\hat{y} = X \cdot a = (X \cdot Q \cdot X^T) \cdot y$$

По теореме переноса ошибок

$$K_{\hat{y}} = F \cdot K_y \cdot F^T = \sigma_0^2 (X \cdot Q \cdot X^T) \cdot (X \cdot Q \cdot X^T) =$$

$$= \sigma_0^2 (X \cdot Q \cdot X^T) = \sigma_0^2 \cdot Q_{\hat{y}}$$

Оценка через матрицу обратных весов Q (матрицу кофакторов

$$K_{\hat{y}} = \sigma_0^2 \cdot Q_{\hat{y}}, \qquad \sigma_{\hat{y}_i} = \sigma_0 \cdot \sqrt{Q_{\hat{y}\,ii}}$$

3. Многомерный регрессионный анализ

Использование для решения задачи многооткликовой регрессии метода наименьших квадратов

Основные виды:

-Матричный метод наименьших квадратов

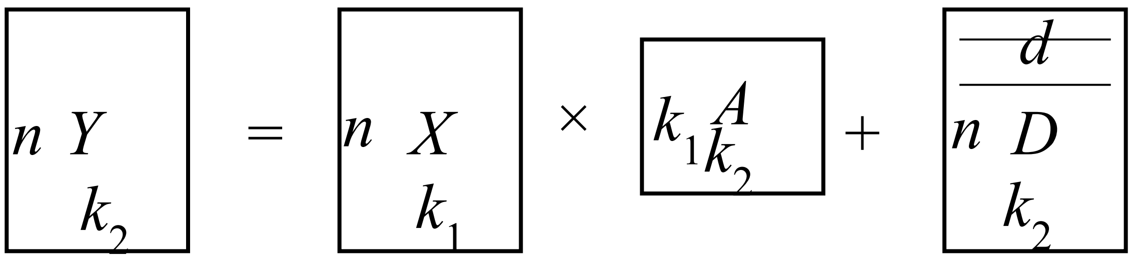
-Метод «растяжения».

Основная модель для обоих методов: из k рядов k_1 – факторные X, k_2 - отклик Y

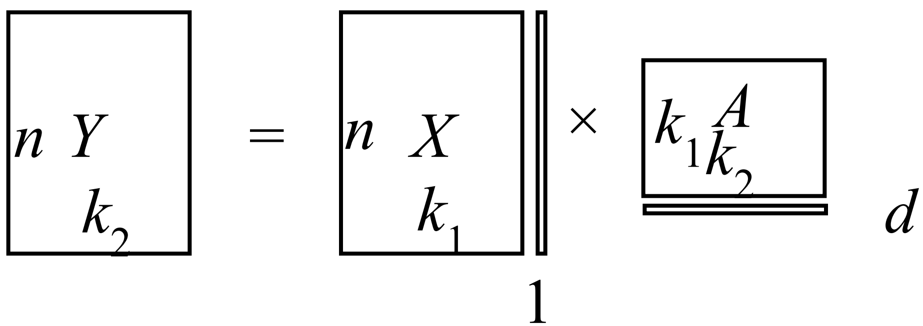
$$\left(y_1, y_2, \ldots, y_{k_2}\right) = f\left(x_1, x_2, \ldots, x_{k_1}\right) \to Y = f(X)$$

3. Многомерный регрессионный анализ

Линейная модель с размерами



Более удобная линейная модель с размерами

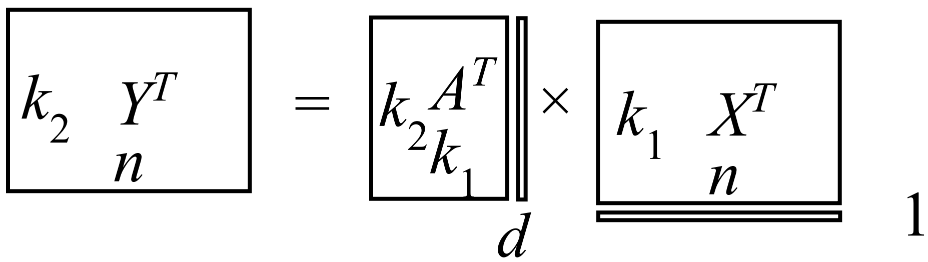


или с расширенными матрицами

$$Y = X' \cdot A'$$

3. Многомерный регрессионный анализ

Не дает естественную алгебраическую запись- транспонирование



или с расширенными матрицами

$$Y^T = A'^T \cdot X'^T$$

Реальная модель с матрицей поправок V

$$Y^T + V^T = A'^T \cdot X'^T$$

Решается под матричным условием МНК с $V' = vec(V^T)$

$$\Phi = V'^T \cdot V' = Trace(V^T \cdot V)$$

3. Многомерный регрессионный анализ

Минимизация целевой функции Φ с

$$\underset{k_1\times n}{V^{\mathrm{T}}} = \underset{k_1\times(k_2+1)}{A'^{T}} \cdot \underset{(k_2+1)\times n}{X'^{\mathrm{T}}} - \underset{k_1\times n}{Y^{\mathrm{T}}}$$

совместная система нормальных уравнений через правую трансформацию Гаусса (домножение на X')

$$Y^{\mathrm{T}} \cdot X' = 0 = M \cdot X'^{\mathrm{T}} \cdot X' - Y^{\mathrm{T}} \cdot X' = M \cdot N - b$$
$$M \cdot N = b.$$

Решение через обращение

$$N^{-1} = Q$$

,

$$\hat{M} = b \cdot Q$$

3. Многомерный регрессионный анализ

Оценка точности производится по обычной схеме:

– погрешность модели

$$\hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\mathrm{v}^{\mathrm{T}}\mathrm{v}}{n_0 - k}}$$

n_0 – число всех измерений, k – число необходимых измерений. Матричная операции $vec(X)$, для растягивания по столбцам матрицы X в вектор-столбец чтобы получить вектор поправок v из матрицы поправок V

$$\mathrm{v} = vec\left(V^{\mathrm{T}}\right)$$

Квадратичную форму Ф = $\mathrm{v}^{\mathrm{T}}\mathrm{v}$, можно определить на основе известной формулы

$$\hat{\mathrm{O}} = Y \cdot \left(XQX^{\mathrm{T}} - E\right) \cdot Y^{\mathrm{T}} = Y \cdot P \cdot Y^{\mathrm{T}}$$

3. Многомерный регрессионный анализ

– погрешности определения коэффициентов через ковариационную матрицу

$$K_M = \hat{\sigma}_0 \cdot Q'$$

где матрица кофакторов оцененных параметров определена как

$$Q' = E \otimes \left(X'^{\mathrm{T}} \cdot X' \right)^{-1} = E \otimes Q$$

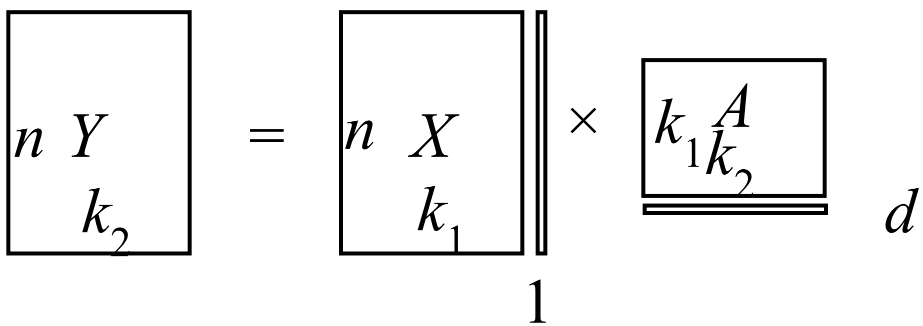
Здесь E – единичная матрица размера $(k_2 + 1) \times (k_2 + 1)$, $\otimes$ - символ *произведения Кронекера*.

Упрощения из-за дублирования – вычисляют 1 блок, все остальные эквивалентны.

3. Многомерный регрессионный анализ

Метод растяжения

Основная матричная модель



С расширенными матрицами

$$Y = X' \cdot A'$$

Переписывается так, чтобы матрица неизвестных А стала вектором неизвестных а. модификация X и Y- сведение к обычному векторному МНК с стандартной схемой и оценкой точности.