

4. Многомерный регрессионный анализ

Использование для решения задачи однооткликowego метода наименьших квадратов:

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

Общий вид

$$M(y | x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) + \varepsilon$$

Линейная форма (модель)

$$\hat{y} = y + v = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_k x_k$$

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

Требование: найти такие a_i чтобы $\Phi = [v^2] = v^T v$ 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-откликной регрессии – сведения процесса поиска коэффициентов к задаче поиска экстремума целевой функции (функции качества).

Алгебраический и матричный подход. Шаги:

1. Из линейной модели

$$\overset{\text{W}}{y} = y + v = a_1x_1 + a_1x_1 + \dots + a_k$$

выражаем поправки v

$$v = \overset{\text{W}}{y} - y = (a_1x_1 + a_1x_1 + \dots + a_k) - y$$

4. Многомерный регрессионный анализ

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

$$\left\{ \begin{array}{l} [x_1^2]a_1 + [x_1x_2]a_2 + \dots + [x_1x_n]a_k = [x_1y] \\ [x_2x_1]a_1 + [x_2^2]a_2 + \dots + [x_2x_n]a_k = [x_2y] \\ \quad \quad \quad \boxtimes \\ [x_nx_1]a_1 + [x_nx_2]a_2 + \dots + na_k = [y] \end{array} \right. = \left\{ \begin{array}{l} N_{11}a_1 + N_{12}a_2 + \dots + N_{1n}a_k = b_1 \\ N_{21}a_1 + N_{22}a_2 + \dots + N_{2n}a_k = b_2 \\ \quad \quad \quad \boxtimes \\ N_{k1}a_1 + N_{k2}a_2 + \dots + N_{kk}a_k = b_k \end{array} \right.$$

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 $\hat{y} = y + v = a_1x_1 + a_1x_1 + \dots + a_k$ В матричном виде

$$v = X \cdot a - y$$

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

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

4. Многомерный регрессионный анализ

Условие МНК – $\Phi = \mathbf{v}^T \mathbf{v} = [\mathbf{v}^2] = \min$, $\mathbf{v} = X \cdot \mathbf{a} - \mathbf{y}$

Минимизация в матричном виде сразу по всему вектору \mathbf{a}

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

Откуда лемма Гаусса

$$X^T \cdot \mathbf{v} = 0$$

Подставив вид \mathbf{v} - совместная система нормальных уравнений

$$X^T (X \cdot \mathbf{a} - \mathbf{y}) = 0 \rightarrow$$

$$X^T X \cdot \mathbf{a} = X^T \mathbf{y} \rightarrow$$

$$N \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}$$

4. Многомерный регрессионный анализ

Из вида уравнений поправок

$$v = X \cdot a - y$$

-левая трансформация Гаусса

$$X^T \cdot v = X^T \cdot X \cdot a - X^T \cdot y$$

↓

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

- 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)

$$\hat{y} = y + v = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_k$$

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

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

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

$$N = X^T \cdot X$$

$$b = X^T \cdot y$$

4. Решаем систему с полученными матрицами методом обращения

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

5. Модельные значения

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

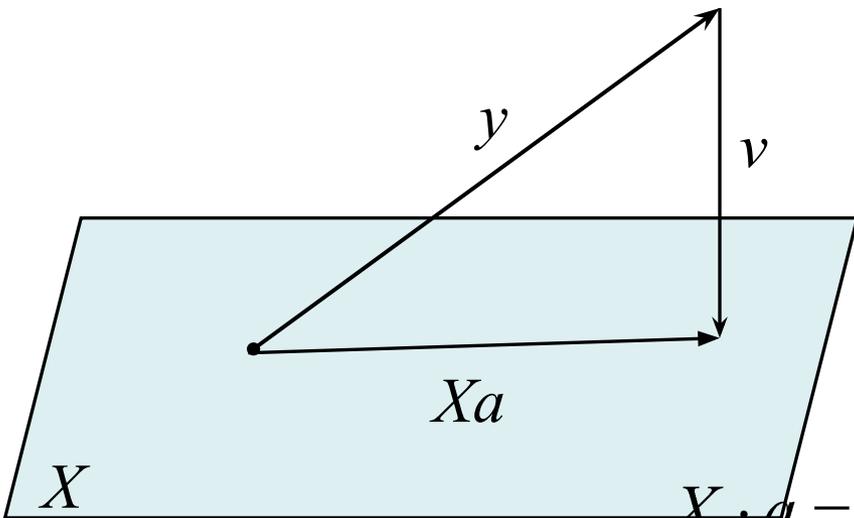
Шаги универсальны для любых моделей линейного (полиномиального) или линеаризованного вида.

4. Многомерный регрессионный анализ

Графическая трактовка метода наименьших квадратов

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

Гиперплоскость – матрица плана X , вектор моделируемых величин - y



Разложение y на ортогональные составляющие

$$y = X \cdot a - v$$

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

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

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

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

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

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

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

Вычисления поправок v

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

и целевой функции Φ

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

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

$$K_a = F \cdot K_y \cdot F^T = (QX^T) \cdot K_y \cdot (XQ) = \sigma_0^2 \cdot Q$$

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)

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

Оценка смоделированных значений \hat{y} . Линейное выражение

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

По теореме переноса ошибок

$$\begin{aligned} K_{\hat{y}} &= F \cdot K_y \cdot F^T = \sigma_0^2 (X \cdot Q \cdot X^T) \cdot (X \cdot Q \cdot X^T) = \\ &= \sigma_0^2 (X \cdot Q \cdot X^T) = \sigma_0^2 \cdot Q_{\hat{y}} \end{aligned}$$

Оценка через матрицу обратных весов Q (матрицу кофакторов)

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

3. Многомерный регрессионный анализ

Использование для решения задачи многооткликковой 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

$$(y_1, y_2, \dots, y_{k_2}) = f(x_1, x_2, \dots, x_{k_1}) \rightarrow Y = f(X)$$

3. Многомерный регрессионный анализ

Линейная модель с размерами

$$\begin{array}{c} \boxed{n} \\ \boxed{Y} \\ \boxed{k_2} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{n} \\ \boxed{X} \\ \boxed{k_1} \end{array} \times \begin{array}{c} \boxed{k_1} \\ \boxed{A} \\ \boxed{k_2} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{d} \\ \boxed{n} \\ \boxed{D} \\ \boxed{k_2} \end{array}$$

Более удобная линейная модель с размерами

$$\begin{array}{c} \boxed{n} \\ \boxed{Y} \\ \boxed{k_2} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{n} \\ \boxed{X} \\ \boxed{k_1} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\parallel} \\ \boxed{\parallel} \\ \boxed{1} \end{array} \times \begin{array}{c} \boxed{k_1} \\ \boxed{A} \\ \boxed{k_2} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\parallel\parallel} \\ \boxed{d} \end{array}$$

или с расширенными матрицами

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

3. Многомерный регрессионный анализ

Не дает естественную алгебраическую запись- транспонирование

$$\begin{array}{|c|} \hline k_2 \quad Y^T \\ \hline n \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline k_2 A^T \\ \hline k_1 \\ \hline d \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|} \hline k_1 \quad X^T \\ \hline n \\ \hline \end{array} \quad 1$$

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 $V' = \text{vec}(V^T)$

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

3. Многомерный регрессионный анализ

Минимизация целевой функции Φ с

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

$k_1 \times n \quad k_1 \times (k_2 + 1) \quad (k_2 + 1) \times n \quad k_1 \times n$

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

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

Решение через обращение

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

,

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

3. Многомерный регрессионный анализ

Оценка точности производится по обычной схеме:

– погрешность модели

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

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

$$\mathbf{v} = \text{vec}(V^T)$$

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

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

3. Многомерный регрессионный анализ

– погрешности определения коэффициентов через ковариационную матрицу

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

где матрица кофакторов оцененных параметров определена как

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

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

$$\begin{array}{|c|} \hline n \ Y \\ \hline k_2 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline n \ X \\ \hline k_1 \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|} \hline k_1 \ A \\ \hline k_2 \\ \hline \end{array} \quad d$$

С расширенными матрицами

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

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