第六周实验作业

2021 年 4 月 11 日

1 Week6 Random Simulation

1.1 背景描述

设计一个模拟: 实现欠拟合和过拟合对多元线性回归模型的影响。

在模拟中，我们可以定义 $Bias_k^2$, Var_k, MSE_k 分别为第 k 个线性回归模型的偏差平方、方差和均方误差。

1.2 数据描述

参数设置如下:

i. 样本量 $n = 300$;

ii. 变量维度 $(p, p_1) = (20, 10)$;

iii. 自变量的波动 $\sigma_x = 0.2$;

iv. 自变量的相依程度 $\rho_x = 0$;

v. 误差的波动 $\sigma_y = 3$;

vi. 预测点的位置 $\boldsymbol{x}_0 = (1, \mathbf{0.05}_{20})$;

vii. 重复次数 $M = 5000$

1.3 问题

(a) 在同一张图上采用三种颜色绘制 $Bias_k^2$、Var_k 和 MSE_k 的三条曲线。

(b) 标示出 MSE 最小所对应的自变量个数。

1.4 解决方案

根据作业中给出的要求，编写 python 代码如下。首先加载相应的库函数。

[1]:
```
import numpy as np
import random
import matplotlib.pyplot as plt
```

然后定义重要的函数。其中，epsilon 函數用於生成向量 $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_1, \epsilon_2, ..., \epsilon_n)$，其中 ϵ_i 独立同分布于正态分布 $N(0, \sigma_y^2)$。y_real 函數用於根據給定的 beta 和生成 X 并構造 y 向量，公式是 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$，其中 beta 由參數指定，X 在函數內部生成。

[2]:
```
def epsilon(n): # 生成 epsilon 向量
    return np.mat([random.gauss(0,sig_y) for i in range(n)]).T

def y_real(beta, n): # 生成 X 和 y
    x = []
    for j in range(n):
        x_l = [random.gauss(0,sig_x) for i in range(p + 1)]
        x_l[0] = 1.0 # 生成矩阵 X 的每一行 xi，第一列恒为 1
        x.append(x_l)
    x = np.mat(x)
    y = np.matmul(x, beta) + epsilon(n) # y 的计算公式
    return y, x
```

然后设置合适的参数并进行初始化，其中 $\boldsymbol{\beta}$ 的前 p_1 个分量的值爲 1，其余的值爲 0。

[3]:
```
n = 300
p = 20
p1 = int(p * 0.5)
sig_x = 0.2
sig_y = 3
x0 = [1 if i == 0 else 0.05 for i in range(p + 1)]
M = 5000
beta = np.mat([1 if i <= p1 else 0 for i in range(p + 1)]).T
y0_e = np.matmul(x0, beta) # 这个变量是在计算偏差平方和均方误差时所需的 x0beta
```

```
bia = [[] for i in range(p + 1)] # 记录每一次的 y0_hat-x0beta
y0_hats = [[] for i in range(p + 1)] # 记录每一次的 y0_hat
```

对于每一轮，利用公式 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$ 計算出 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的值，然後利用公式 $\hat{y_0}^{(k)} = \boldsymbol{x_0}'\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)}$ 計算出 y0 的估計值，然後把它和 $\hat{y_0}^{(k)} - \boldsymbol{x}_0'\boldsymbol{\beta}$ 記録到列表中。

[4]:
```
for m in range(M):
    y, x = y_real(beta,  n)
    re = np.matmul(x.T,x).I
    beta_hat = np.matmul(np.matmul(re,x.T),y)
    beta_hat_k = beta_hat
    for k in range(p + 1): # 每一次
        y0_hat = np.matmul(x0, beta_hat_k)
        bi = float(y0_hat - y0_e)
        bia[p - k].append(bi)
        y0_hats[p - k].append(float(y0_hat))
        beta_hat_k[p - k] = 0
```

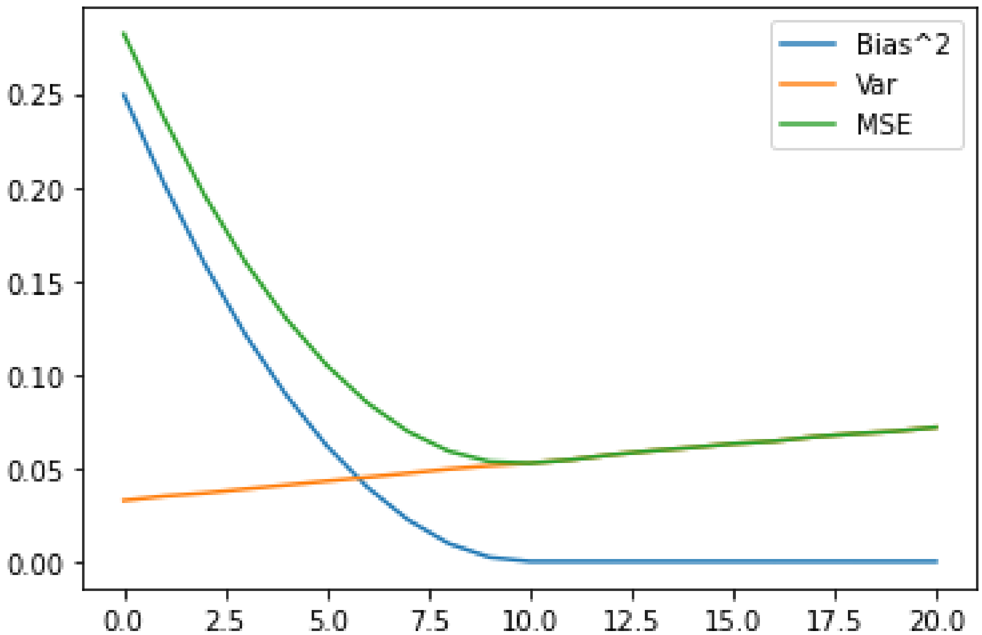
最后计算出 $Bias_k^2$, Var_k, MSE_k 并打印出 MSE 的值和图表。

[5]:
```
bias = []
mses = []
for k in range(p + 1):
    y0_hat_l = np.array(y0_hats[k])
    bis = np.array(bia[k])
    biask = float(y0_hat_l.mean() - y0_e)
    bias.append(biask * biask)
    mse = bis * bis
    mses.append(mse.mean())
print("MSE")
for k in range(p + 1):
    print(k, ':', round(mses[k], 4))
```

```
MSE
0 : 0.2819
1 : 0.2364
2 : 0.1952
3 : 0.1597
```

```
4 : 0.1298
5 : 0.1048
6 : 0.0847
7 : 0.0695
8 : 0.059
9 : 0.0535
10 : 0.0526
11 : 0.0544
12 : 0.057
13 : 0.0592
14 : 0.0609
15 : 0.0629
16 : 0.0643
17 : 0.0666
18 : 0.0683
19 : 0.0697
20 : 0.0717
```

[6]:
```
T = np.array([x for x in range(p+1)])
l1 = np.array(bias)
l3 = np.array(mses)
l2 = l3 - l1
plt.plot(T, l1, label="Bias^2")
plt.plot(T, l2, label="Var")
plt.plot(T, l3, label="MSE")
plt.legend()
plt.show()
```



由此我们可以看出，随着 k 的不断增加，偏差平方非线性减小，在 k=10 处减小至接近 0；方差不断增大，大致呈线性。均方误差先增大后减小，并在 k=10 处取得最小值。在 k<10 时，所选参数数量过少，为欠拟合，此时偏差较大，但方差较小。在 k>10 时，所选参数数量过多，为过拟合，此时基本没有偏差，但方差较大。在 k=10 处，所选参数和原有的参数恰好相等，均方误差最小，为拟合最好的点。

此外，我还尝试了改变向量 beta 和 x0。将向量 beta 和 x0 的每个分量改为每次由高斯分布随机生成，打印出的图表如下图。

[7]:
```
def getmean(l_all):
    l_all = np.array(l_all).T
    l = []
    for k in l_all:
        l.append(k.mean())
    return np.array(l)


n = 300
p = 20
p1 = int(p * 0.5)
sig_x = 0.2
```

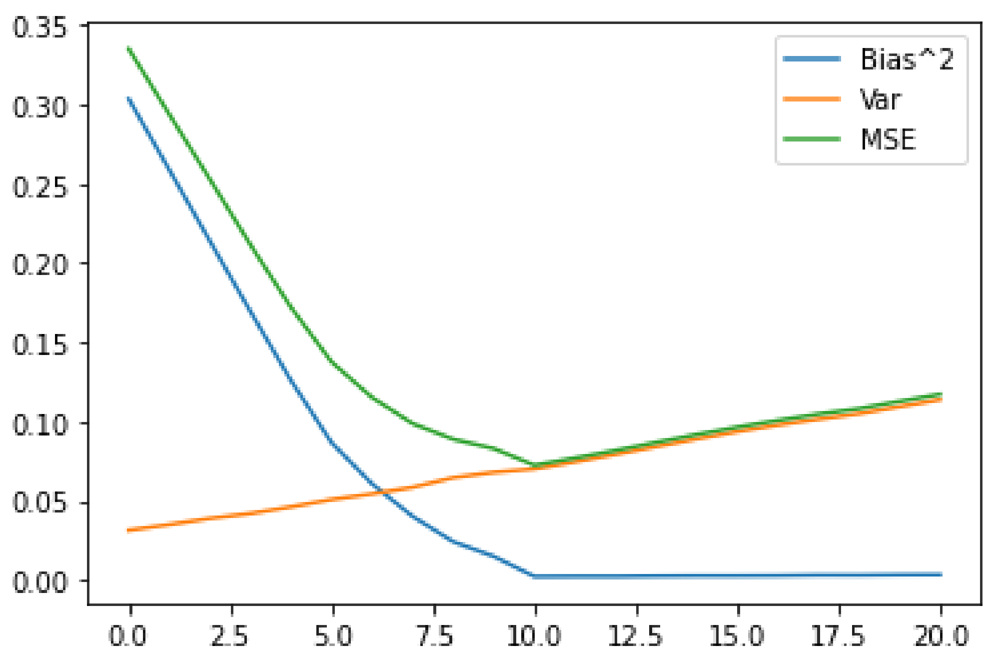
```
sig_y = 3
M = 4000
M1 = 100
l1_all = []
l2_all = []
l3_all = []
for m1 in range(M1):
    x0 = [1 if i == 0 else random.gauss(0.05,0.05) for i in range(p + 1)]
    beta = np.mat([random.gauss(1,1) if i <= p1 else 0 for i in range(p + 1)]).T
    y0_e = np.matmul(x0, beta)
    bia = [[] for i in range(p + 1)]
    y0_hats = [[] for i in range(p + 1)]
    for m in range(int(M/M1)):
        y, x = y_real(beta,  n)
        re = np.matmul(x.T,x).I
        beta_hat = np.matmul(np.matmul(re,x.T),y)
        beta_hat_k = beta_hat
        for k in range(p + 1):
            y0_hat = np.matmul(x0, beta_hat_k)
            bi = float(y0_hat - y0_e)
            bia[p - k].append(bi)
            y0_hats[p - k].append(float(y0_hat))
            beta_hat_k[p - k] = 0

    bias = []
    mses = []
    for k in range(p + 1):
        y0_hat_l = np.array(y0_hats[k])
        bis = np.array(bia[k])
        biask = float(y0_hat_l.mean() - y0_e)
        bias.append(biask * biask)
        mse = bis * bis
        mses.append(mse.mean())

    l1 = np.array(bias)
    l3 = np.array(mses)
```

```
    l2 = l3 - l1
    l1_all.append(l1)
    l2_all.append(l2)
    l3_all.append(l3)

l1_f = getmean(l1_all)
l2_f = getmean(l2_all)
l3_f = getmean(l3_all)
T = np.array([x for x in range(p + 1)])
plt.plot(T, l1_f, label="Bias^2")
plt.plot(T, l2_f, label="Var")
plt.plot(T, l3_f, label="MSE")
plt.legend()
plt.show()
```



通过和前面图表的比较可以看出，一方面这种情况下得到的图表中的三条曲线不如 beta 和 x0 固定时得到的平滑。另一方面根据纵轴的显示，三种评价指标的值同等增大了一些。这可能是因为引入了更多的随机元素导致的。可以预测，如果进行足够多轮的随机模拟，也可以得到相对平滑的曲线。