

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ЭКСТРАПОЛЯЦИИ РЕГРЕССИИ ПУТЕМ УЧЕТА ПОГРЕШНОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ

Постановка задачи

Имеется набор данных `dataset_0`, который содержит количественные предикторы `A_1`, `A_2`, `A_3`, `A_4`, `A_5` и количественную целевую переменную `b`. Набор данных `dataset_0` представляет собой точную зависимость целевой переменной `b` от предикторов.

Даны два набора данных `dataset_1` и `dataset_2`, каждый из которых содержит количественные предикторы `A_h_1`, `A_h_2`, `A_h_3`, `A_h_4`, `A_h_5` и количественную целевую переменную `b_d`. Наборы данных `dataset_1` и `dataset_2` моделируют результаты измерений `b` от предикторов и сгенерированы по данным `dataset_0` путем случайных отклонений предикторов в пределах 1% и целевой переменной `b` в пределах 5% от соответствующих точных значений из `dataset_0`.

Необходимо по данным `dataset_1` и `dataset_2` спрогнозировать значение целевой переменной `b_max` при значениях предикторов (1800, 1500, 1800, 2000, 1500). Датасет `dataset_0` использовать только для валидации обученных моделей.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

1. Характеристика датасетов

Значения предикторов в каждом наборе данных являются положительными вещественными числами, максимальное значение которых не превышает 1269. Значения целевой переменной в каждом наборе данных также являются положительными вещественными числами, максимальное значение которых не превышает 115.

Для `dataset_0` выявлена функциональная линейная зависимость целевой переменной от всех предикторов. При этом имеется практически абсолютная мультиколлинеарность всех предикторов.

Для `dataset_1` и `dataset_2` коэффициенты корреляции для всех предикторов между собой практически равны 1, а для целевой переменной с предикторами практически равны 0.99. Таким образом, для `dataset_1` и `dataset_2` также имеются практически функциональная линейная зависимость целевой переменной от предикторов и практически абсолютная мультиколлинеарность всех предикторов.

2. Обучение различных моделей

Данная задача относится к классу задач экстраполяции регрессии.

Обучение моделей выполнено на языке Python 3.

Обучение проводилось как при разбиении на обучающую и тестовую выборки (70/30), так и на полных наборах данных.

Модели строились на всех предикторах, которые масштабировались с помощью MaxAbsScaler.

Для обучения моделей применялись алгоритмы:

1) LinearRegression, Ridge, Lasso, ElasticNet, TheilSenRegressor из библиотеки Scikit-learn с подбором оптимальных значений их гиперпараметров по сетке с кросс-валидацией.

2) двухслойная нейронная сеть прямого распространения из библиотеки Keras с подбором оптимального числа нейронов на каждом слое.

3) регуляризация Тихонова с определением коэффициента регуляризации α методом обобщенной невязки [1].

Отличие алгоритма регуляризации Тихонова от модели Ridge из Scikit-learn состоит в том, что коэффициент регуляризации α определяется по условию оптимизации нестандартной метрики – обобщенной невязки, учитывающей информацию о погрешности измерения предикторов и целевой переменной.

Решение задачи регрессии – системы линейных уравнений $Az = b$ для модели на основе алгоритма регуляризации Тихонова имеет следующий вид

$$z = (A^T A + \alpha E)^{-1} A^T b \quad (1)$$

Уравнение обобщенной невязки для определения коэффициента регуляризации α имеет следующий вид

$$\|Az(\alpha) - b\|^2 - (h\|z(\alpha)\| + d)^2 = 0 \quad (2)$$

$$h = \delta_A \|A\| \quad (3)$$

$$d = \delta_b \|b\| \quad (4)$$

где $\| \cdot \|$ – обозначение нормы матрицы или вектора;

δ_A – относительная погрешность измерения элементов матрицы A ;

δ_b – относительная погрешность измерения элементов вектора b .

По условию данной задачи $\delta_A = 0,01$, $\delta_b = 0,05$.

Метрики, результаты прогноза целевой переменной b_{max} и их осредненные значения Mean для различных моделей регрессоров Scikit-learn приведены в таблицах 1 – 7. Там же приведены результаты прогнозов для нейронной сети, для модели на основе алгоритма регуляризации Тихонова и **точный прогноз** Accurate.

Таблица 1 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_1
(random_state = 1937 для train_test_split)

	LinRegr	Ridge	Lasso	ElastNet	TheilSen	Mean	NeuralNetwork	Regularized	Accurate
R2 train	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.98	0.923	
R2 test	0.979	0.979	0.979	0.979	0.979	0.979	0.979	0.916	
b_max	373.321	353.358	340.636	348.531	377.779	358.725	[255.42]	262.794	242.5

Таблица 2 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_1
(random_state = 1941 для train_test_split)

	LinRegr	Ridge	Lasso	ElastNet	TheilSen	Mean	NeuralNetwork	Regularized	Accurate
R2 train	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.922	
R2 test	0.979	0.979	0.979	0.979	0.979	0.979	0.979	0.916	
b_max	277.869	276.078	280.392	277.265	276.307	277.582	[270.946]	262.513	242.5

Таблица 3 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_1
(обучение на полном наборе данных)

	LinRegr	Ridge	Lasso	ElastNet	TheilSen	Mean	NeuralNet_best	Regularized	Accurate
R2	0.981	0.981	0.980	0.981	0.981	0.981	0.98	0.921	
b_max	316.934	303.941	291.151	307.120	323.745	308.578	[283.8]	262.533	242.5

Таблица 4 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_2
(random_state = 1968 для train_test_split)

	LinRegr	Ridge	Lasso	ElastNet	TheilSen	Mean	NeuralNetwork	Regularized	Accurate
R2 train	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.98	0.922	
R2 test	0.980	0.980	0.980	0.980	0.979	0.980	0.98	0.924	
b_max	114.390	149.757	208.054	215.942	119.067	161.442	[264.105]	262.611	242.5

Таблица 5 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_2
(random_state = 1901 для train_test_split)

	LinRegr	Ridge	Lasso	ElastNet	TheilSen	Mean	NeuralNetwork	Regularized	Accurate
R2 train	0.980	0.980	0.980	0.980	0.980	0.980	0.979	0.921	
R2 test	0.982	0.982	0.981	0.981	0.981	0.981	0.979	0.911	
b_max	229.391	267.201	255.334	267.729	232.893	250.510	[261.918]	262.074	242.5

Таблица 6 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_2
(обучение на полном наборе данных)

	LinRegr	Ridge	Lasso	ElastNet	TheilSen	Mean	NeuralNet_best	Regularized	Accurate
R2	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.981	0.979	0.923	
b_max	183.793	185.529	241.599	219.564	201.463	206.390	[277.5]	262.489	242.5

Таблица 7 – Метрики и результаты прогноза целевой переменной для dataset_0
(обучение на полном наборе данных)

	LinRegr	Ridge	TheilSen	Mean	NeuralNet_best	Regularized	Accurate
R2	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	
b_max	242.5	242.5	242.5	242.5		[269.4]	242.5

Примечание. dataset_0 сгенерирован при коэффициентах $z = (0.04, 0.035, 0.03, 0.02, 0.016)$

3. Анализ прогнозов различных моделей

Для dataset_1 диапазон осредненного прогноза Mean различных моделей регрессоров Scikit-learn составил от 277,6 до 358,7. Диапазон прогноза двухслойной нейронной сети составил от 255,4 до 283,8. Диапазон прогноза модели регуляризации Тихонова, учитывающей информацию о погрешности измерения предикторов и целевой переменной, составил от 262,5 до 262,8.

Для dataset_2 диапазон осредненного прогноза Mean различных моделей регрессоров Scikit-learn составил от 161,4 до 250,5. Диапазон прогноза двухслойной нейронной сети составил от 261,9 до 277,5. Диапазон прогноза модели регуляризации Тихонова, учитывающей информацию о погрешности измерения предикторов и целевой переменной, составил от 262,1 до 262,6.

Для dataset_0 значение прогнозов различных моделей регрессоров Scikit-learn составляет 242,5. Это же значение получается при вычислении **точного прогноза** по выражению $b_{\max} = A_{\max} \cdot z$, где $z = (0.04, 0.035, 0.03, 0.02, 0.016)$ – коэффициенты регрессии для генерации dataset_0. Значение прогноза модели регуляризации Тихонова для dataset_0 с учетом того, что для этого набора данных погрешности измерения переменных равны нулю, также составило 242,5. Значение прогноза двухслойной нейронной сети для dataset_0 составило 269,4.

Таким образом, несмотря на отличные метрики всех моделей регрессоров из библиотеки Scikit-learn, результаты их прогнозов не только имеют неприемлемую точность, но и являются неустойчивыми – небольшие погрешности измерений данных приводят к недопустимым погрешностям прогноза целевой переменной (в терминологии ML это означает, что модели переобучаются). Разброс (variance) осредненного прогноза различных моделей регрессоров составил $\pm 38\%$ при смещении (bias) 7%.

При этом результаты прогнозов двухслойной нейронной сети прямого распространения являются достаточно устойчивыми и имеют приемлемую точность. Разброс (variance) прогноза составил $\pm 5\%$ при смещении (bias) 11%.

Наилучшие устойчивые прогнозы с приемлемой точностью выдает модель регуляризации Тихонова, учитывающая информацию о погрешности измерения предикторов и целевой переменной. Разброс (variance) прогноза модели регуляризации Тихонова составил $\pm 0,1\%$ при смещении (bias) 8%.

4. Выводы

1. Игнорирование даже незначительной погрешности измерения значений предикторов и целевой переменной может привести к крайне большой погрешности прогноза экстраполяции регрессии.

2. Модели регрессоров Scikit-learn, обученные на наборах данных с мультиколлинеарными предикторами по условию оптимизации стандартных метрик Scikit-learn, могут привести к неустойчивым прогнозам экстраполяции с недопустимой погрешностью.

3. Для наборов данных с мультиколлинеарными предикторами для получения устойчивого прогноза экстраполяции с допустимой погрешностью следует использовать модель регуляризации Тихонова, учитывающую информацию о погрешности измерения предикторов и целевой переменной.

4. При отсутствии информации о погрешности измерения предикторов и целевой переменной следует использовать модели нейронных сетей прямого распространения с подбором оптимального числа нейронов на каждом слое по условию оптимизации стандартных метрик Scikit-learn.

Список литературы

1. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В.В., Ягола А. Г. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. – М.: Наука, 1983. – 200 с.