

МИНЕСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ
КАФЕДРА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И
АНАЛИЗА ДАННЫХ

Румянцев
Андрей Кириллович

**"Робастные оценки параметров регрессии при
наличии группирования выборки"**

Курсовая работа

Научный руководитель:
зав. кафедрой ММАД,
канд. физ.-мат. наук
Бодягин Игорь Александрович

Минск, 2018

Содержание

1	Введение	2
2	Модель функции регрессии с аномальными наблюдениями и оценки ее параметров	3
2.1	Метод наименьших квадратов	3
2.2	М-оценки	4
2.2.1	Способы выбора функции для решения экстремальной задачи в М-оценках	4
3	Моделирование функции регрессии с аномальными наблюдениями	5
4	Поиск breakdown point у МНК и М-оценок	6
4.1	Результаты программы	6
5	Построение оценки параметров регрессии с помощью группирования выборки	8
5.1	Построение функции правдоподобия	9
5.2	Метод секущих	10
5.3	Переклассификация выборки	10
6	Численные эксперименты	11
7	Заключение	11
	Список Литературы	11

1 Введение

Существует несколько подходов для оценки параметров регрессии, но далеко не все устойчивы к возникновению аномальных наблюдений. В реальной жизни аномальные наблюдения возникают постоянно, поэтому большинство методов просто неприменимо. В прошлом веке в работах Хьюбера была заложена теория робастного оценивания. Были предложены следующие робастные оценки[1]:

- М-Оценки
- R-Оценки
- L-Оценки

М-оценки – некоторое подобие оценок максимального правдоподобия (ММП-оценки - частный случай), L-оценки строятся на основе линейных комбинаций порядковых статистик, R-оценки – на основе ранговых статистик. В данном курсовом работе я буду моделировать функцию регрессии с аномальными наблюдениями, анализировать точность методов и находить для разных методов так называемый "breakdown point" – процент аномальных наблюдений, при котором увеличение количества наблюдений не повысит точность методов.

Также будет предложен новый способ оценивания параметров регрессии, где используется группирование выборки.

2 Модель функции регрессии с аномальными наблюдениями и оценки ее параметров

Введем модель линейной регрессии:

$$\begin{aligned} y_i &= \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_n x_{in} + \varepsilon_i, i = \overline{1, N} \\ y_i &= f(x_i, \beta) + \varepsilon_i, \\ f(x_i, \beta) &= \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_n x_{in} \end{aligned} \quad (1)$$

Или, в векторной форме:

$$y_i = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ x_{i1} \\ \vdots \\ x_{in} \end{pmatrix}^T + \varepsilon_i, \quad (2)$$

где y_i – i -е наблюдение из N наблюдений (N -объем выборки), $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$ – регрессоры, $\{\beta_k, k = \overline{0, n}\}$ – параметры регрессии, а ε_i – случайная ошибка i -го эксперимента, распределение которой подчиняется нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и дисперсией σ^2 .

В нашей задаче считаем параметры $\{\beta_k, k = \overline{0, n}\}$ неизвестными, их нам и требуется найти.

Но мы будем рассматривать не линейную регрессию, заданную формулами (1)-(2), а линейную регрессию с аномальными наблюдениями вида:

$$y_i^{\tilde{\varepsilon}} = (\xi_i) y_i + (1 - \xi_i) \eta_i, \quad (3)$$

где ξ_i принимает значение, равное 1, с вероятностью $1 - \tilde{\varepsilon}$ и значение, равное 0, с вероятностью $\tilde{\varepsilon}$, т.е.:

$$\begin{cases} p(\xi_i = 0) = \tilde{\varepsilon}, \\ p(\xi_i = 1) = 1 - \tilde{\varepsilon}. \end{cases}, \quad (4)$$

которая называется функцией линейной регрессии с выбросами. η_i – случайная величина из некоторого вообще говоря неизвестного распределения. Переменную $\tilde{\varepsilon}$ будем называть процентом аномальных наблюдений. Величины ξ_i, x_i и η_i являются независимыми. Теперь рассмотрим некоторые методы оценки параметров регрессии:

2.1 Метод наименьших квадратов

Предположим, что случайные ошибки подчиняются нормальному закону распределения вероятностей:

$$L\{\varepsilon_i\} = N_1(0, \sigma^2), i = \overline{1, n}. \quad (5)$$

Строим логарифмическую функцию правдоподобия. В силу (1) и (2) имеем:

$$L\{y_i\} = N_1(f(x_i; \beta), \sigma^2). \quad (6)$$

Логарифмическая функция правдоподобия выглядит так[2]:

$$l(\beta) = \ln \prod_{i=1}^n \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_i - f(x_i; \beta))^2}{2\sigma^2}} \right) = -\frac{1}{2}n \ln 2\pi\sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2}R^2(\beta), \quad (7)$$

$$R^2(\beta) = \sum_{i=1}^n (\delta y_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i, \beta))^2 \geq 0. \quad (8)$$

Тогда оценка максимального правдоподобия из формул (4)-(5) такова:

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta} R^2(\beta). \quad (9)$$

2.2 М-оценки

Швейцарский статистик П.Хьюбер предложил использовать М-оценки [2], которые являются решениями экстремальных задач вида:

$$\sum_{i=1}^n \phi(x_i; \beta) \rightarrow \min_{\beta}, \quad (10)$$

где $\phi(\cdot; \beta)$ -некоторая функция, определяющая конкретный тип оценок и их точность. Очевидно, что $\phi(\cdot; \beta) \equiv -\ln p(\cdot; \beta)$ дает обычную оценку максимального правдоподобия, построенная по модели без выбросов (1).

Рассмотрим теперь некоторые способы выбора $\phi(\cdot; \beta)$.

2.2.1 Способы выбора функции для решения экстремальной задачи в М-оценках

Для начала определим:

$$u_i = y_i^{\tilde{\varepsilon}} - (\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_n x_{in}). \quad (11)$$

Тогда существует такие методы[3]:

Способы выбора $\phi(\cdot; \beta)$	
Метод	Целевая функция
Метод Наименьших Квадратов	$\phi(\cdot; \beta)_{OLS} = u^2$
Хьюбера	$\phi(\cdot; \beta)_H = \begin{cases} \frac{1}{2}u^2, u \leq k, \\ k u - \frac{1}{2}k^2, u > k \end{cases}$
Биквадратный	$\phi(\cdot; \beta)_B = \begin{cases} \frac{k^2}{6}(1 - [1 - (\frac{u}{k})^2]^3), u \leq k \\ \frac{k^2}{6}, u > k \end{cases}$

3 Моделирование функции регрессии с аномальными наблюдениями

Для начала смоделируем функцию регрессии по методу (3). Для удобства моделируем регрессию с одномерными регрессорами $x_i, i = \overline{1, N}$.

Воспользуемся такими параметрами:

Параметры программы	
Переменная	значение
Размер выборки N	1000
Доля выбросов $\tilde{\varepsilon}$	0.1
Параметры регрессии β	(100, 4)
Регрессоры x_i	$\sim U(-5, 5)$
ε_i	$\sim N(0, 16)$
η_i	$\sim N(100, 100)$

$U(-5, 5)$ - равномерное распределение на отрезке $[-5, 5]$.

Получаем такой график:



Рис. 1: Вывод графика рассеяния (y_i, x_i)

4 Поиск breakdown point у МНК и М-оценок

Будем пользоваться той же моделью, как и в пункте 3. Для поиска того процента аномальных наблюдений, при котором увеличение количества элементов выборки не повышает точности метода будем делать так:

- Организуем цикл по процентам загрязнений $\tilde{\varepsilon}_i$ от $\tilde{\varepsilon}_0 = 0$ до $\tilde{\varepsilon}_{100} = 100$, увеличивая каждый раз $\tilde{\varepsilon}_i$ на 1;
- На каждой итерации будем 20 раз моделировать выборку с $N_1 = 1000$ и $N_2 = 3000$ наблюдений. На каждой такой итерации суммируем невязку с точными значениями параметров для каждого количества элементов, а потом находим среднее, поделив на количество суммирования, т.е. посчитаем усредненную невязку:

$$\widetilde{\delta}_1^{\tilde{\varepsilon}_i} = \frac{1}{20} \sum_{k=1}^{20} \left(\sum_{i=0}^n (\beta_i - \hat{\beta}_{ki}^{(N_1)})^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (12)$$

$$\widetilde{\delta}_2^{\tilde{\varepsilon}_i} = \frac{1}{20} \sum_{k=1}^{20} \left(\sum_{i=0}^n (\beta_i - \hat{\beta}_{ki}^{(N_2)})^2 \right)^{\frac{1}{2}}; \quad (13)$$

- если полученная усредненная невязка при 1000 наблюдений меньше либо равна невязке при 3000 наблюдений, то заканчиваем цикл - нашли breakdown point, т.е.:

$$br = \left\{ \tilde{\varepsilon}_i, \text{ если } \widetilde{\delta}_1^{\tilde{\varepsilon}_i} < \widetilde{\delta}_2^{\tilde{\varepsilon}_i}; \right. \quad (14)$$

- иначе повышаем процент на 1 и повторяем цикл: $\tilde{\varepsilon}_{i+1} = \tilde{\varepsilon}_i + 0.01$

Такие тесты проведем для МНК и М-оценок.

4.1 Результаты программы

Найденные breakdown point для МНК и М-оценок	
Метод	breakpoint
МНК	10%
М-оценка с функцией Хьюбера	17%

Итак, видим, что М-оценки значительно устойчивее к выбросам чем МНК, т.е. при увеличении доли аномальных наблюдений, с увеличением объема выборки, оценки не сильно изменяются.



Рис. 2: График, на котором изображены $\widetilde{\delta}_1^{\tilde{\varepsilon}_i}$ красным и $\widetilde{\delta}_2^{\tilde{\varepsilon}_i}$ синим относительно $\tilde{\varepsilon}_i$ в случае МНК



Рис. 3: График, на котором изображены $\widetilde{\delta}_1^{\tilde{\varepsilon}_i}$ красным и $\widetilde{\delta}_2^{\tilde{\varepsilon}_i}$ синим относительно $\tilde{\varepsilon}_i$ в случае М-оценок

Замечания:

- Можно моделировать не 20 раз, а значительно больше, тем самым уменьшая зависимость результата работы метода от моделируемой выборки.
- Аналогично можно заключить и для размера выборок (отношение моделируемых количеств можно значительно увеличить), однако даже для таких объемов результаты являются достаточно показательными.

5 Построение оценки параметров регрессии с помощью группирования выборки

Будем работать с моделью регрессии (3), предполагая что имеем регрессию без выбросов (1). Каждый y_i принадлежит нормальному распределению:

$$y_i = f(x_i, \beta) + \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(f(x_i, \beta), \sigma^2). \quad (15)$$

Разделим множество значений функции регрессии, т.е. множество \mathcal{R} , на k полуинтервалов:

$$\mathcal{R} = (-\infty, a_1] \cup (a_1, a_2] \cup \dots \cup (a_{k-1}, +\infty). \quad (16)$$

Обозначим полученные интервалы: ν_0, \dots, ν_{k-1} .

Далее в работе будем считать, что вместо истинных значений зависимых переменных y_i наблюдается только номер класса, к которому это наблюдение попало. Тогда для каждого y_i будем наблюдать лишь номер полуинтервала μ_i , в который он попал.

$$\mu_i = j, \text{ если } y_i \text{ отнесли к полуинтервалу } \nu_j. \quad (17)$$

Функцию распределения нормального закона с параметрами μ, σ^2 можно представить как:

$$F(x) = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right), \quad (18)$$

где $\Phi(x)$ функция распределения стандартного нормального закона, а $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt. \quad (19)$$

Обозначим:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (20)$$

Тогда:

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \left[1 + \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) \right]. \quad (21)$$

Поэтому:

$$F(x) = \frac{1}{2} \left[1 + \text{erf}\left(\frac{x - \mu}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]. \quad (22)$$

Тогда при модельных предположениях (15) вероятность попадания y_i в полуинтервал ν_j равна:

$$P\{y_i \in \nu_j\} = \begin{cases} \frac{1}{2}(\text{erf}(\frac{a_{j+1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}) - \text{erf}(\frac{a_j-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma})), & j = \overline{1, k-2} \\ \frac{1}{2}(1 + \text{erf}(\frac{a_1-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma})), & j = 0 \\ \frac{1}{2}(1 + \text{erf}(\frac{a_{k-1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma})), & j = k-1 \end{cases}. \quad (23)$$

Понятно, что:

$$P(\mu_i = j) = P(y_i \in \nu_{\mu_i}). \quad (24)$$

5.1 Построение функции правдоподобия

Составим функцию правдоподобия:

$$l(\beta, \sigma^2, \nu_0, \dots, \nu_{k-1}) = \ln\left(\prod_{i=1}^n P(\mu_i = j)\right) = \quad (25)$$

$$= \sum_{i=1}^n \ln(P(\mu_i = j)). \quad (26)$$

Известно приближение для функции $\text{erf}(x)$:

$$(\text{erf}x)^2 \approx 1 - \exp\left(-x^2 \frac{\frac{4}{\pi} + ax^2}{1 + ax^2}\right), \quad (27)$$

$$a = \frac{8}{3\pi} \frac{3 - \pi}{\pi - 4}. \quad (28)$$

Оно считается достаточно точным для x близких к 0 и к ∞ [7].

Найдем производную для этого приближения:

$$\text{erf}'(x) = \exp\left(-x^2 \frac{\frac{4}{\pi} + ax^2}{1 + ax^2}\right) \frac{-2x \frac{\frac{4}{\pi} + ax^2}{1 + ax^2} + (2ax^3) \frac{\frac{4}{\pi} + ax^2}{1 + ax^2} - \frac{2ax^3}{1 + ax^2}}{2\sqrt{1 - \exp\left(-x^2 \frac{\frac{4}{\pi} + ax^2}{1 + ax^2}\right)}}. \quad (29)$$

Будем максимизировать функцию L . Для этого будем искать нули ее производной с помощью вычислительных методов (будем использовать метод дихотомии).

$$\frac{\delta l}{\delta \beta} = \frac{\delta \sum_{i=1}^n \ln(P(\mu_i = j))}{\delta \beta} = \frac{\delta \sum_{i=1}^n \ln P(y_i \in \nu_{\mu_i})}{\delta \beta} = \quad (30)$$

$$= \frac{\delta \sum_{i=1}^n \ln\left(\frac{1}{2}(\text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i+1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))\right)}{\delta \beta} = \quad (31)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left((1 - (\delta_{\mu_i 0} + \delta_{\mu_i k-1})) \frac{(\text{erf}'\left(\frac{a_{\mu_i+1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \text{erf}'\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))}{(\text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i+1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))} + \right. \quad (32)$$

$$\left. + (\delta_{\mu_i 0} + \delta_{\mu_i k-1}) \frac{\text{erf}'\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{(1 + \text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))} \right) (-1) \frac{\delta f(x_i, \beta)}{\delta \beta} =$$

$$= - \sum_{i=1}^n \begin{pmatrix} 1 \\ x_{i1} \\ \dots \\ x_{in} \end{pmatrix} \times \left((1 - (\delta_{\mu_i 0} + \delta_{\mu_i k-1})) \frac{(\text{erf}'\left(\frac{a_{\mu_i+1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \text{erf}'\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))}{(\text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i+1}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))} + \right. \quad (33)$$

$$\left. + (\delta_{\mu_i 0} + \delta_{\mu_i k-1}) \frac{\text{erf}'\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right)}{(1 + \text{erf}\left(\frac{a_{\mu_i}-f(x_i, \beta)}{\sqrt{2}\sigma}\right))} \right),$$

где δ_{ij} - символ Кронекера.

Итак, выражение (29) и будем использовать для метода дихотомии, приближая $\text{erf}'(x)$ с помощью выражения (25).

5.2 Метод секущих

Так как мы не можем привести систему $\frac{\delta l}{\delta \beta} = 0$ к виду, удобному для итерации, то нам придется искать ее нули с помощью метода Ньютона. Введем вектор ошибки $\xi^{(k)} = \beta^* - \beta^{(k)}$. Тогда для его определения имеем:

$$\frac{\delta l(\beta^{(k)} + \xi^{(k)})}{\delta \beta} = 0. \quad (34)$$

Разлагая левую часть по формуле Тейлора и ограничиваясь лишь линейными членами[8], будем иметь систему:

$$\frac{\delta}{\delta \beta} \frac{\delta l(\beta^{(k)})}{\delta \beta} \Delta \beta^{(k)} = - \frac{\delta l(\beta^{(k)})}{\delta \beta}. \quad (35)$$

Если матрица $\frac{\delta}{\delta \beta} \frac{\delta l(\beta^{(k)})}{\delta \beta}$ (а в нашем случае она диагональная), то из этой системы можно единственным образом найти $\Delta \beta^{(k)}$ и построить приближение:

$$\beta^{(k+1)} = \beta^{(k)} + \Delta \beta^{(k)}. \quad (36)$$

Так как для второй производной l получится довольно сложное выражение, то будем приближать ее с помощью выражения:

$$\frac{\delta}{\delta \beta_j} \frac{\delta l(\beta_1^{(k)}, \dots, \beta_n^{(k)})}{\delta \beta} \approx \frac{\frac{\delta l(\beta_1^{(k)}, \dots, \beta_j^{(k)}, \dots, \beta_n^{(k)})}{\delta \beta} - \frac{\delta l(\beta_1^{(k)}, \dots, \beta_j^{(k-1)}, \dots, \beta_n^{(k)})}{\delta \beta}}{\beta_j^{(k)} - \beta_j^{(k-1)}}. \quad (37)$$

Теперь имеем нули производной функции l , а также ее значения на границе отрезка $[a, b]$. Переберем эти значения и таким образом найдем значение вектора $\hat{\beta}$, где она достигает своего максимального значения.

5.3 Переклассификация выборки

На данном этапе для каждого x_i , значение функции регрессии $y_i^{\tilde{\tilde{}}}$ и класс $\mu_i: (x_i, y_i^{\tilde{\tilde{}}}, \mu_i)$. Теперь попытаемся переклассифицировать выборку. Для этого будем строить новую выборку такого же объема N . Будем идти по каждому элементу $(x_i, y_i^{\tilde{\tilde{}}}, \mu_i)$ выборки и для этого наблюдения построим новое:

$$(x_i, y_i^{\tilde{\tilde{}}}, \check{\mu}_i), \quad (38)$$

где $\check{\mu}_i$ максимально встречающийся класс близлежащих соседей:

$$\check{\mu}_i = \arg \max_j \sum_{|x_k - x_i| \leq \Delta, k \neq i} \delta_{\check{\mu}_k j}, \quad (39)$$

где Δ параметр, задающий уровень близости. Чем он выше, тем больше используется соседей для коррекции класса нашего наблюдения.

Итак, переклассифицировав выборку, применим к ней функцию правдоподобия из уравнений (21-22), только используя теперь новые классы $\check{\mu}_i$ вместо μ_i . Аналогично пунктам 5.1-5.2 максимизируем ее и найдем новую оценку параметров $\hat{\beta}$.

6 Численные эксперименты

С помощью численных экспериментов можно показать, как себя ведет производная функции правдоподобия при переклассификации выборки.

7 Заключение

Список литературы

- [1] Хьюбер Дж П., *Робастность в статистике: пер. с англ.* М.: Мир, 1984-304с
- [2] Харин Ю.С., Зуев Н.М., Жук Е.Е., *Теория вероятностей, математическая и прикладная статистика: учебник* Минск: БГУ, 2011.-463с
- [3] John Fox & Sanford Weisberg, *Robust Regression*, October 8, 2013
- [4] А.В. Омельченко, *Робастное оценивание параметров полиномиальной регрессии второго порядка*, Харьковский национальный университет радиоэлектроники, Украина, 2009
- [5] Özlem Gürünlü Alma, *Comparison of Robust Regression Methods in Linear Regression*, Int. J. Contemp. Math. Sciences, Vol. 6, 2011, no. 9, 409 - 421
- [6] Özlem Gürünlü Alma, *Comparison of Robust Regression Methods in Linear Regression*, Int. J. Contemp. Math. Sciences, Vol. 6, 2011, no. 9, 409 - 421
- [7] Sergei Winitzki, *A handy approximation for the error function and its inverse*
- [8] Мандрик П.А., Репников В.И., Фалейчик Б.В., *Численные методы*