第7章：岭回归

马学俊(主讲) 杜悦(助教)

苏州大学

数学科学学院

https://xuejunma.github.io/

Outline

岭回归估计的定义

- 普通最小二乘估计带来的问题
  - 当自变量间存在复共线性时，回归系数估计的方差就很大，估计值就很不稳定。在具体取值上与真实值有较大的偏差，有时甚至会出现与实际意义不服的正负号。
- 岭回归的定义
  - 岭回归(Ridge Regression,简记为RR)提出的想法是很自然的。当自变量间存在复共线性时，$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} \approx 0$，我们设想给$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$加上一个正常数矩阵$k\boldsymbol{I}, (k > 0)$，那么$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I}$接近奇异的程度就会比$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$接近奇异的程度小得多。
  - 考虑到变量的量纲问题，我们先对数据做标准化，为了记号方便，标准化后的设计阵仍然用$\boldsymbol{X}$表示，定义为：
$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k) = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} \tag{7.2}$$
为$\boldsymbol{\beta}$的岭回归估计，其中k称为岭参数。
  - 由于假设$\boldsymbol{X}$已经标准化，所以$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$就是自变量样本相关阵，(7.2)式计算的实际是标准化岭回归估计。
  - (7.2)式中因变量观测向量$\boldsymbol{y}$可以经过标准化也可以未经标准化。显然，$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$岭回归做为$\boldsymbol{\beta}$的估计应比最小二乘估计稳定，
  - 当$k = 0$时的岭回归估计就是普通的最小二乘估计。
  - 因为岭参数k不是唯一确定的，所以得到的岭回归估计$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$实际是回归参数$\boldsymbol{\beta}$的一个估计族。

岭回归估计的性质

性质1 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$是回归参数$\boldsymbol{\beta}$的有偏估计。

证明：

$$\begin{aligned} E(\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)) &= E((\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}) \\ &= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'E(\boldsymbol{y}) \\ &= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} \end{aligned}$$

显然只有当$k=0$时，$E(\hat{\boldsymbol{\beta}}(0))=\boldsymbol{\beta}$；当$k\neq 0$，$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$是回归参数$\boldsymbol{\beta}$的有偏估计。要特别强调的是$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$不再是$\boldsymbol{\beta}$的无偏估计，有偏性是岭回归估计的一个重要特性。

岭回归估计的性质

性质2 假设岭参数k是$\boldsymbol{y}$的无关的常数时，$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)=(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$是最小二乘估计$\hat{\boldsymbol{\beta}}$的一个线性变换，也是$\boldsymbol{y}$的线性函数。

证明：

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\beta}}(k) &= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}\\ &= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}\\ &= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}\end{aligned}$$

所以，岭估计$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$是最小二乘估计$\hat{\boldsymbol{\beta}}$的一个线性变换，根据定义式$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)=(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}+k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$知$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$也是$\boldsymbol{y}$的线性函数。

- 这里需要注意的是，在实际应用中，由于岭参数k总是要通过数据来确定，因而k也依赖于$\boldsymbol{y}$，
- 本质上来说，$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$并非$\hat{\boldsymbol{\beta}}$的线性变换，也不是$\boldsymbol{y}$的线性函数。

岭回归估计的性质

性质3 对任意的$k>0$，$||\hat{\boldsymbol{\beta}}||\neq 0$，总有

$$||\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)||<||\hat{\boldsymbol{\beta}}||$$

这里$||\cdot||$是向量的模，等于向量各分量的平方和。这个性质表明$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$可看成由$\hat{\boldsymbol{\beta}}$进行某种向原点的压缩。从$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$的表达式可以看到，当$k\to\infty$时，$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)\to\mathbf{0}$，即$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$化为零向量。

性质4 以MSE表示估计向量的均方误差，则存在$k>0$，使得

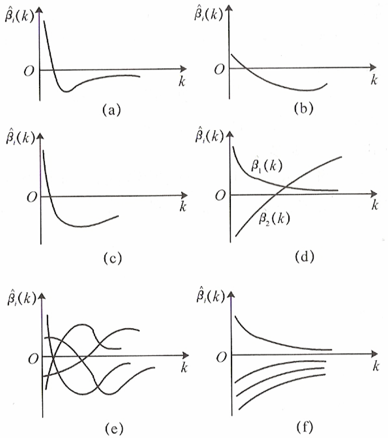
$$MSE[\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)]<MSE[\hat{\boldsymbol{\beta}}]$$

即

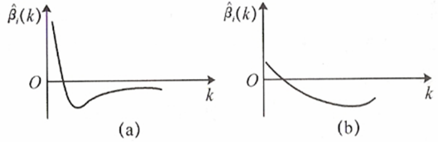
$$\sum_{j=1}^{p}E[\hat{\beta}_j(k)-\beta_j]^2<\sum_{j=1}^{p}D(\hat{\beta}_j)$$

岭迹分析

可以根据岭迹线的形状变化来确定适当的k值和进行自变量的选择。



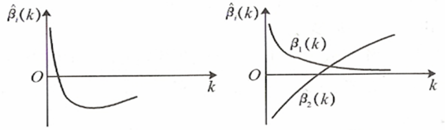
岭迹分析



(1) 在图(a)中，$\hat{\beta}_j(0) = \hat{\beta}_j > 0$，且比较大。从古典分析的观点看，应将$x_j$看作对$y$有重要影响的因素。但$\hat{\beta}_j(k)$的图形显示出相当的不稳定性，当$k$从零开始增加时，$\hat{\beta}_j(k)$显著地下降，而且迅速趋于0，因而失去预测能力。从岭回归的观点看，x_j对y不起重要作用，甚至可以剔除这个变量。

(2) 在图(b)中的情况与图(a)中相反，$\hat{\beta}_j = \hat{\beta}_j(0) > 0$，但很接近0.从古典回归分析的观点看，$x_j$对$y$的作用不大。但随着$k$略增加，$\hat{\beta}_j(k)$骤然变为负值，从岭回归的观点看，$x_j$对$y$有显著影响。

岭迹分析

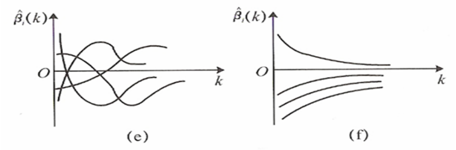


(c) (d)

(3) 在图(c)中，$\hat{\beta}_j = \hat{\beta}_j(0) > 0$，说明$x_j$比较显著，但当$k$增加时，$\hat{\beta}_j(k)$迅速下降，且稳定为负值。从古典回归分析的观点看，$x_j$对$y$有正影响的显著因素。从岭回归的观点看，$x_j$对$y$有负影响的因素。

(4) 在图(d)中，$\hat{\beta}_1(k)$和$\hat{\beta}_2(k) > 0$都很不稳定，但其和却大体上稳定。这种情况往往发生在自变量x_1和x_2的相关性很强的场合，即在x_1和x_2之间存在多重共线性。因此，从自变量选择的观点看，两者只要保留一个就够了。这可以用来解释某些回归系数估计的符号不合理的情形，从实际观点看，β_1和β_2不应有相反的符号。岭回归分析的结果对这一点提供了一种解释。

岭迹分析



(5) 从全局看，岭迹分析可以用来估计在某一具体实例中最小二乘估计是否适用。把所有回归系数的岭迹都描绘在一张图上，如果这些岭迹线的不稳定性很强，整个系统呈现比较“乱”的局面，往往就使人怀疑最小二乘估计是否很好的反映了真实情况，如图(e)所示。如果情况如图(f)那样，则我们对最小二乘估计可以有很大的信心。当情况介于(e)和(f)之间时，我们必须适当选择k值。

岭参数k的选择

- 岭迹法

岭迹法选择k值的一般原则是：

(1) 各回归系数的岭估计基本稳定；

(2) 用最小二乘估计时符号不合理的回归系数，其岭估计的符号变得合理；

(3) 回归系数没有不合乎经济意义的绝对值；

(4) 残差平方和增大不太多。

岭迹法

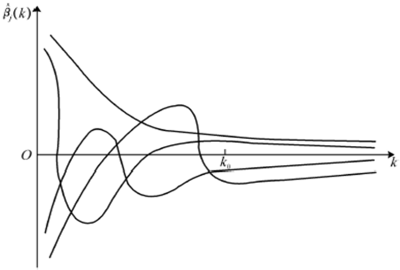


图 7－3

从图中可以看出，当k取k_0时，各回归系数的估计值基本上都能相对稳定。

岭参数k的选择

- 方差扩大因子法

方差扩大因子c_{jj}可以度量多重共线性的严重程度。计算岭估计$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$的协方差矩阵

$$
\begin{aligned}
D(\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)) &= cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}(k), \hat{\boldsymbol{\beta}}(k)) \\
&= cov((\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}, (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}) \\
&= (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}' cov(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1} \\
&= \sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1} \\
&= \sigma^2\boldsymbol{c}(k)
\end{aligned}
$$

矩阵$\boldsymbol{c}(k) = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}$，其对角元素$c_{jj}(k)$为岭估计的方差扩大因子。不难看出，$c_{jj}(k)$随着$k$的增大而减小。

选择k的经验做法：选择k使所有的方差扩大因子$c_{jj}(k) \leq 10$。

岭参数k的选择

- 由残差平方和来确定k值

岭估计在减小均方误差的同时增大了残差平方和，我们希望岭回归的残差平方和$SSE(k)$的增加幅度控制在一定的限度以内，可以给定一个大于1的c值，要求：

$$SSE(k) < cSSE$$

寻找使上式成立的最大的k值。

用岭回归选择变量

岭回归选择变量的原则：

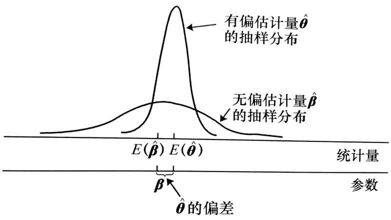
(1) 在岭回归中设计矩阵$\boldsymbol{X}$已经中心化和标准化了，这样可以直接比较标准化岭回归系数的大小。可以剔除掉标准化岭回归系数比较稳定且绝对值很小的自变量。

(2) 随着k的增加，回归系数不稳定，震动趋于零的自变量也可以剔除。

(3) 剔除标准化岭回归系数很不稳定的自变量.如果依照上述去掉变量的原则，有若干个回归系数不稳定，究竟去掉几个，去掉哪几个，这并无一般原则可循，这需根据去掉某个变量后重新进行岭回归分析的效果来确定。

本章小节与评注

岭回归与普通最小二乘的本质区别是：普通最小二乘估计是线性无偏估计中最好的，岭回归估计则是有偏估计中一个较好的估计。



- 如果一个估计量只有很小的偏差，但它的精度大大高于无偏估计量，人们更愿意选择这个估计量，因为它接近真实参数值的可能性更大。
- 由上图可以看到，估计量$\hat{\beta}$ 是无偏的，但不精确，而估计量$\hat{\boldsymbol{\theta}}$精确度高却有小的偏差。$\hat{\boldsymbol{\theta}}$落在真值$\beta$附近的概率远远大于无偏估计量$\hat{\beta}$

作业

- p.181　7.6
- 扩展阅读：CH10.11