

УДК 519.25

А.П. Сарычев

Институт технической механики НАН Украины и ГКА Украины
Украина, 49005, г. Днепропетровск, ул. Лешко-Попеля, 15

Моделирование в классе систем регрессионных уравнений в условиях структурной неопределённости

A.P. Sarychev

*The Institute of Technical Mechanics of NASU and SSAU
Ukraine, 49005, Dnipropetrovs'k, Leshko-Popel av., 15*

Modeling in the Class of Regression Equations Systems in Structural Uncertainty Conditions

О.П. Саричев

Институт технічної механіки НАН України і ДКА України
Україна, 49005, Україна, м. Дніпропетровськ, вул. Лешко-Попеля, 15

Моделювання в класі систем регресійних рівнянь в умовах структурної невизначеності

Для моделирования в классе систем регрессионных уравнений предложен системный критерий регулярности с разбиением выборок наблюдений на обучающие и проверочные подвыборки. Доказано существование оптимального множества регрессоров. Выявлено условие редукции оптимальной системы регрессионных уравнений, которое зависит от параметров системы регрессионных уравнений и объемов выборок.

Ключевые слова: неопределенность по составу регрессоров, системный критерий регулярности.

For modeling in a class of regression equations systems the system criterion of regularity with dividing of observation sample on training and testing subsamples is offered. It is proved, that the optimum set of regressors exists. The condition of a reduction of optimum system of regression equations is obtained. This condition depends on parameters of system regression equations and volumes of samples.

Key words: uncertainty on structure of regressors, system criterion of regulatory.

Для моделювання в класі систем регресійних рівнянь запропоновано системний критерій регулярності з розбиттям вибірок спостережень на навчальні й перевірні підвибірки. Доведено існування оптимальної множини регресорів. Виявлено умову редукції оптимальної системи регресійних рівнянь, що залежить від параметрів системи регресійних рівнянь і обсягів вибірок.

Ключові слова: невизначеність за складом регресорів, системний критерій регулярності.

Введение

Задача построения системы регрессионных уравнений в условиях структурной неопределенности по количеству и составу входных переменных в уравнениях является одним из объектов исследования в методе группового учета аргументов (МГУА) [1-8], который разработал академик НАН Украины А.Г. Ивахненко. Метод основан на разбиении выборки данных на обучающую и проверочную части: на обучающей

выборке оцениваются коэффициенты модели, а на проверочной оценивается качество модели. Обычно в МГУА применялись различные свертки внешних критериев отдельных регрессионных уравнений. В работе разработан системный критерий структурной идентификации, при построении которого коэффициенты системы регрессионных уравнений оцениваются совместно.

Известным критерием качества для систем регрессионных уравнений является многомерный аналог информационного критерия Акаике [9]. Его недостаток состоит в том, что он построен в предположении, что все выходные переменные объекта определяются общим множеством входных переменных. В прикладных задачах могут встречаться объекты более широкого класса, когда выходные переменные могут определяться разными подмножествами входных переменных. Поэтому актуальной задачей является построение и обоснование критерия структурной идентификации для систем регрессионных уравнений такого класса.

Априорные предположения об объекте

Пусть статический объект описывается множеством m входных переменных $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ и множеством h выходных переменных $Y = \{y(1), y(2), \dots, y(h)\}$. Пусть модель объекта представляет собой систему регрессионных уравнений

$$y(k) = \overset{\circ}{y}(k) + \xi(k) = \sum_{j=1}^{m(k)} \theta_j(k) x_j(k) + \xi(k), \quad k = 1, 2, \dots, h, \quad (1)$$

где k – номер выходной переменной; h – число выходных переменных; $y(k)$ – измеряемая с ошибкой k -я выходная переменная; $\overset{\circ}{y}(k)$ – незашумленная (ненаблюдаемая) составляющая k -й выходной переменной; $\xi(k)$ – ненаблюдаемая аддитивная случайная составляющая в k -й выходной переменной; $x_j(k)$ – j -я входная переменная из множества входных переменных $X(k) \neq \emptyset$ (\emptyset – пустое множество), участвующих в формировании $y(k)$; $m(k)$ – число входных переменных, принадлежащих множеству $X(k)$; $\overset{\circ}{\theta}(k) = (\overset{\circ}{\theta}_1(k), \overset{\circ}{\theta}_2(k), \dots, \overset{\circ}{\theta}_{m(k)}(k))^T$ – вектор неизвестных коэффициентов.

Пусть в результате наблюдения объекта для каждой выходной переменной $y(k)$, $k = 1, 2, \dots, h$, получены: 1) $\mathbf{X}(k)$ – $(n \times m(k))$ -матрица n наблюдений $m(k)$ входов множества $X(k)$, имеющая полный ранг, равный $m(k)$; 2) $\mathbf{y}(k)$ – $(n \times 1)$ -вектор наблюдаемых значений выходной переменной $y(k)$. В соответствии с моделью (1) для наблюдений выполняется

$$\mathbf{y}(k) = \overset{\circ}{\mathbf{y}}(k) + \xi(k) = \mathbf{X}(k) \overset{\circ}{\theta}(k) + \xi(k), \quad k = 1, 2, \dots, h, \quad (2)$$

где $\overset{\circ}{\mathbf{y}}(k)$ – $(n \times 1)$ -вектор ненаблюдаемых незашумленных значений k -й выходной переменной; $\xi(k)$ – $(n \times 1)$ -вектор ненаблюдаемых аддитивных случайных составляющих в наблюдениях k -й выходной переменной.

Пусть векторная случайная величина $\xi = (\xi(1), \xi(2), \dots, \xi(h))^T$ распределена по h -мерному нормальному закону: $\xi \sim N(\mathbf{0}_h, \Sigma)$, и относительно $(n \times 1)$ -векторов $\xi(k)$ выполнено

$$E\{\xi(k)\} = \mathbf{0}_n, \quad E\{\xi(k)\xi^T(k)\} = \sigma_{kk} \mathbf{I}_n, \quad k = 1, 2, \dots, h; \quad (3)$$

$$E\{\xi(k)\xi^T(q)\} = \sigma_{kq} \mathbf{I}_n, \quad k, q = 1, 2, \dots, h, \quad k \neq q; \quad (4)$$

$$E\{\xi_{i_1}(k)\xi_{i_2}(k)\} = 0, \quad i_1, i_2 = 1, 2, \dots, n, \quad i_1 \neq i_2, \quad (5)$$

где $E\{\cdot\}$ – знак математического ожидания по всем возможным реализациям случайных векторов $\xi(k)$ и $\xi(q)$; $\mathbf{0}_h$ – $(h \times 1)$ -вектор, состоящий из нулей; σ_{kk} – неизвестная конечная величина, дисперсия случайной величины $\xi(k)$; σ_{kq} – неизвестная конечная величина, ковариация случайных величин $\xi(k)$ и $\xi(q)$; \mathbf{I}_n – единичная $(n \times n)$ -матрица.

Вывод формул для оценивания коэффициентов

Запишем (2) в объединенном виде. Введем обозначения:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{y}(1)} \\ \underline{\mathbf{y}(2)} \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{y}(h)} \end{pmatrix}, \quad \overset{\circ}{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} \overset{\circ}{\underline{\mathbf{y}(1)}} \\ \overset{\circ}{\underline{\mathbf{y}(2)}} \\ \vdots \\ \overset{\circ}{\underline{\mathbf{y}(h)}} \end{pmatrix}, \quad \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \begin{pmatrix} \overset{\circ}{\underline{\boldsymbol{\theta}(1)}} \\ \overset{\circ}{\underline{\boldsymbol{\theta}(2)}} \\ \vdots \\ \overset{\circ}{\underline{\boldsymbol{\theta}(h)}} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} \underline{\xi(1)} \\ \underline{\xi(2)} \\ \vdots \\ \underline{\xi(h)} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$\underline{\mathbf{R}} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}(1) & \mathbf{O}_{(n \times m(2))} & \cdots & \mathbf{O}_{(n \times m(h))} \\ \mathbf{O}_{(n \times m(1))} & \mathbf{X}(2) & \cdots & \mathbf{O}_{(n \times m(h))} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{O}_{(n \times m(1))} & \mathbf{O}_{(n \times m(2))} & \cdots & \mathbf{X}(h) \end{bmatrix}, \quad (7)$$

где \mathbf{y} – объединенный $(N \times 1)$ -вектор наблюдаемых зашумленных значений; $\overset{\circ}{\mathbf{y}}$ – $(N \times 1)$ -вектор ненаблюдаемых значений; $\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}$ – $(M \times 1)$ -вектор неизвестных коэффициентов; $\boldsymbol{\xi}$ – $(N \times 1)$ – вектор ненаблюдаемых случайных аддитивных составляющих; $\underline{\mathbf{R}}$ – объединенная $(N \times M)$ -матрица регрессоров; $N = nh$; $M = m(1) + m(2) + \dots + m(h)$.

С учетом (6), (7) систему h регрессионных уравнений (2) можно записать

$$\mathbf{y} = \overset{\circ}{\mathbf{y}} + \boldsymbol{\xi} = \underline{\mathbf{R}} \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} + \boldsymbol{\xi}. \quad (8)$$

Необходимо найти оценку неизвестных коэффициентов $\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}$ в виде

$$\mathbf{d} = \mathbf{C} \mathbf{y}, \quad \mathbf{d} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{d}(1)} \\ \underline{\mathbf{d}(2)} \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{d}(h)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d}(k) = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{d}(k,1)} \\ \underline{\mathbf{d}(k,2)} \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{d}(k,h)} \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots, h, \quad (9)$$

где $(M \times N)$ -матрицу \mathbf{C} , которая зависит от $\underline{\mathbf{R}}$, требуется определить.

Будем искать такую матрицу \mathbf{C} , при которой логарифм определителя ковариационной матрицы оценки коэффициентов (9) принимает минимальное значение и оценки коэффициентов несмещены.

Математическое ожидание и ковариационную матрицу оценки (9) вычислим по всем возможным реализациям случайных величин $\xi(k)$, $k=1,2,\dots,h$. Для математического ожидания оценки (9) должно выполняться

$$E\{\mathbf{d}\} = E\{\mathbf{C}\mathbf{y}\} = E\{\mathbf{C}(\mathbf{y} + \xi)\} = E\{\mathbf{C}\mathbf{R}\underline{\underline{\theta}}\} + E\{\mathbf{C}\xi\} = \underline{\underline{\theta}}. \quad (10)$$

Справедливость (10) следует из условий

$$\mathbf{C}\mathbf{R} = \mathbf{I}_M, \quad E\{\mathbf{C}\xi\} = \mathbf{0}_M, \quad (11)$$

где первое – требование несмещённости оценок, а второе – требование независимости элементов матрицы \mathbf{R} от величин $\xi(k)$, $k=1,2,\dots,h$, с учетом (3).

Пусть Σ_ξ – ковариационная матрица введенного в (6) объединенного $(N \times 1)$ -вектора ненаблюдаемых аддитивных случайных составляющих ξ . Тогда для ковариационной матрицы вектора оценок (9) выполняется

$$\text{Cov}(\mathbf{d}) = E\left\{(\mathbf{d} - \underline{\underline{\theta}})(\mathbf{d} - \underline{\underline{\theta}})^T\right\} = E\left\{\mathbf{C}\xi\xi^T\mathbf{C}^T\right\} = \mathbf{C}\Sigma_\xi\mathbf{C}^T, \quad (12)$$

где $E\{\cdot\}$ – операция математического ожидания, введена при вычислении (10).

Запишем функцию Лагранжа

$$L(\mathbf{C}, \Lambda) = \ln(\det[\mathbf{C}\Sigma_\xi\mathbf{C}^T]) + \text{tr}[\Lambda(\mathbf{C}\mathbf{R} - \mathbf{I}_M)], \quad (13)$$

где Λ – диагональная – $(M \times M)$ -матрица неопределенных множителей.

Тогда необходимые условия оптимальности имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} \left(\ln(\det[\mathbf{C}\Sigma_\xi\mathbf{C}^T]) \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} \left(\text{tr}[\Lambda(\mathbf{C}\mathbf{R} - \mathbf{I}_M)] \right) = \mathbf{0}_{M \times N}, \\ \frac{\partial L}{\partial \Lambda} = \frac{\partial}{\partial \Lambda} \left(\text{tr}[\Lambda(\mathbf{C}\mathbf{R} - \mathbf{I}_M)] \right) = \mathbf{C}\mathbf{R} - \mathbf{I}_M = \mathbf{0}_{M \times M}. \end{cases} \quad (14)$$

Применяя правила матричного дифференцирования, из (14) получаем

$$\mathbf{C} = (\mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} \mathbf{R})^{-1} \mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1}. \quad (15)$$

Для математического ожидания и ковариационной матрицы оценки выполняется

$$E\{\mathbf{d}\} = E\{\mathbf{C}\mathbf{y}\} = E\left\{(\mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} \mathbf{R})^{-1} \mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} (\mathbf{R}\underline{\underline{\theta}} + \xi)\right\} = \underline{\underline{\theta}}, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \text{Cov}\{(\mathbf{d} - \underline{\underline{\theta}})(\mathbf{d} - \underline{\underline{\theta}})^T\} &= \\ &= E\left\{(\mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} \mathbf{R})^{-1} \mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} \xi \xi^T \Sigma_\xi^{-1} \mathbf{R} (\mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} \mathbf{R})^{-1}\right\} = (\mathbf{R}^T \Sigma_\xi^{-1} \mathbf{R})^{-1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Вычислим ковариационную матрицу Σ_ξ , т.е. дисперсии и ковариации случайных величин $\xi_i(k)$, $i=1,2,\dots,n$, $k=1,2,\dots,h$. Учитывая (3) – (5), получаем

$$\Sigma_\xi = E\{\xi\xi^T\} = \begin{bmatrix} E\{\xi(1)\xi^T(1)\} & E\{\xi(1)\xi^T(2)\} & \dots & E\{\xi(1)\xi^T(h)\} \\ E\{\xi(2)\xi^T(1)\} & E\{\xi(2)\xi^T(2)\} & \dots & E\{\xi(2)\xi^T(h)\} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E\{\xi(h)\xi^T(1)\} & E\{\xi(h)\xi^T(2)\} & \dots & E\{\xi(h)\xi^T(h)\} \end{bmatrix} = [\Sigma \otimes \mathbf{I}_n], \quad (18)$$

где \mathbf{I}_n – единичная $(n \times n)$ -матрица; $\Sigma \otimes \mathbf{I}_n$ – кронекеровское произведение матриц.

Из (6) – (18) следует, что для оценок коэффициентов выполняется:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{d}}(k) &= \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{y} = \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq} \mathbf{y}(q) = \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq} \left(\overset{\circ}{\mathbf{y}}(q) + \xi(q) \right) = \\ &= \sum_{\substack{q=1 \\ q \neq k}}^h \sum_{l=1}^h \left[(\underline{\mathbf{R}}^T \underline{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}})^{-1} \right]_{kl} \left[\underline{\mathbf{R}}^T \underline{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}} \right]_{lq} \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(q) + \\ &+ \sum_{l=1}^h \left[(\underline{\mathbf{R}}^T \underline{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}})^{-1} \right]_{kl} \left[\underline{\mathbf{R}}^T \underline{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}} \right]_{lk} \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(k) + \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq} \xi(q) = \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(k) + \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq} \xi(q), \end{aligned} \quad (19)$$

где использованы свойства, которые следуют из равенства $\mathbf{H} \times \mathbf{H}^{-1} = \mathbf{I}$:

$$\sum_{l=1}^h [\mathbf{H}]_{kl} \times [\mathbf{H}^{-1}]_{lq} = \begin{cases} 1, & \text{если } k = q; \\ 0, & \text{если } k \neq q. \end{cases} \quad (20)$$

Системный критерий регулярности МГУА

Ранее предполагалось, что подмножества регрессоров, участвующих в формировании каждой из выходных переменных, заданы. Далее будем предполагать, что они неизвестны, и их требуется определить, т.е. рассмотрим задачу структурной идентификации. Для описания структуры системы регрессионных уравнений введем структурные матрицы, смысл которых поясним на конкретном примере. Пусть на значение выходной переменной с номером k влияют первый, второй и четвертый регрессоры в исходном заданном множестве регрессоров X , число которых $m = 5$. Тогда матрицу регрессоров $\mathbf{X}(k)$ в системе регрессионных уравнений (1) – (20) можно записать в виде произведения

$$\mathbf{X}(k) = \mathbf{X} \mathbf{S}(k) = \begin{bmatrix} x_1(1) & x_1(2) & x_1(3) & x_1(4) & x_1(5) \\ x_2(1) & x_2(2) & x_2(3) & x_2(4) & x_2(5) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_i(1) & x_i(2) & x_i(3) & x_i(4) & x_i(5) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n(1) & x_n(2) & x_n(3) & x_n(4) & x_n(5) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1(1) & x_1(2) & x_1(4) \\ x_2(1) & x_2(2) & x_2(4) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_i(1) & x_i(2) & x_i(4) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n(1) & x_n(2) & x_n(4) \end{bmatrix}, \quad (21)$$

где (5×3) -матрица $\mathbf{S}(k)$ и представляет собой структурную матрицу, отражающую влияние первого, второго и четвертого регрессоров на k -ю выходную переменную.

Пусть информация о том, какие именно регрессоры определяют значения каждой выходной переменной в законе функционирования объекта (1), (2), представлена набором структурных матриц

$$\overset{\circ}{\mathbf{S}} = \{ \overset{\circ}{\mathbf{S}}(1), \overset{\circ}{\mathbf{S}}(2), \dots, \overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) \}, \quad (22)$$

которые могут быть различными для разных выходных переменных. С учетом введенных структурных матриц закон функционирования (2) можно записать

$$\mathbf{y}(k) = \overset{\circ}{\mathbf{y}}(k) + \xi(k) = \mathbf{X} \overset{\circ}{\mathbf{S}}(k) \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(k) + \xi(k) = \mathbf{R}(\overset{\circ}{\mathbf{S}}, k) \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(k) + \xi(k), \quad k = 1, 2, \dots, h, \quad (23)$$

где \mathbf{X} – $(n \times m)$ -матрица регрессоров множества X ; $\mathbf{y}(k)$ – $(n \times 1)$ -вектор наблюдаемых значений выходной переменной $y(k)$.

Далее предполагается, что множество X и матрица \mathbf{X} заданы, а структурные матрицы $\overset{\circ}{\mathbf{S}}(k)$, $k = 1, 2, \dots, h$, неизвестны и их требуется определить. Пусть

$$S = \{\mathbf{S}(1), \mathbf{S}(2), \dots, \mathbf{S}(h)\} - \quad (24)$$

набор структурных матриц, которые соответствуют текущей структуре модели – одной из структур, перебираемых по алгоритму полного перебора всех структур; $s(k) \leq p$ – число регрессоров в k -ом регрессионном уравнении, $k = 1, 2, \dots, h$; p – заданное максимально возможное число регрессоров в регрессионных уравнениях.

Пусть имеются две выборки наблюдений m входных переменных и h выходных переменных: первую выборку (A) будем называть обучающей, а вторую (B) – проверочной. На обучающей выборке будем оценивать параметры системы регрессионных уравнений с текущей анализируемой структурой, а на проверочной будем оценивать качество этой построенной модели.

Введем для этих выборок обозначения

$$\mathbf{y}(A) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}(A,1) \\ \mathbf{y}(A,2) \\ \vdots \\ \mathbf{y}(A,h) \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\mathbf{R}}}(A,S) = \begin{bmatrix} \mathbf{R}(A,S;1) & \mathbf{O}_{(n \times m(2))} & \cdots & \mathbf{O}_{(n \times m(h))} \\ \mathbf{O}_{(n \times m(1))} & \mathbf{R}(A,S;2) & \cdots & \mathbf{O}_{(n \times m(h))} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{O}_{(n \times m(1))} & \mathbf{O}_{(n \times m(2))} & \cdots & \mathbf{R}(A,S;h) \end{bmatrix}, \quad (25)$$

где $\mathbf{R}(A,S;k) = \mathbf{X}(A)\mathbf{S}(k)$, $k = 1, 2, \dots, h$;

$$\mathbf{y}(B) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}(B,1) \\ \mathbf{y}(B,2) \\ \vdots \\ \mathbf{y}(B,h) \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B,S) = \begin{bmatrix} \mathbf{R}(B,S;1) & \mathbf{O}_{(n \times m(2))} & \cdots & \mathbf{O}_{(n \times m(h))} \\ \mathbf{O}_{(n \times m(1))} & \mathbf{R}(B,S;2) & \cdots & \mathbf{O}_{(n \times m(h))} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{O}_{(n \times m(1))} & \mathbf{O}_{(n \times m(2))} & \cdots & \mathbf{R}(B,S;h) \end{bmatrix}, \quad (26)$$

где $\mathbf{R}(B,S;k) = \mathbf{X}(B)\mathbf{S}(k)$, $k = 1, 2, \dots, h$.

Итак, на выборке A оцениваем коэффициенты

$$\hat{\mathbf{d}}(A,S;k) = \mathbf{C}_{k\bullet}(A,S)\mathbf{y}(A) = \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq}(A,S)\mathbf{y}(A,q) = \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(k) + \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq}(A,S)\xi(A,q), \quad (27)$$

где использовано свойство (19).

С учетом (19) и (23) для $(n(B) \times 1)$ -вектора остатков на выборке B имеем

$$\mathbf{u}(B/A,S;k) = \mathbf{y}(B,k) - \hat{\mathbf{y}}(B/A,S;k) = \mathbf{y}(B,k) - \mathbf{R}(B,S;k)\hat{\mathbf{d}}(A,S;k), \quad (28)$$

где $\mathbf{y}(B,k) - (n(B) \times 1)$ -вектор наблюдений выходной переменной с номером k на проверочной выборке B ; $n(B)$ – объем проверочной выборки; $\hat{\mathbf{y}}(B/A,S;k) - (n(B) \times 1)$ -вектор выходов k -й регрессионной модели на выборке B , рассчитанный по модели, оценки коэффициентов которой получены на обучающей выборке A в (27).

В соответствии с (19) и (23) для вектора остатков (28) выполняется

$$\mathbf{u}(B/A,S;k) = \boldsymbol{\delta}(B/A,S;k) + \xi(B,k) - \mathbf{R}(B,S;k) \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq}(A,S)\xi(A,q). \quad (29)$$

где $\delta(B/A, S; k) - (n \times 1)$ -вектор отклонений (так называемое смещение, обусловленное выбором текущей структуры S вместо истинной $\overset{\circ}{S}$):

$$\delta(B/A, S; k) = \overset{\circ}{\mathbf{y}}(B, k) - \mathbf{R}(B, S; k) \sum_{q=1}^h \mathbf{C}_{kq}(A, S) \overset{\circ}{\mathbf{y}}(A, q). \quad (30)$$

Объединим $(n(B) \times 1)$ -векторы остатков (29) в $(n(B) \times h)$ -матрицу:

$$\mathbf{U}(B/A, S) = [\mathbf{u}(B/A, S; 1), \mathbf{u}(B/A, S; 2), \dots, \mathbf{u}(B/A, S; h)]. \quad (31)$$

Введем матрицу ковариаций остатков (29)

$$\mathbf{W}(B/A, S) = \mathbf{U}^T(B/A, S) \mathbf{U}(B/A, S). \quad (32)$$

Определение 1. Случайная величина

$$ARS(S) = \frac{1}{h} \ln(\det[\mathbf{W}(B/A, S)]) \quad (33)$$

называется системным критерием регулярности МГУА для системы регрессионных уравнений [10], [11].

Определение 2. Оптимальным множеством регрессоров называется множество регрессоров, соответствующее набору структурных матриц S_0 :

$$S_0 = \arg \min_{S \subseteq S^*(m, p)} E\{ARS(S)\}, \quad (34)$$

где $S^*(m, p)$ – множество всевозможных наборов структурных матриц при заданном множестве m регрессоров X и заданном максимально возможном числе регрессоров в регрессионных моделях p .

Определение 3. Оптимальной по количеству и составу регрессоров называется система регрессионных уравнений, построенная на множестве регрессоров, которое соответствует набору структурных матриц S_0 .

Вычислим математическое ожидание матрицы ковариаций остатков (32). Для (k, q) -элемента этой матрицы выполняется

$$\begin{aligned} \Omega_{kq}(B/A, S) &= [E\{\mathbf{U}^T(B/A, S) \mathbf{U}(B/A, S)\}]_{kq} = \\ &= \delta^T(B/A, S; k) \delta(B/A, S; q) + E\left\{\left[\xi^T(B, k) \xi(B, q)\right]\right\} - \\ &- E\left\{\left[\xi^T(B, k) \left(\mathbf{R}(B, S; q) \sum_{s=1}^h \mathbf{C}_{qs}(A, S) \xi(A, s)\right)\right]\right\} - \\ &- E\left\{\left[\left(\mathbf{R}(B, S; k) \sum_{r=1}^h \mathbf{C}_{kr}(A, S) \xi(A, r)\right)^T \xi(B, q)\right]\right\} + \\ &+ E\left\{\left[\left(\mathbf{R}(B, S; k) \sum_{r=1}^h \mathbf{C}_{kr}(A, S) \xi(A, r)\right)^T \left(\mathbf{R}(B, S; q) \sum_{s=1}^h \mathbf{C}_{qs}(A, S) \xi(A, s)\right)\right]\right\}. \quad (35) \end{aligned}$$

Для второго слагаемого в (35) выполняется

$$E\left\{\left[\xi^T(B, k) \xi(B, q)\right]\right\} = n(B) \sigma_{kq}, \quad (36)$$

а третье и четвертое слагаемые равны нулю, поскольку $\xi(A)$ и $\xi(B)$ независимы.

Учитывая

$$\mathbf{C}_{kr}(A, S) = \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(A, S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \right]_{kr}, \quad (37)$$

$$\mathbf{C}_{qs}(A, S) = \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(A, S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \right]_{qs}, \quad (38)$$

используя равенство $[\mathbf{C}_{kr}(A, S)]^T = [\mathbf{C}^T(A, S)]_{rk}$ и симметричность матрицы Σ , для пятого слагаемого в (35) получаем

$$\begin{aligned} E \left\{ \left[\sum_{r=1}^h \sum_{s=1}^h \xi^T(A, r) [\mathbf{C}_{kr}(A, S)]^T \mathbf{R}^T(B, S; k) \mathbf{R}(B, S; q) \mathbf{C}_{qs}(A, S) \xi(A, s) \right] \right\} = \\ = \sum_{r=1}^h \sum_{s=1}^h \text{tr} \left[[\mathbf{C}_{kr}(A, S)]^T \mathbf{R}^T(B, S; k) \sigma_{rs} \mathbf{R}(B, S; q) \mathbf{C}_{qs}(A, S) \right] = \\ = \text{tr} \left[\mathbf{R}(B, S; q) \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(A, S) \right)^{-1} \right]_{qk} \mathbf{R}^T(B, S; k) \right] = \\ = \text{tr} \left[\mathbf{R}(B, S; k) \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(A, S) \right)^{-1} \right]_{kq} \mathbf{R}^T(B, S; q) \right]. \quad (39) \end{aligned}$$

Подставляя в (35) выражения (36) и (39), получаем

$$\begin{aligned} \Omega_{kq}(B/A, S) = \delta^T(B/A, S; k) \delta(B/A, S; q) + \\ + n(B) \sigma_{kq} + \text{tr} \left[\underline{\mathbf{R}}(B, S) \left(\underline{\mathbf{R}}^T(A, S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(A, S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(B, S) \right]_{kq}. \quad (40) \end{aligned}$$

Будем предполагать, что мы находимся в условиях активного эксперимента и можем организовать схему повторных наблюдений [12], [13]: для заданных значений входных переменных проводится пара наблюдений выходных переменных, причем «первые» наблюдения каждой пары образуют выборку A , а «вторые» наблюдения – выборку B , т.е. в этой схеме выполняется:

$$n(A) = n(B) = n, \quad \underline{\mathbf{R}}(A, S) = \underline{\mathbf{R}}(B, S) = \underline{\mathbf{R}}(S), \quad (41)$$

$$\mathbf{R}(A, S; k) = \mathbf{R}(B, S; k) = \mathbf{R}(S; k) = \mathbf{X}\mathbf{S}(k), \quad k = 1, 2, \dots, h. \quad (42)$$

Для (40) с учетом (41), (42) выполняется

$$\Omega_{kq}(B/A, S) = \delta^T(B/A, S; k) \delta(B/A, S; q) + n \sigma_{kq} + \text{tr} \left[\underline{\mathbf{R}}(S) \left(\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \right]_{kq}. \quad (43)$$

Вычислим третье слагаемое в (43)

$$\begin{aligned} \text{tr} \left[\underline{\mathbf{R}}(S) \left(\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \right]_{kq} = \\ = \text{tr} \left[\mathbf{R}(S, k) \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\Sigma}_\xi \right]_{kq} \right] = \\ = \text{tr} \left[\mathbf{R}(S, k) \sum_{l=1}^h \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \right]_{kl} [\underline{\Sigma}_\xi]_{lq} \right] = \\ = \text{tr} \left[\sum_{l=1}^h \left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \right]_{kl} \mathbf{R}(S, k) \sigma_{lq} \right] = \\ = \text{tr} \left[\left[\left(\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right)^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\Sigma}_\xi^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) \right]_{kk} \sigma_{kq} \right] = \\ = \sigma_{kq} \text{tr} \left[\mathbf{I}_{m(k)} \right] = m(k) \sigma_{kq}. \quad (44) \end{aligned}$$

Для (k, q) -элемента ковариационной матрицы (43) с учетом (44) выполняется

$$\Omega_{kq}(B/A, S) = \delta^T(B/A, S; k) \delta(B/A, S; q) + (n + m(k)) \sigma_{kq}. \quad (45)$$

В целом для ковариационной матрицы $\Omega(B/A, S)$ получаем

$$\Omega(B/A, S) = \Delta(B/A, S) + \begin{bmatrix} \sigma_{11}(n+m(1)) & \sigma_{12}(n+m(1)) & \cdots & \sigma_{1h}(n+m(1)) \\ \sigma_{21}(n+m(2)) & \sigma_{22}(n+m(2)) & \cdots & \sigma_{2h}(n+m(2)) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{h1}(n+m(h)) & \sigma_{h2}(n+m(h)) & \cdots & \sigma_{hh}(n+m(h)) \end{bmatrix} \quad (46)$$

или

$$\Omega(B/A, S) = \Delta(B/A, S) + n \Sigma + \text{diag}\{m(1), m(2), \dots, m(h)\} \times \Sigma, \quad (47)$$

где $[\Delta]_{kq}(B/A, S) = \delta^T(B/A, S; k) \delta(B/A, S; q)$, $k, q = 1, 2, \dots, h$.

Для случая совпадения текущей структуры S с истинной $\overset{\circ}{S}$ получаем

$$\Omega_{kq}(B/A, \overset{\circ}{S}) = (n + \overset{\circ}{m}(k)) \sigma_{kq}, \quad (48)$$

$$\Omega(B/A, \overset{\circ}{S}) = n \Sigma + \text{diag}\{\overset{\circ}{m}(1), \overset{\circ}{m}(2), \dots, \overset{\circ}{m}(h)\} \times \Sigma. \quad (49)$$

Исследование системного критерия регулярности МГУА

Установим свойства системного критерия регулярности МГУА, и с этой целью исследуем, как изменяется математическое ожидание критерия в зависимости от состава множества регрессоров. Сначала рассмотрим случай, когда набор структурных матриц S совпадает с истинным набором ($S = \overset{\circ}{S}$). Для математического ожидания критерия регулярности для модели с истинной структурой в схеме повторных наблюдений, используя (49), получаем

$$\begin{aligned} E\left\{ARS(\overset{\circ}{S})\right\} &= \frac{1}{h} E\left\{\ln\left(\det\left[\mathbf{W}(B/A, \overset{\circ}{S})\right]\right)\right\} = \frac{1}{h} \ln\left(\det\left[\Omega(B/A, \overset{\circ}{S})\right] \cdot \prod_{k=1}^h (n-k)\right) = \\ &= \frac{1}{h} \ln\left(\det\left[\text{diag}\{n + \overset{\circ}{m}(1), n + \overset{\circ}{m}(2), \dots, n + \overset{\circ}{m}(h)\}\right] \times \det[\Sigma] \cdot \prod_{k=1}^h (n-k)\right) = \\ &= \frac{1}{h} \ln\left(\det[\Sigma] \cdot \prod_{k=1}^h (n + \overset{\circ}{m}(k)) \cdot \prod_{k=1}^h (n-k)\right). \end{aligned} \quad (50)$$

Для математического ожидания критерия регулярности модели с текущей структурой S в схеме повторных наблюдений, используя (47), получаем

$$\begin{aligned} E\{ARS(S)\} &= \frac{1}{h} E\left\{\ln\left(\det\left[\mathbf{W}(B/A, S)\right]\right)\right\} = \\ &= \frac{1}{h} \ln\left(\det\left[\Delta(B/A, S) + \text{diag}\{n + m(1), n + m(2), \dots, n + m(h)\} \times \Sigma\right] \cdot \prod_{k=1}^h (n-k)\right). \end{aligned} \quad (51)$$

При вычислении в (50) и (51) математического ожидания определителей матриц $\mathbf{W}(B/A, \overset{\circ}{S})$ и $\mathbf{W}(B/A, S)$, имеющих распределение Уишарта, применены результаты [14, с. 236, 237].

Случай недостающего регрессора. Рассмотрим случай, когда в модель для переменной с номером h ошибочно не включен один регрессор, и для определенности будем считать, что это регрессор с номером m из множества X . Тогда для текущих и истинных структурных матриц выполняется соотношение

$$\overset{\circ}{\mathbf{S}}(k) = \mathbf{S}(k), \quad k = 1, 2, \dots, h-1; \quad \overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) = [\mathbf{S}(h) \mid \mathbf{s}], \quad (52)$$

где $\overset{\circ}{\mathbf{S}}(h)$ – структурная $(m \times m(h))$ -матрица истинной модели (регрессионного уравнения) для переменной с номером h ; $\mathbf{S}(h)$ – структурная $(m \times (m(h)-1))$ – матрица текущей модели; \mathbf{s} – $(m \times 1)$ – вектор, для которого выполняется

$$\mathbf{s} = (0, 0, \dots, 0, 1)^T. \quad (53)$$

Сначала вычислим математическое ожидание критерия регулярности в случае недостающего регрессора. Вычислим $(h \times h)$ – матрицу $\Delta(B/A, S)$ в (51)

$$\Delta(B/A, S) = \begin{bmatrix} \mathbf{O}_{(h-1) \times (h-1)} & \mathbf{0}_{h-1} \\ \mathbf{0}_{h-1}^T & \Delta_{hh} \end{bmatrix}, \quad (54)$$

где $\Delta_{hh} = \delta^T(B/A, S; h) \delta(B/A, S; h)$; $\delta(B/A, S; h)$ – введенное в (30) так называемое смещение, обусловленное выбором текущей структуры S вместо истинной $\overset{\circ}{S}$.

В схеме повторных наблюдений для объединенного вектора смещения имеем

$$\begin{aligned} \delta(B/A, S) &= \overset{\circ}{\mathbf{y}}(B) - \underline{\mathbf{R}}(S) \mathbf{C}(S) \overset{\circ}{\mathbf{y}}(A) = \underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}) \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \underline{\mathbf{R}}(S) \mathbf{C}(S) \underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}) \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \\ &= \underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}) \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \underline{\mathbf{R}}(S) (\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S))^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}) \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}. \end{aligned} \quad (55)$$

Для матриц регрессоров, соответствующих наборам структурных матриц $\overset{\circ}{S}$ и S в (52), выполняются соотношения

$$\underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}, k) = \underline{\mathbf{R}}(S, k), \quad k = 1, 2, \dots, h-1, \quad (56)$$

$$\underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}, h) = \mathbf{X} \overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) = \mathbf{X} [\mathbf{S}(h) \mid \mathbf{s}] = [\mathbf{X} \mathbf{S}(h) \mid \mathbf{X} \mathbf{s}] = [\underline{\mathbf{R}}(S, h) \mid \mathbf{m}], \quad (57)$$

где \mathbf{m} – $(n \times 1)$ – вектор наблюдений пропущенного регрессора.

Для матриц $\underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S})$ и $\underline{\mathbf{R}}(S)$, с учётом (56), (57), получаем

$$\underline{\mathbf{R}}(\overset{\circ}{S}) = [\underline{\mathbf{R}}(S) \mid \delta_R], \quad \delta_R^T = (\mathbf{0}_n^T, \mathbf{0}_n^T, \dots, \mathbf{m}^T), \quad (58)$$

где δ_R – $(N \times 1)$ – вектор.

Учитывая (58), (55) можно записать

$$\begin{aligned} \delta(B/A, S) &= [\underline{\mathbf{R}}(S) \mid \delta_R] \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \underline{\mathbf{R}}(S) (\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S))^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi}^{-1} [\underline{\mathbf{R}}(S) \mid \delta_R] \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}_{N \times (M-1)} & \mathbf{M}(S) \delta_R \end{bmatrix} \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}, \end{aligned} \quad (59)$$

где $\mathbf{M}(S) = [\mathbf{I}_N - \underline{\mathbf{R}}(S) (\underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S))^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi}^{-1}]$ – идемпотентная матрица.

Учитывая (52), (59) и соотношения

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \begin{pmatrix} \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(1) \\ \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(2) \\ \vdots \\ \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(h) \end{pmatrix}, \quad \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}(h) = \begin{pmatrix} \overset{\circ}{\theta}_1(h) \\ \overset{\circ}{\theta}_2(h) \\ \vdots \\ \overset{\circ}{\theta}_{m(h)}(h) \end{pmatrix}, \quad (60)$$

получаем

$$\begin{aligned} \Delta_{hh} &= \boldsymbol{\delta}(B/A, S)^T \boldsymbol{\delta}(B/A, S) = \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}}^T \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \overset{\circ}{\boldsymbol{\delta}}_R^T \\ \overset{\circ}{\boldsymbol{\delta}}_R^T & \mathbf{M}^T(S) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \overset{\circ}{\boldsymbol{\delta}}_R \\ \mathbf{N} \times (M-1) & \mathbf{M}(S) \end{bmatrix} \overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \\ &= (\overset{\circ}{\theta}_{m(h)}(h))^2 \cdot \mathbf{m}^T \mathbf{H}_{hh}(S) \mathbf{m}, \end{aligned} \quad (61)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(S) &= \mathbf{M}^T(S) \mathbf{M}(S) = [\mathbf{I}_N - \boldsymbol{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S) (\underline{\mathbf{R}}^T(S) \boldsymbol{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S))^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S)] \times \\ &\times [\mathbf{I}_N - \underline{\mathbf{R}}(S) (\underline{\mathbf{R}}^T(S) \boldsymbol{\Sigma}_{\xi}^{-1} \underline{\mathbf{R}}(S))^{-1} \underline{\mathbf{R}}^T(S) \boldsymbol{\Sigma}_{\xi}^{-1}]. \end{aligned} \quad (62)$$

Итак, в (59) – (62) установлено

$$\Delta_{hh} = \boldsymbol{\delta}^T(B/A, S; h) \boldsymbol{\delta}(B/A, S; h) = (\overset{\circ}{\theta}_{m(h)}(h))^2 \cdot \mathbf{m}^T \mathbf{H}_{hh}(S) \mathbf{m}. \quad (63)$$

Введем $(h \times 1)$ – вектор $\mathbf{b} = (0, 0, \dots, 0, (\Delta_{hh})^{1/2})^T$ такой, что выполняется $\mathbf{b} \mathbf{b}^T = \Delta(B/A, S)$, и вычислим определитель под знаком логарифма в (51), применив правило $\det[\mathbf{A} + \mathbf{b} \mathbf{b}^T] = \det[\mathbf{A}] (1 + \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})$:

$$\begin{aligned} c &= \det[\Delta(B/A, S) + \text{diag}\{n+m(1), n+m(2), \dots, n+m(h)\} \times \boldsymbol{\Sigma}] = \\ &= \det[\text{diag}\{n+m(1), n+m(2), \dots, n+m(h)\} \times \boldsymbol{\Sigma}] \times \\ &\times (1 + \mathbf{b}^T [\text{diag}\{n+m(1), n+m(2), \dots, n+m(h)\} \times \boldsymbol{\Sigma}]^{-1} \mathbf{b}) = \\ &= \det[\boldsymbol{\Sigma}] \cdot \prod_{k=1}^h (n+m(k)) \times (1 + (n+m(h))^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2} \boldsymbol{\Sigma}_{hh}^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2}), \end{aligned} \quad (64)$$

где $\boldsymbol{\Sigma}_{hh}^{-1} = (h, h)$ – элемент матрицы $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$.

Таким образом, для ковариационной матрицы остатков в случае недостающего регрессора выполняется

$$\det[\boldsymbol{\Omega}_1(B/A, S)] = \det[\boldsymbol{\Sigma}] \cdot \prod_{k=1}^h (n+m(k)) \times (1 + (n+m(h))^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2} \boldsymbol{\Sigma}_{hh}^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2}), \quad (65)$$

где Δ_{hh} определено в (63).

Теперь рассмотрим разность

$$\begin{aligned} \Delta_1(S, \overset{\circ}{S}) &= E\{ARS(S)\} - E\{ARS(\overset{\circ}{S})\} = \\ &= \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\det[\boldsymbol{\Sigma}] \cdot \prod_{k=1}^h (n+m(k)) \times (1 + (n+m(h))^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2} \boldsymbol{\Sigma}_{hh}^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2})}{\det[\boldsymbol{\Sigma}] \cdot \prod_{k=1}^h (n+m(k))} \right). \end{aligned} \quad (66)$$

Из (52) следует $m(k) = \overset{\circ}{m}(k)$, $k = 1, 2, \dots, h-1$, и $m(h) = \overset{\circ}{m}(h) - 1$, поэтому

$$\Delta_1(S, \overset{\circ}{S}) = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\left((n + \overset{\circ}{m}(h) - 1) + (\Delta_{hh})^{1/2} \Sigma_{hh}^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2} \right)}{(n + \overset{\circ}{m}(h))} \right). \quad (67)$$

Если $\Delta_1(S, \overset{\circ}{S}) > 0$, то структура $\overset{\circ}{S}$ лучше структуры S ; если $\Delta_1(S, \overset{\circ}{S}) < 0$, то структура S лучше структуры $\overset{\circ}{S}$; если $\Delta_1(S, \overset{\circ}{S}) = 0$, то структура S лучше структуры $\overset{\circ}{S}$ по дополнительному принципу простоты.

Выполнение $\Delta_1(S, \overset{\circ}{S}) \leq 0$ является условием так называемой редукции системы регрессионных уравнений, для которого из (67) получаем

$$n + \overset{\circ}{m}(h) - 1 + (\Delta_{hh})^{1/2} \Sigma_{hh}^{-1} (\Delta_{hh})^{1/2} \leq n + \overset{\circ}{m}(h) \quad \text{или} \quad \Delta_{hh} \leq (\Sigma_{hh}^{-1})^{-1}. \quad (68)$$

Подставляя (63) в (68), получаем условие редукции

$$(\overset{\circ}{\theta}_{m(h)}(h))^2 \cdot \mathbf{m}^T \mathbf{H}_{hh} \mathbf{m} \leq (\Sigma_{hh}^{-1})^{-1}, \quad (69)$$

где $\mathbf{H}_{hh} - (n \times n)$ – матрица является (h, h) – блоком матрицы \mathbf{H} , введённой в (62); $\Sigma_{hh}^{-1} - (h, h)$ – элемент матрицы Σ^{-1} .

Редукция модели, оптимальной по составу регрессоров, означает, что при выполнении соотношения между параметрами модели (69) следует исключить регрессор \mathbf{m} из модели для h -й переменной. Редуцированная модель будет иметь меньшую ошибку прогнозирования выходных переменных на новых выборках наблюдений по сравнению с моделью с истинной структурой.

Из (69) следует, что возможность редукции модели может быть обусловлена пятью причинами: а) малостью нормы коэффициента $\overset{\circ}{\theta}_{m(h)}(h)$; б) малостью нормы вектора наблюдений регрессора \mathbf{m} ; в) малым объёмом выборок наблюдений n ; г) высокой степенью линейной зависимости регрессора \mathbf{m} с другими регрессорами в матрице $\mathbf{R}(S, h) = \mathbf{X}\mathbf{S}(h)$; д) большим значением величины $(\Sigma_{hh}^{-1})^{-1}$.

Случай избыточного регрессора. Рассмотрим случай, когда в текущую структуру включен излишний регрессор. Предположим для простоты, что этот регрессор является последним регрессором в исходном множестве входных переменных: он включен в модель для переменной с номером h , хотя не участвует в формировании ее значения. Тогда между текущими и истинными структурными матрицами выполняется соотношение

$$\mathbf{S}(k) = \overset{\circ}{\mathbf{S}}(k), \quad k = 1, 2, \dots, h-1; \quad \mathbf{S}(h) = \left[\overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) \mid \mathbf{s} \right], \quad (70)$$

где $\overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) - (p \times \overset{\circ}{m}(h))$ -матрица истинной структуры регрессионного уравнения для переменной с номером h ; $\mathbf{S}(h) - (p \times (\overset{\circ}{m}(h) + 1))$ – матрица текущей структуры; $\mathbf{s} - (p \times 1)$ – вектор, для которого выполняется

$$\mathbf{s} = (0, 0, \dots, 0, 1)^T. \quad (71)$$

Сначала вычислим математическое ожидание критерия регулярности в рассматриваемом случае избыточного регрессора.

Различие (70), (71) в структурных матрицах $\overset{\circ}{\mathbf{S}}(h)$ и $\mathbf{S}(h)$ приводит к тому, что для матриц регрессоров в условиях схемы повторных наблюдений выполняется:

$$\mathbf{R}(S, k) = \mathbf{R}(\overset{\circ}{\mathbf{S}}, k), \quad k = 1, 2, \dots, h-1, \quad \mathbf{R}(S, h) = \mathbf{X}\mathbf{S}(h) = \mathbf{X}[\overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) \mid \mathbf{s}] = \quad (72)$$

$$= [\mathbf{X}\overset{\circ}{\mathbf{S}}(h) \mid \mathbf{X}\mathbf{s}] = [\mathbf{R}(\overset{\circ}{\mathbf{S}}, h) \mid \mathbf{r}], \quad (73)$$

где \mathbf{r} – $(n \times 1)$ -вектор наблюдений избыточного регрессора.

Для матриц $\underline{\underline{\mathbf{R}}}(S)$ и $\underline{\underline{\mathbf{R}}}(\overset{\circ}{\mathbf{S}})$, с учётом (72)–(73), получаем

$$\underline{\underline{\mathbf{R}}}(S) = [\underline{\underline{\mathbf{R}}}(\overset{\circ}{\mathbf{S}}) \mid \delta_R], \quad \delta_R^T = (\mathbf{0}_n^T, \mathbf{0}_n^T, \dots, \mathbf{r}^T), \quad (74)$$

где δ_R – $(N \times 1)$ -вектор.

Вычислим математическое ожидание критерия регулярности в случае избыточного регрессора. В этом случае $(h \times h)$ -матрица $\Delta(B/A, S)$ в (51) – так называемое смещение, обусловленное выбором ошибочной структуры S вместо истинной структуры $\overset{\circ}{\mathbf{S}}$, является нулевой матрицей. Доказательство этого утверждения может быть проведено аналогично (54) – (63). Для объединенного вектора смещения $\delta(B/A, S)$ для случая избыточного регрессора выполняется

$$\begin{aligned} \delta(B/A, S) &= \overset{\circ}{\mathbf{y}}(B) - \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, S)\mathbf{C}(A, S)\overset{\circ}{\mathbf{y}}(A) = \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, S)\mathbf{C}(A, S)\underline{\underline{\mathbf{R}}}(A, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \\ &= \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - [\underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}}) \mid \delta_R(B)] \times \\ &\times \left(\left[\begin{array}{c} \underline{\underline{\mathbf{R}}}^T(A, \overset{\circ}{\mathbf{S}}) \\ \delta_R^T(A) \end{array} \right] \Sigma_{\xi}^{-1} [\underline{\underline{\mathbf{R}}}(A, \overset{\circ}{\mathbf{S}}) \mid \delta_R(A)] \right)^{-1} \left[\begin{array}{c} \underline{\underline{\mathbf{R}}}^T(A, \overset{\circ}{\mathbf{S}}) \\ \delta_R^T(A) \end{array} \right] \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(A, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \\ &= \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\mathbf{B}^{-1}\underline{\underline{\mathbf{R}}}^T(\overset{\circ}{\mathbf{S}})\Sigma_{\xi}^{-1}\delta_R \cdot f^{-1} \cdot \delta_R^T \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(S)\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} + \\ &\quad + \underline{\underline{\mathbf{R}}}(B, \overset{\circ}{\mathbf{S}})\mathbf{B}^{-1}\underline{\underline{\mathbf{R}}}^T(\overset{\circ}{\mathbf{S}})\Sigma_{\xi}^{-1}\delta_R \cdot f^{-1} \cdot \delta_R^T \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(S)\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} + \\ &\quad + \delta_R(B) \cdot f^{-1} \cdot \delta_R^T \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(S)\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} - \delta_R(B) \cdot f^{-1} \cdot \delta_R^T \times \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(S)\overset{\circ}{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{0}_N, \end{aligned} \quad (75)$$

где

$$f(S) = \delta_R^T \Sigma_{\xi}^{-1} \delta_R - \delta_R^T \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(S) (\underline{\underline{\mathbf{R}}}^T(S) \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}(S))^{-1} \underline{\underline{\mathbf{R}}}^T(S) \Sigma_{\xi}^{-1} \delta_R = \delta_R^T \Sigma_{\xi}^{-1} \mathbf{M}(S) \delta_R \quad (76)$$

– положительная величина, поскольку матрицы Σ_{ξ}^{-1} и $\mathbf{M}(S)$ положительно определены; δ_R – $(N \times 1)$ -вектор, определённый в (74).

Таким образом, для ковариационной матрицы остатков в случае избыточного регрессора выполняется

$$\det[\Omega_2(B/A, S)] = \det[\Sigma] \cdot \prod_{k=1}^h (n + m(k)). \quad (77)$$

Теперь рассмотрим разность

$$\Delta_2(S, \overset{\circ}{S}) = E\{ARS(S)\} - E\{ARS(\overset{\circ}{S})\} = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\det[\Sigma] \cdot \prod_{k=1}^h (n+m(k))}{\det[\overset{\circ}{\Sigma}] \cdot \prod_{k=1}^h (n+\overset{\circ}{m}(k))} \right). \quad (78)$$

Из (70) следует, что $m(k) = \overset{\circ}{m}(k)$, $k = 1, 2, \dots, h-1$, $m(h) = \overset{\circ}{m}(h) + 1$, поэтому

$$\Delta_2(S, \overset{\circ}{S}) = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{(n+\overset{\circ}{m}(h)+1) \prod_{k=1}^{h-1} (n+\overset{\circ}{m}(k))}{(n+\overset{\circ}{m}(h)) \prod_{k=1}^{h-1} (n+\overset{\circ}{m}(k))} \right) = \frac{1}{h} \ln \left(1 + \frac{1}{n+\overset{\circ}{m}(h)} \right) > 0. \quad (79)$$

Из (79) следует, что в случае избыточного регрессора структура $\overset{\circ}{S}$ всегда лучше структуры S , а регрессор действительно не следует включать в модель.

Проверка выполнения принципа соответствия. Покажем, что полученное условие редукции совпадает с условием редукции отдельного регрессионного уравнения, если предположить в (4), (5) диагональный вид матрицы Σ (напомним, в этом случае оценивать коэффициенты для отдельных регрессионных уравнений можно независимо, последовательно одно за другим). Если Σ диагональная, то матрица Σ^{-1} также диагональная, а для диагональных блоков матрицы Σ_{ξ}^{-1} в этом случае выполняется:

$$\Sigma_{\xi}^{-1}(k, k) = [\sigma_{kk} \mathbf{I}_n]^{-1} = (\sigma_{kk})^{-1} \mathbf{I}_n, \quad k = 1, 2, \dots, h. \quad (80)$$

Учитывая структуру матрицы Σ_{ξ}^{-1} в (80) и структуру матрицы $\underline{\underline{R}}(S)$ в (25), (36), (41), для матрицы \mathbf{H} из (63) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{hh}(S) &= \left[[\mathbf{I}_N - \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{R}}(S) (\underline{\underline{R}}^T(S) \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{R}}(S))^{-1} \underline{\underline{R}}^T(S)] \times \right. \\ &\quad \left. \times [\mathbf{I}_N - \underline{\underline{R}}(S) (\underline{\underline{R}}^T(S) \Sigma_{\xi}^{-1} \underline{\underline{R}}(S))^{-1} \underline{\underline{R}}^T(S) \Sigma_{\xi}^{-1}] \right]_{hh} = \\ &= \mathbf{I}_n - \mathbf{R}(S, h) (\mathbf{R}^T(S, h) \mathbf{R}(S, h))^{-1} \mathbf{R}^T(S, h). \end{aligned} \quad (81)$$

Учитывая (69) и (81), для условия редукции в случае диагональной матрицы Σ получаем

$$\left(\overset{\circ}{\theta}_{m(h)}(h) \right)^2 \mathbf{m}^T \left[\mathbf{I}_n - \mathbf{R}(S, h) (\mathbf{R}^T(S, h) \mathbf{R}(S, h))^{-1} \mathbf{R}^T(S, h) \right] \mathbf{m} \leq \sigma_{hh}, \quad (82)$$

где σ_{hh} – дисперсия аддитивной составляющей для h -й выходной переменной.

Выражение (82) совпадает с известным условием редукции для отдельного регрессионного уравнения (см. например, [12], [13]).

Заключение

По принципам метода группового учета аргументов построен и исследован в схеме повторных наблюдений критерий структурной идентификации для моделирования в классе систем регрессионных уравнений. Получены условия редукции (упро-

щения) системы регрессионных уравнений, оптимальной по составу регрессоров. Эти результаты обобщают результаты автора [10], [11], где при исследовании критерия дополнительно предполагалась ортогональность пропущенного (избыточного) регрессора истинному множеству регрессоров. Разработанный критерий является системным критерием структурной идентификации, при построении которого предполагается совместное оценивание коэффициентов в системе регрессионных уравнений. В частном случае независимого оценивания коэффициентов в разных регрессионных уравнениях предложенный критерий представляет собой сумму критериев регулярности отдельных регрессионных уравнений, т.е. он является обобщением системного критерия регулярности, традиционно применяемого в методе группового учёта аргументов.

Литература

1. Ивахненко А. Г. Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем / А.Г. Ивахненко. – К. : Наукова думка, 1982. – 296 с.
2. Self-organizing methods in modelling: GMDH type algorithms / Ed. By S. J. Farlow. – New York, Basel : Marcel Decker Inc., 1984. – P. 350.
3. Ивахненко А. Г. Помехоустойчивость моделирования / А.Г. Ивахненко, В. С. Степашко. – К. : Наукова думка, 1985. – 216 с.
4. Ивахненко А. Г. Самоорганизация прогнозирующих моделей / А.Г. Ивахненко, Й.А. Мюллер. – К. : Техніка, 1985. – 223 с.
5. Ивахненко А. Г. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным / А.Г. Ивахненко, Ю. П. Юрачковский. – М. : Радио и связь, 1987. – 120 с.
6. Madala H. R. Inductive Learning Algorithms for Complex System Modeling / H. R. Madala, A. G. Ivakhnenko. – London, Tokyo : CRC Press Inc., 1994. – 370 p.
7. Muller J.-A. Self-organizing Data Mining. Extracting Knowledge from Data / J.-A. Muller, F. Lemke. – Hamburg : Libri, 2000. – 250 p.
8. Сарычев А. П. Идентификация состояний структурно-неопределенных систем / А. П. Сарычев. – Днепропетровск : НАН Украины и НКА Украины, Институт технической механики, 2008. – 268 с.
9. Современные методы идентификации систем : пер. с англ. / Эйкхофф П., Ванечек А., Савараги Е., Созда Т., Наказимо Т., Акаике Х., Райбман Н., Петерка В. / Под ред. П. Эйкхоффа. – М. : Мир, 1983. – 400 с.
10. Сарычев А. П. Поиск оптимального множества регрессоров в системе регрессионных уравнений: схема повторных наблюдений / А. П. Сарычев // Міжнародний семінар з індуктивного моделювання, 11–14 липня 2005 р., Київ : збірник праць. – Київ : МННЦИТiС, 2005. – С. 270-277.
11. Сарычев А.П. Системный критерий регулярности в методе группового учета аргументов / А.П. Сарычев // Проблемы управления и информатики. – 2006. – № 6. – С. 25–37.
12. Сарычев А.П. Решение проблемы разбиения в МГУА при расчете критерия регулярности в условиях активного эксперимента / А.П. Сарычев // Автоматика. – 1989. – № 4. – С. 19-27.
13. Сарычев А.П. Определение J-оптимального множества регрессоров по повторным выборкам наблюдений / А.П. Сарычев // Автоматика. – 1993. – № 3. – С. 58-66.
14. Андерсон Т. Введение в многомерный статистический анализ : пер. с англ. / Т. Андерсон. – М. : Физматгиз. – 1963. – 500 с.

References

1. Ivakhnenko A. G. Induktivnyj metod samoorganizacii modelej slozhnykh system / A.G Ivakhnenko. – K. : Naukova dumka, 1982. – 296 s.
2. Self-organizing methods in modelling: GMDH type algorithms / Ed. By S. J. Farlow. – New York, Basel : Marcel Decker Inc., 1984. – P. 350.
3. Ivakhnenko A. G. Pomexhoustojchivost' modelirovanija / A.G Ivakhnenko, V. S. Stepashko. – K. : Naukova dumka, 1985. – 216 s.
4. Ivakhnenko A. G. Samoorganizacija prognozirujuschikh modelej / A.G Ivakhnenko, J. A. Mjuller. – K. : Tekhnika, 1985. – 223 s.

5. Ivakhnenko A. G. Modelirovanie slozhnykh system po eksperimental'nym dannym / A.G Ivakhnenko, Uj. P. Ujrachkovskij. – M. : Radio I svjaz', 1987. – 120 s.
6. Madala H. R. Inductive Learning Algorithms for Complex System Modeling / H. R. Madala , A. G. Ivakhnenko. – London, Tokyo : CRC Press Inc., 1994. – 370 p.
7. Muller J.-A. Self-organizing Data Mining. Extracting Knowledge from Data / J.-A. Muller, F. Lemke. – Hamburg : Libri, 2000. – 250 p.
8. Sarychev A. P. Identifikacija sostojanij strukturno-neopredelennykh system / A. P. Sarychev. – Dnepropetrovs'k : NAN Ukrainy I NKA Ukrainy, Institut tekhnichnoj mekhaniki, 2008. – 268 s.
9. Sovremennye metody Identifikacii sistem : per. s angl. / Eikhoff P., Vanechek A., Savaragi E., Soeda T., Nakazimo T., Akaike H., Rajbman N., Peterka V. / Pod red. P. Eikhoff. – M. : Mir, 1983. – 400 s.
10. Sarychev A. P. Poisk optimal'nogo mnozhestva regressorov v sisteme regressionnykh uravnenij: schema povtornykh nablyudenij / A. P. Sarychev // Mizhnarodnyj seminar z inductivnogo modeljvannja, 11–14 lypnja 2005 r., Kyiiv : zbirnyk prac'. – Kyiiv : MNNCITIS, 2005. – S. 270–277.
11. Sarychev A. P. Sistemnyj kriterij reguljarnosti v metode gruppovogo ucheta argumentov / A. P. Sarychev // Problemy upravlenija i informatiki. – 2006. – № 6. – S. 25–37.
12. Sarychev A. P. Reshenie problemy razbienia v MGUA pri raschete kriterija reguljarnosti v uslovijakh aktivnogo eksperimenta / A. P. Sarychev // Avtomatika. – 1989. – № 4. – S. 19–27.
13. Sarychev A. P. Opredelenie J-optimal'nogo mnozhestva regressorov po povtornym vyborkam nabljudenij / A. P. Sarychev // Avtomatika. – 1993. – № 3. – S. 58–66.
14. Anderson T. Vvedenie v mnogomernyi statisticheskiy analiz : per. s angl. / T. Andercon. – M. : Fizmatgiz. – 1963. – 500 s.

RESUME

A.P. Sarychev

Modeling in the Class of Regression Equations Systems in Structural Uncertainty Conditions

Background: The system of regression equations is traditional mathematical object in the theory and practice GMDH. In 80-th years of the last century academician O.G. Ivakhnenko often posed such tasks in connection with so-called “the objective system analysis (OSA)” and then, as a rule, as system criterion of selection of models (a parameter of quality of regression equations system) various convolutions of criteria GMDH of separate regression equations were applied. The developed criterion is system criterion of structural identification at which construction it is supposed joint estimation of coefficients of regression equations. At construction of system criterion of GMDH joint estimation of coefficients of regression equations is supposed.

Materials and methods: Object of research is process of modelling in a class of systems of regression equations in conditions of uncertainty on structure of regressors.

In this theoretical article we used the multivariate statistical analysis, the regression analysis, the theory of matrixes, the mathematical analysis and the group method of data handling (GMDH).

Results: For modeling in a class of regression equations systems the system criterion of regularity with dividing of observation sample on training and testing subsamples is offered. It is proved, that the optimum set of regressors exists. The condition of a reduction of optimum system of regression equations is obtained. This condition depends on parameters of system regression equations and volumes of samples.

Conclusion: The developed system criterion of regularity allows solving a problem of structural identification in a class of systems of regression equations and can be recommended at the decision of various scientific and practical problems.

Статья поступила в редакцию 09.04.2014.