改善计量经济模型拟合误差的方法

何　耀

一、导引

在经济计量分析的实际工作中，往往希望找到满足以下几个特点的回归经验公式：变量之间的关系有合理的经济解释；解释变量与被解释变量之间有统计上的显著关系；拟合误差尽可能小且相互之间在度量上相差不宜过大。第一个特点的实现要由符合现实的经济理论指导；第二个特点的实现要靠样本的可靠和回归模型的正确；如何满足第三个特点则是本文试图讨论的问题。

经济计量模型的参数估计以 Gauss-Markov 定理为理论基础，广泛地使用着最小二乘法估计线性回归模型的参数，使参数估计具有最佳无偏的统计特性。这是其它线性估计方法不可取代的优点。但从数据拟合的意义上讲，最小二乘法的最优拟合性是以 $\|\ \|_2$ 模即误差平方和达到最小为标准，而不是使“最大误差达到最小”（$\|\cdot\|_\infty$最小）的最优，因此会出现拟合误差有的太大有的又太小的状况。在实际估算时我们往往希望将最大误差减小或者希望误差在度量上大小相对均匀。针对这种情况，我们提出了在不改变由正确线性回归模型所确定的变量关系的前提下，尽可能减小最大拟合误差（或相对误差）的改进方法。这种方法主要针对一类样本数据可信度较高但对拟合状态有特殊要求的线性回归方程，作为其最小二乘估计之后的后继算法。特别在有减小最大相对拟合误差的要求时，此方法有其实用价值。

要使最大拟合误差下降，最多只能达到拟合误差的 $\|\cdot\|_\infty$最小，即 minimax 拟合状态。我们考虑能否在原回归模型的基础上，既利用最小二乘法的计算条件和计算结果，又不改变已经确定的拟合基函数（即解释变量），而使最大拟合误差趋向或接近 minimax 拟合状态呢？这就是我们要回答的问题。

设定经过统计假设检验的正确线性回归模型为 $Y = A\beta + u$，u 为随机扰动向量，其余的定义如下：

由模型确定的估计参数个数为 n，样本容量为 m；Y 为被解释变量，选定的解释变量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$；一般有 $x_j \in C$，$j = 1, 2, \cdots, n$；样本数据点集为 $\{(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{ni}, y_i)\}$，$i = 1, \cdots, m$。$y_i \in R$，而 x_{ji} 可为多维实空间中的点。

列向量 $Y = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T$，参数列向量 $\beta = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_n)^T$；$n < m$，若 $n = m$ 则拟合问题将退化为 Lagrange 插值。

$$A = \begin{bmatrix} x_{12} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{1m} & x_{2m} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \cdots \\ A_m \end{bmatrix} = (x_{ji}) = (a_{ij}), \tag{1}$$

这里，A_i 为矩阵 A 的第 i 个行向量。特别我们在此规定 A 的秩为 n。β 的最小二乘估计为

$$\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \cdots, \hat{\beta}_n)^T = (A^TA)^{-1}A^TY, \tag{2}$$

对于 Y 的拟合值列向量为 $\hat{Y} = (\hat{Y}_1, \hat{Y}_2, \cdots, \hat{Y}_m)^T = A\hat{\beta}$，相应的回归分量公式为：

$$\hat{y}_i = \sum_{j=1}^{n} \hat{\beta}_j x_{ji} = A_i\hat{\beta}, \qquad i = 1, 2, \cdots, m; \tag{3}$$

拟合误差列向量为：

$$e = (e_1, e_2, \cdots, e_m)^T = Y - \hat{Y} \tag{4}$$

我们注意到（2）式中的广义逆矩阵是一个线性算子，当 Y 的分量连续变化时参数估计向量的分量也将随之连续变化，从而可以改变拟合误差。显然这种变化完全不影响矩阵 A，亦即不会改变由回归模型确定的解释变量，在算法上也可反复利用正规方程组系数矩阵的正定性质。调整 Y 而影响，进而使最大拟合误差下降，这便是分析的起点。

二、分析与算法

在以下讨论中，我们仅给出 t=1，t-1=0 时的计算过程，以后的计算只需将其反复进行，类似于“有限步迭代”，我们将看到 t=1，2，…，且最多不超过 n。

我们定义：$y_i^{(0)}=\hat{y}_i$; $e_i^{(0)}=e_i=y_i-\hat{y}_i^{(0)}$; $d_i^{(0)}=\left|e_i^{(0)}\right|$; $i=1,2,\cdots,m$。 (5)

注意(5)中拟合误差 $e_i^{(0)}$ 的表达式，其中 y_i 是没有上标的，即对所有的 $i=1,2,\cdots,m$ 和 t 总有 $e_i^{(t)}=y_i-\hat{y}_i^{(t)}$；在 $t=1$ 时，上标(0)均指原回归模型的计算结果和相关数据，从 $t=2$ 开始则(0)指 $t-1$ 步的计算结果和相关数据。

假定与参数估计向量 $\hat{\beta}^{(0)}$ 相对应的拟合误差中有 s 个绝对值相等的最大者：

$$d_{k_1}^{(0)}=d_{k_2}^{(0)}=\cdots=d_{k_s}^{(0)}>d_{k_{s+1}}^{(0)}\geq d_{k_{s+2}}^{(0)}\geq\cdots\geq d_{k_m}^{(0)}, \tag{6}$$

我们要同时对 $Y^{(0)}$ 的 s 个分量进行扰动，扰动后的向量表示为

$$Y^{(1)}=(y_1^{(0)},\cdots y_m^{(1)})^T=Y^{(0)}+\rho\sum_{h=1}^{s}\delta_h I_{k_h} \tag{7}$$

其中 I_{k_h} 为 m 维向量空间中的第 k_h 个单位向量，$0<\rho<1$。显然 $y_{k_h}^{(0)}$ 上的扰动为 $\rho\delta_h$。

首先讨论如何确定 δ_h 才能使 s 个最大误差同时等量下降。

引理 1：当 $s\leq n$ 时，则（Ⅰ）矩阵 A 的 s 个行向量 $A_{k_1},A_{k_2},\cdots,A_{k_s}$ 是线性无关的；（Ⅱ）若记 $\triangle_{k_pk_q}=A_{k_p}(A^TA)^{-1}A_{k_q}^T, p,q=1,2,\cdots,s$，下列 $s\times s$ 方阵 $\triangle$ 是正定矩阵：

$$\triangle=\begin{bmatrix}\triangle_{k_1k_1} & \triangle_{k_1k_2} & \cdots & \triangle_{k_1k_s}\\ \triangle_{k_2k_1} & \triangle_{k_2k_2} & \cdots & \triangle_{k_2k_s}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \triangle_{k_sk_1} & \triangle_{k_sk_2} & \cdots & \triangle_{k_sk_s}\end{bmatrix}_{s\times s}$$

证明：由前定的最小二乘估计已知矩阵 A 的秩为 n，故其任意 s 个行向量在 s⩽n 时一定是线性无关的；又由于方阵 $(A^TA)^{-1}$ 是正定的，因此可对其进行 Cholesky 分解，即有 $(A^TA)^{-1}=GG^T$，G 为 n 阶满秩三角阵，加之已设 A 的 s 个行向量 A_{k_1}，…，A_{k_s} 是线性无关的，因此有

$$\triangle=\begin{bmatrix}A_{k_1}\\ \cdots\\ A_{k_s}\end{bmatrix}(GG^T)_{n\times n}[(A_{k_1})^T,\cdots,(A_{k_s})^T]_{n\times n}=\begin{bmatrix}A_{k_1}G\\ A_{k_2}G\\ \cdots\\ A_{k_s}G\end{bmatrix}_{s\times s}[G^T(A_{k_1})^T,G^T(A_{k_2})^T,\cdots,G^T(A_{k_s})^T]_{s\times s}$$

这就证明了是正定矩阵。

引理 2：当假定（Ⅰ） $d_{k_1}^{(0)}=d_{k_2}^{(0)}=\cdots=d_{k_s}^{(0)}>d_{k_{s+1}}^{(0)}\geq d_{k_{s+2}}^{(0)}\geq\cdots\geq d_{k_m}^{(0)}$;

（Ⅱ）$A_{k_1},A_{k_2},\cdots A_{k_s}$ 是线性无关的；

（Ⅲ）$\hat{Y}^{(0)}$ 和 $\hat{Y}^{(1)}$ 分别是 $Y^{(0)}$ 和 $Y^{(1)}$ 的最小二乘拟合向量，

并记 $\delta=(\delta_1,\delta_2,\cdots,\delta_s)^T, R^{(0)}=(e_{k_1}^{(0)},e_{k_2}^{(0)},\cdots,e_{k_s}^{(0)})^T$ 时，线性方程组有唯一解存在，则有

$$d_{k_h}^{(1)}=(1-\rho)d_{k_h}^{(0)},\ (h=1,2,\cdots,s,0<\rho<1),$$

其中 $d_{k_h}^{(1)}=\left|e_{k_h}^{(1)}\right|=\left|y_{k_h}-\hat{y}_{k_h}\right|$, $\hat{y}_{k_h}^{(1)}=A_{k_h}(A^TA)^{-1}A^TY^{(1)}$。

证明：由引理 1 可知当 $s\leq n$ 时，$\triangle\delta=Rd^{(0)}$ 有唯一解存在，此方程组也可表为

$$\sum_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{k_pk_h}=e_{k_p}^{(0)},p=1,2,\cdots,s \tag{*}$$

再由 (3) 和 (7) 可知

$$\hat{y}_i^{(1)}-\hat{y}_i^{(0)}=A_i(A^TA)^{-1}A^T(Y^{(1)}-Y^{(0)})=A_i(A^TA)^{-1}A^T(\rho\sum_{h=1}^{s}\delta_hI_{k_h}=\rho\sum_{h=1}^{s}\delta_hA_i(A^TA)^{-1}A^TI_{k_h}$$

$$=\rho\sum\delta_hA_i(A^TA)^{-1}(A_{k_h})^T=\rho\sum_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{ik_h} \tag{8}$$

$$d_i^{(1)}=\left|y_i-\hat{y}_i^{(0)}+\hat{y}_i^{(0)}-\hat{y}_i^{(1)}\right|=\left|e_i^{(0)}-\rho\sum_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{ik_h}\right| \tag{9}$$

当脚标 $i=k_p; p=1,2,\cdots s;\quad i=1,2,\cdots,m; k\in\{i\}$ 时，注意（*）式，则有

$$d_{k_p}^{(1)}=\left|e_{k_p}^{(0)}-\rho\sum_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{k_pk_h}\right|=\left|e_{k_p}^{(0)}-\rho e_{k_p}^{(0)}\right|=\left|(1-\rho)e_{k_p}^{(0)}\right| \tag{9*}$$

$$=(1-\rho)\left|e_{k_p}^{(0)}\right|=(1-\rho)d_{k_p}^{(0)}$$ 证毕。

现在我们讨论如何确定 ρ。

由引理 1 可知, 只要调整前的最大拟合误差个数 $s \le n$, 则引理 2 中的假设条件都可以得到满足, 而只要能找到 ρ, 使 $0 < \rho < 1$, 则由引理 2 可知: 用量 $\rho\delta_{k_h}$ 去扰动 $Y^{(0)}$ 的相应分量可得 $Y^{(1)}$, 进而用对 $Y^{(1)}$ 所做的最小二乘估计 $\hat{\beta}^{(1)} = (A^{A})^{-1}A^{T}Y^{(1)}$ 构造对 Y 拟合 $\hat{Y}^{(1)} = A\hat{\beta}^{(1)}$ 就可使 s 个对应点上的拟合误差都小于调整前的最大误差, 即 $d_{k_p}^{(1)} = (1-\rho)d_{k_p}^{(0)} < d_{k_p}^{(0)}, h = 1, 2, \cdots, s$; 但这还不够, 因为只有使其余 $m - s$ 个拟合误差中的最大者也不大于 $d_{k_p}^{(1)}$, 才可保证扰动后的最大拟合误差严格小于扰动前的最大拟合误差, 结合(9) 式可由下式说明这一设想: $\max\limits_{1\le i\le m, i\ne k_1, k_2, \cdots, k_s}\{d_i^{(1)}\} = \max\limits_{1\le i\le m, i\ne k_1, \cdots, k_s}\{\left|e_i^{(0)} - \rho\sum\limits_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{ik_h}\right|\} = d_{k_1}^{(1)} = (1-\rho)d_{k_1}^{(0)} < d_{k_1}^{(0)}$,

我们要找的 ρ 必须满足上式。下面定理的证明过程给出了 ρ 的计算方法。

定理 1: 若符合引理 2 的三个假设条件, 则有唯一的 ρ 存在, 且 ρ 同时满足 $0 < \rho < 1$ 和下列不等式:

$$\max_{1\le i\le m, i\ne k_1, k_2, \cdots, k_s}\{d_i^{(1)}\} = \max_{1\le i\le m, i\ne k_1, \cdots, k_s}\{\left|e_i^{(0)} - \rho\sum_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{ik_h}\right|\} = (1-\rho)d_{k_1}^{(0)} < d_{k_1}^{(0)}, \tag{10}$$

证明: 要使满足 (10) 意味它必须同时满足下列二式:

Ⅰ) 对某些 $i, i \ne k_1, \cdots, k_s, 1 \le i \le m, d_i^{(1)} = \left|e_i^{(1)}\right| = \left|e_i^{(0)} - \rho\sum\limits_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{ik_h}\right| = (1-\rho)d_{k_1}^{(0)}$

Ⅱ) 对另外的 i, 记为 $j, j \ne k_1, \cdots, k_s, 1 \le j \le m, d_j^{(1)} = \left|e_j^{(1)}\right| \le (1-\rho)d_{k_1}^{(0)}$

首先我们给定集合 M_1, $M_1 = \{i\,|\,[sgn(\sum_i) = -sgn(e_i^{(0)}) \vee 0] \vee [e_i^{(0)} = 0], 1 \le i \le m, i \ne k_1, \cdots, k_s\}$,

这里定义 $\sum_i = \sum\limits_{h=1}^{s}\delta_h\triangle_{ik_h}$, $\vee$ 为逻辑加。

当 $i \in M_1$ 时, 根据 Ⅰ) 式可得 $\left|e_i^{(0)}\right| + \rho\left|\sum_i\right| = (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|$, 由此解得与 M_1 相关联的 ρ 为

$$\rho_i^{(1)} = \frac{\left|e_{k_1}^{(0)}\right| - \left|e_i^{(0)}\right|}{\left|e_{k_1}^{(0)}\right| + \left|\sum_i\right|} \tag{11}$$

并由此解法可知它满足 Ⅰ) 且有 $0 < \rho_i^{(1)} < 1$。

这里有二个事实特别要注意:

* M_1 是非空集合, 否则对于所有的 $i \ne k_1, \cdots, k_s$ 存在 $sgn(\sum_i) = sgn(e_i^{(0)})$, 因此根据(9) 式可得 $\left|e_i^{(1)}\right| = \left|e_i^{(0)} - \rho\sum_i\right|, (0 < \rho < 1)$, 只要足够小, 就有 $\left|e_i^{(1)}\right| < \left|e_i^{(0)}\right|$; 另外由引理 2 已证 $\left|e_{k_h}^{(1)}\right| < \left|e_{k_h}^{(0)}\right|, (h = 1, 2, \cdots, s)$, 由此对所有的 $j = 1, 2, \cdots, m$ 都有 $\left|e_j^{(1)}\right| < \left|e_j^{(0)}\right|$, 这表明原回归模型的拟合误差平方和 $\sum\limits_{j=1}^{m}(e_j^{(0)})^2$ 被减小了, 这又与回归模型的参数估计 $\hat{\beta}^{(0)} = (A^{T}A)^{-1}A^{T}Y^{(0)}$ 是最小二乘估计的事实相矛盾。因此 M_1 必定非空。

* * $\rho_i^{(1)} \ne 1$。若要 $\rho_i^{(1)} = 1$, 当且仅当 $e_i^{(0)} = \sum_i = 0$, 这又与 M_1 的定义相矛盾。

其次我们给定集合 M_2: $M_2 = \{i\,|\,[sgn(\sum_i) = sgn(e_i^{(0)})] \wedge [\left|\sum_i\right| \le \left|e_i^{(0)}\right|], 1 \le i \le m, i \ne k_1, \cdots, k_s\}$,

这里 $\wedge$ 为逻辑乘。对于 $i \in M_2$ 可由 Ⅰ) 得到 $\left|e_i^{(0)}\right| - \rho\left|\sum_i\right| = (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|$, 由此解得

$$\rho_i^{(2)} = \frac{\left|e_{k_1}^{(0)}\right| - \left|e_i^{(0)}\right|}{\left|e_{k_1}^{(0)}\right| - \left|\sum_i\right|} \tag{12}$$

它满足 Ⅰ) 式并有 $0 < \rho_i^{(2)} \le 1$。

下面给出集合 M_3: $M_3 = \{i\,|\,[sgn(\sum_i) = sgn(e_i^{(0)})] \wedge [\left|\sum_i\right| > \left|e_i^{(0)}\right|], 1 \le i \le m, i \ne k_1, \cdots, k_s\}$,

对于 $i \in M_3$, 结合 Ⅰ) 得到 $\rho\left|\sum_i\right| - \left|e_i^{(0)}\right| = (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|$, 解之得

$$\rho_i^{(3)} = \frac{\left|e_{k_1}^{(0)}\right| + \left|e_i^{(0)}\right|}{\left|e_{k_1}^{(0)}\right| + \left|\sum_i\right|} \tag{13}$$

它当然满足 Ⅰ) 并有 $0 < \rho_i^{(3)} < 1$。现在我们如下取定 ρ:

$$\rho = \min\{\min_{i\in M_1}(\rho_i^{(1)}), \min_{i\in M_2}(\rho_i^{(2)}), \min_{i\in M_3}(\rho_i^{(3)})\}, \tag{14}$$

由 ρ 的取法和 M_1 的非空性可知: ρ 是存在且唯一的。至此它满足 Ⅰ) 且 $0 < \rho < 1$。

最后我们证明 ρ 也同时满足 Ⅱ) 式: 若 $j \in M_1$, 根据(9), (11) 和(14),

$\left|e_j^{(1)}\right| = \left|e_j^{(0)} - \rho\sum_j\right| = \left|e_j^{(0)}\right| + \rho\left|\sum_j\right| \le \left|e_j^{(0)}\right| + \rho_j^{(1)}\left|\sum_j\right| = (1-\rho_j^{(1)})\left|e_{k_1}^{(0)}\right| \le (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|$;

若 $j \in M_2$, 根据(9), (12) 和(14), 我们有 $\left|e_j^{(0)}\right| \ge \left|\sum_j\right|$,

$$\left|e_j^{(1)}\right| = \left|e_j^{(0)} - \rho\sum_j\right| = \left|e_j^{(0)}\right| - \rho\left|\sum_j\right| = \left|e_j^{(0)}\right| - \rho_j^{(2)}\left|\sum_j\right| + \rho_j^{(2)}\left|\sum_j\right| - \rho\left|\sum_j\right|$$
$$= (1-\rho_j^{(2)})\left|e_{k_1}^{(0)}\right| + (\rho_j^{(2)}-\rho)\left|\sum_j\right| \le (1-\rho_j^{(2)})\left|e_{k_1}^{(0)}\right| + (\rho_j^{(2)}-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|$$
$$= (1-\rho_j^{(2)}+\rho_j^{(2)}-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right| = (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|;$$

若 $j \in M_3$, 根据(9), (13) 和(14), $\rho \le \rho_j^{(3)}$, $\left|e_j^{(0)}\right| < \left|\sum_j\right|$,

1) 如果 $\left|e_j^{(0)}\right| \ge \rho\left|\sum_j\right|$, 则有

$$\left|e_j^{(1)}\right| = \left|e_j^{(0)} - \rho\sum_j\right| = \left|e_j^{(0)}\right| - \rho\left|\sum_j\right| \le \left|e_j^{(0)}\right| - \rho\left|e_j^{(0)}\right| = (1-\rho)\left|e_j^{(0)}\right| \le (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|,$$

2) 如果 $\left|e_j^{(0)}\right| < \rho\left|\sum_j\right|$, 则有

$$\left|e_j^{(1)}\right| = \left|e_j^{(0)} - \rho\sum_j\right| = \rho\left|\sum_j\right| - \left|e_j^{(0)}\right| = \rho_j^{(3)}\left|\sum_j\right| - \left|e_j^{(0)}\right| - \rho_j^{(3)}\left|\sum_j\right| + \rho\left|\sum_j\right|$$
$$= (1-\rho_j^{(3)})\left|e_{k_1}^{(0)}\right| - (\rho_j^{(3)}-\rho)\left|\sum_j\right| \le (1-\rho)\left|e_{k_1}^{(0)}\right|$$

由以上证明可知存在唯一的 ρ, 它总是同时满足 Ⅰ) 和 Ⅱ), 且有 $0 < \rho < 1$。证毕。

根据引理 1、引理 2 和定理 1 的结论及其证明过程, 我们得到以下推论:

推论: 如果引理 2 的假设条件被满足, 扰动向量 $\delta = (\delta_1, \delta_2, \cdots \delta_s)^T$ 由引理 2 所确定; ρ 由定理 1 所确定, 从而确定了 $Y^{(1)} = Y^{(0)} + \rho\sum_{j=1}^{s}\delta_j I_{k_j}$; 则把最小二乘解向量 $\hat{\beta}^{(1)} = (A^TA)^{-1}A^TY^{(1)}$ 作为原回归模型 $Y = A\beta + \mu$ 的拟合解时, 至少存在 $s+1$ 个绝对值相等的最大误差满足下式,

$$\left|e_{k_h}^{(1)}\right| = \left|y_{k_h} - \hat{y}_{k_h}^{(1)}\right| = \left|y_{k_h} - A_{k_h}\hat{\beta}^{(1)}\right| = (1-\rho)\max_{1\le i\le m}\{\left|e_i^{(1)}\right|\}$$

$h = 1, 2, \cdots, l,\ s+1 \le l < m;\ s \le n, 0 < \rho < 1$

推论中所表达的含义有几点要注意:

1) 矩阵 A 的秩为 n 是先决的计算条件, 其任意 n 个行向量是线性无关的, 已隐含 $Haar$ 条件[2] 的满足。

2) 本算法只可在 $s \le n$ 时执行, 若 $s > n$ 则矩阵 △ 为奇异的, 引理 2 的条件不被满足, 计算必须停止。

3) 算法执行的次数(即对 Y 扰动的次数) $t \le s \le n$, 因此算法至多执行 n 次, 则至少可得 $n+1$ 个度量相等且逐次严格递减的最大拟合误差。具有 $n+1$ 个度量相等的最大误差, 是拟合解成为 $minimax$ 解的必要条件[2], 但不充分。为此, 我们在后面将提供一个检验最终拟合解是否为 $minimax$ 解的方法。

4) 注意到(9) 式当 $i = k_h, h = 1, 2, \cdots, s$ 时也可表为 $e_{k_h}^{(t)} = (1-\rho)e_{k_h}^{(t-1)}, t = 1, 2, \cdots,, t \le n$。由于 $0 < (1-\rho)$, 故最终不少于 $n+1$ 个的最大拟合误差 $e_{k_h}^{(t)}$ 的符号与初始误差 $e_{k_h}^{(0)}$ 的符号对应相同。这是迭代法求解 $minimax$ 拟合解的算法特征[3]。

5) 求解 $\hat{\beta}^{(1)} = (\hat{\beta}_1^{(1)}, \hat{\beta}_2^{(1)}, \cdots, \hat{\beta}_n^{(1)},)^T$ 时可用下式:

$$\hat{\beta}^{(1)} = (A^TA)^{-1}A^TY^{(1)} = (A^TA)^{-1}A^T(Y^{(0)} + \rho\sum_{j=1}^{s}\delta_jI_{k_j}) = (A^TA)^{-1}A^TY^{(0)} + \rho\sum\delta_j(A^TA)^{-1}A^TI_{k_j}$$
$$= \hat{\beta}^{(0)} + \rho\sum_{j=1}^{s}\delta_j(A^TA)^{-1}(A_{k_j})^T \tag{15}$$

其中 $(A_{k_j})^T$ 为 A 矩阵的第 k_j 个行向量的转置向量。

三、计算步骤

(a) 对给定的样本数据作回归计量模型, 并对其参数作出最小二乘估计。设经过统计检验 后决定的正确回归模型为 $Y = A\beta + u$, 其对应样本数据组为 $(x_{1i}, x_{2i}, \cdots x_{ni}, y_i)$, $i = 1, \cdots, m$。$A = (x_{ji})$, $j = 1, 2, \cdots, m$。其参数最小二乘估计向量 $\hat{\beta} = (A^TA)^{-1}A^TY$。

(b) 取出 A 的数据, 计算 A^TA; $\hat{\beta} \Rightarrow \hat{\beta}^{(0)}$; $0 \Rightarrow t$, t 为第 t 次执行调整算法。

(c) 计算 $A_i\hat{\beta}^{(t)} = \hat{y}_i^{(t)}$, $y_i - \hat{y}_i^{(t)} = e_i^{(t)}$, $i = 1, 2\cdots, m$。检测有多少个绝对值相等的最大拟合误差, 并记个数为 s。(由于舍入误差的影响, 允许最大拟合误差绝对值之间有微小差别, 即可定义 $0 < \epsilon << 1$, 当 $\left|\left|e_{k_1}^{(t)}\right| - \left|e_{k_h}^{(t)}\right|\right| \le \epsilon, h = 2, 3, \cdots, s$, 视其为相等。) 记下 s 个最大拟合误差的脚标 k_h。

(d) 若 $S \ge n+1$, 则停止运算; 否则继续下一步。

(e) 计算矩阵 △, 并求解线性方程组 $\triangle\delta = R^{(t)}$, $R^{(t)} = (e_{k_1}^{(t)}, e_{k_2}^{(t)}, \cdots, e_{k_s}^{(t)})^T$。算法见引理 1。

(f) 根据集合 M_1, M_2, M_3 的定义和(11), (12), (13), (14) 式确定 ρ。见定理 1 。

(g) 求解新的拟合解 $\hat{\beta}^{(t+1)} = \hat{\beta}^{(t)} + \rho\sum_{j=1}^{s}\delta_j(A^TA)^{-1}(A_{k_j})^T$。见(15) 式。

(计算时若令 $(A^TA)^{-1}(A_{k_j})^T = \Phi_{k_j}$, 则可解 $A^TA\Phi_{k_j} = (A_{k_j})^T$ 得 Φ_{k_j}。)

(h) $t+1\Rightarrow t$; 返回 (c)。

由于矩阵 (A^TA), $\triangle$ 都是正定的, 计算中可反复调用 Cholesky 分解和求解三角形线性方程组的过程体[4]。

四、Minimax 解的检验方法

设以上算法执行了 t_0 次, 最终使最大拟合误差下降到至少 $n+1$ 个度量上一致时的相应拟合解为 $\hat{\beta}^{(t_0)}$, 它是否就是原回归模型所确定的超定方程组 $Y = A\beta$ 的一个 minimax 拟合解呢? 下面我们转述关于 minimax 解的特征定理[3]:

对给定点, $\hat{\beta}^{(t_0)} \in R^n$, 定义 $\sigma_i = \operatorname{sgn}(e_i^{(t_0)}) = \operatorname{sgn}(y_i - A_i\hat{\beta}^{(t_0)})$, 集合 $M = \{i \,|\, |e_i^{(t_0)}| = \max\limits_{1\le j\le m}|e_j^{(t_0)}|\}$, 则 $\hat{\beta}^{(t_0)}$ 是 $Y = A\beta$ 的 minimax 解, 当且仅当 R^n 的原点 O 被包含于下述凸包中:

$$O = \sum_i \theta_i\sigma_i A_i,\quad \sum_i \theta_i = 1,\quad \theta_i \ge 0,\quad i \in M。(A_i \text{ 为矩阵 } A \text{ 的第 } i \text{ 行})。$$

已知目前有不少于 n+1 个度量一致的最大拟合误差 $e_{k_h}^{(t_0)}$, $h = 1, \cdots, s$, $k_h \in M$, $s \ge n+1$, 又知 A 的任意 n 个行向量是线性无关的, 不失一般性, 可记 M 中的元为 $k_1 < k_2, \cdots < k_s$, 由于 $\{A_{k_h} | k_h \in M\}$ 中的任意一个元可表为其余任意 n 个元的线性组合, 因此存在 n+1 个不全为 0 的数 ξ_{k_h}, $h = 1, 2, \cdots, n+1$, 使

$$O = \sum_{h=1}^{n+1}\xi_{k_h}A_{k_h} + \sum_{h=n+2}^{s}\xi_{k_h}A_{k_h} = \sum_{h=1}^{n+1}\xi_{k_h}A_{k_h} + \sum_{h=n+2}^{s}0A_{k_h},\quad k_h \in M,$$

我们也可将其写为

$$O = \sum_{h=1}^{n+1}\frac{|\xi_{k_h}|}{\sum\limits_{j=1}^{n+1}|\xi_{k_j}|}\operatorname{sgn}(\xi_{k_h})A_{k_h} + \sum_{h=n+1}^{s}0A_{k_h},\qquad k_h \in M,\tag{16}$$

若令 $\theta_{k_h} = \dfrac{|\xi_{k_h}|}{\sum\limits_{j=1}^{n+1}|\xi_{k_j}|}$, $h = 1, 2, \cdots, s$, 则有 $\sum\limits_{h=1}^{s}\theta_{k_h} = 1$, $\theta_{k_h} \ge 0$, $\theta_{k_{n+2}} = \theta_{k_{n+3}} = \cdots = \theta_{k_s} = 0$,

由(16) 有

$$O = \sum_{h=1}^{s}\theta_{k_h}\operatorname{sgn}(\xi_{k_h})A_{k_h} = \sum_{h=1}^{n+1}\theta_{k_h}\operatorname{sgn}(\xi_{k_h})A_{k_h},\quad k_h \in M,\quad \text{或}\quad O = \sum_{h=1}^{n+1}\theta_{k_h}(-\operatorname{sgn}(\xi_{k_h}))A_{k_h},\quad k_h \in M,$$

上面二式中任一式都表明 R^n 的原点 O 包含在集合 $\{\operatorname{sgn}(\xi_{k_h})A_{k_h} | k_h \in M\}$ 的凸包中。显然, 只要有

$$\operatorname{sgn}(\xi_{k_h}) = \operatorname{sgn}(e_{k_h}^{(t_0)}),\quad h = 1, 2, \cdots, n+1,\quad k_h \in M,\qquad \text{或者}$$

$$-\operatorname{sgn}(\xi_{k_h}) = \operatorname{sgn}(e_{k_h}^{(t_0)}),\quad h = 1, 2, \cdots, n+1,\quad k_h \in M,\tag{17}$$

就可判定 $\hat{\beta}^{(t_0)}$ 是 minimax 拟合解。

我们看如何求组合系数 $\{\xi_{k_h} | k_h \in M\}$。前面已设定当 $h > n+1$ 时 $\xi_{k_h} = 0$; 对于第 $n+1$ 个组合系数, 我们规定 $\xi_{k_{n+1}} = -1$, 则其余的 $\xi_{k_1}, \xi_{k_2}, \cdots, \xi_{k_n}$ 可由如下线性组合式求出:

$$O^T = \sum_{h=1}^{n+1}\xi_{k_h}(A_{k_h})^T,\qquad \text{它也可改写为}\qquad \sum_{h=1}^{n}\xi_{k_h}(A_{k_h})^T = (A_{k_{n+1}})^T,\tag{18}$$

由于 n 维向量组 $A_{k_1}, A_{k_2}, \cdots, A_{k_n}$ 是线性无关的, (18) 有唯一的解向量 $(\xi_{k_1}, \cdots, \xi_{k_n})^T$ 存在, 加上已定的 $\xi_{k_{n+1}} = -1$, 这一组组合系数就唯一确定了。最后只需按(17) 式比较符号就可断定 $\hat{\beta}^{(t_0)}$ 是否为 minimax 解。

五、计算简例

取定矩阵 $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 \\ 1 & -1 & 2 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T$ 和向量 $Y = [3\ \ 1\ \ 7\ \ 11.1\ \ 6.9\ \ 7.2]^T$, $m = 6$, $n = 2$。其相应模型 $Y = A\beta + u$ 的参数最小二乘估计为 $\hat{\beta} = \hat{\beta}^{(0)} = \begin{bmatrix} 2.07412 \\ 1.80784 \end{bmatrix}$

其拟合误差为 $e_i^{(0)} = y_i - \hat{y}_i^{(0)}$, $i = 1, 2, \cdots, 6$, 列表如下

$e_1^{(0)}$	$e_2^{(0)}$	$e_3^{(0)}$	$e_4^{(0)}$	$e_5^{(0)}$	$e_6^{(0)}$
-0.88196	0.73372	1.31019	-0.27961	0.94392	-0.83019

按本文算法计算的第一次调整拟合解为 $\hat{\beta}^{(1)} = \begin{bmatrix} 2.0333 \\ 1.9778 \end{bmatrix}$

其相应的拟合误差为 $e_i^{(1)} = y_i - \hat{y}_i^{(1)}$, $i = 1, 2, \cdots, 6$, 列表如下:

$e_1^{(1)}$	$e_2^{(1)}$	$e_3^{(1)}$	$e_4^{(1)}$	$e_5^{(1)}$	$e_6^{(1)}$
-1.01111	0.94444	1.01111	-0.87777	0.85555	-0.87777

第二次调整拟合解为 $\hat{\beta}^{(2)} = \begin{bmatrix} 2.0000 \\ 2.0000 \end{bmatrix}$

其相应的拟合误差为 $e_i^{(2)} = y_i - \hat{y}_i^{(2)}$, $i = 1, 2, \cdots, 6$, 列表如下:

$e_1^{(2)}$	$e_2^{(2)}$	$e_3^{(2)}$	$e_4^{(2)}$	$e_5^{(2)}$	$e_6^{(2)}$
-1.0000	1.0000	1.0000	-0.90000	0.90000	-0.80000

例中调整算法执行了二次, $t = 2 = n$, 得 $s = n + 1 = 3$ 个度量一致且逐次严格递减的最大拟合误差: $|e_3^{(2)}| = |e_2^{(2)}| = |e_1^{(2)}| < |e_3^{(1)}| < |e_3^{(0)}|$, 由于 $s > n$ 停止计算。注意, 拟合误差的符号在计算过程中始终不变: $\mathrm{sgn}(e_i^{(2)}) = (e_i^{(1)}) = (e_i^{(0)})$, $i = 1, 2, \cdots, 6$。

最后检验 $\hat{\beta}^{(2)}$ 是否为 minimax 解。

先按从小到大的次序排列集合中的元: $k_1 = 1$, $k_2 = 2$, $k_3 = k_{n+1} = 3$

因此按 (18) 式取定的线性方程组为:

$$\xi_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \xi_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

解之得 $\xi_1 = 1.5, \xi_2 = -0.5$, 并且令 $\xi_3 = -1$。再比较符号, 由于

$$\mathrm{sgn}(\xi_{k_1}) = \mathrm{sgn}(\xi_1) = 1 = -\mathrm{sgn}(e_1^{(2)}) = -\mathrm{sgn}(e_{k_1}^{(t_0)})$$

$$\mathrm{sgn}(\xi_{k_2}) = \mathrm{sgn}(\xi_2) = -1 = -\mathrm{sgn}(e_2^{(2)}) = -\mathrm{sgn}(e_{k_2}^{(t_0)})$$

$$\mathrm{sgn}(\xi_{k_3}) = \mathrm{sgn}(\xi_3) = -1 = -\mathrm{sgn}(e_3^{(2)}) = -\mathrm{sgn}(e_{k_3}^{(t_0)})$$

根据 minimax 解的特征定理可知 $\hat{\beta}^{(2)} = (2.0000 \quad 2.0000)^T$ 确实是对 Y 的 minimax 拟合解。

实际上本例选自[3], 用 Polya 算法求其 minimax 解时, 迭代次数 $p = 200$ 时的解为 $(2.0014 \quad 1.9994)^T$, 当 $p \to \infty$ 时, 其计算解趋向 $(2.0000 \quad 2.0000)^T$。

六、减小最大相对拟合误差

以上方法可用于减小最大相对拟合误差。

设相对拟合误差为 $r_i^{(t)} = (e_i^{(t)}/y_i) = (|y_i - \hat{y}_i^{(t)}|/y_i)$, $i = 1, 2, \cdots, m$, $t = 0, 1, 2, \cdots$, $t \le s \le n$, 在前面的整个分析过程中, 只要注意:

(I) 在引理 2 内保持方程组 $\triangle\delta = R^{(t)}$ 的右端列向量 $R^{(t)} = (e_{k_1}^{(t)}, e_{k_2}^{(t)}, \cdots, e_{k_s}^{(t)})^T$

(II) 从引理 2 的(9) 式开始, 其后所有的 $\sum_i$ 由 $(\sum_i / y_i)$ 替代, $\sum_i = \sum_{h=1}^{s} \delta_h \triangle_{ik_h}$,

$$\triangle_{ik_h} = A_i (A^T A)^{-1} (A_{k_h})^T, \ i = 1, 2, \cdots, m, \ k_h \in \{i\}, \ h = 1, 2, \cdots, s, \ s \le n;$$

(III) 在其余的所有分析中用 $r_i^{(t)}$ 替代 $e_i^{(t)}$, $i = 1, 2, \cdots, m$, $k_h \in \{i\}$, $h = 1, 2, \cdots, s$, $s \le n$;

则对于绝对拟合误差 $e_i^{(t)}$ 分析的结论也同样适用于相对拟合误差 $r_i^{(t)}$。

在进行减小最大拟合相对误差计算时, 应对计算步骤 (c), (f) 作出相应修改, 步骤 (e) 和其它步骤不要改动。为使计算程序通用于处理以上二种误差, 也只需在相关步骤中用条件语句分流。

另外要注意当某些 y_i 的绝对值很小时, 计算相对误差会扩散舍入误差, 因此在计算之前最好对数据作标度化处理 [5]。若有某些 y_i 为 0, 则要作坐标变换。

典型的例子是对于一个二元回归模型, 样本容量 $m = 59$, 估计参数个数 $n = 10$, 在回归方程通过统计检验后, 其最大拟合相对误差为 9.16%, 另外在十二个点上的误差超过 6%, 用此方法经过 $n = 10$ 次扰动计算后, 最大拟合相对误差在 $n + 1 = 11$ 个点上一致达到 3.42%。

(作者单位: 武汉大学经济学院)

(责任编辑: 曾国安)