УДК 519.6
DOI: 10.26102/2310-6018/2024.44.1.016

Адаптивная квантильная регрессия

А.С. Тюрин✉

Липецкий государственный технический университет, Липецк, Российская Федерация

Резюме. Актуальность темы исследования обусловлена растущей потребностью в быстрых и точных инструментах построения математических моделей. В данной работе рассматриваются подходы к построению адаптивной квантильной регрессии, так как выбор оптимального квантиля в процессе обучения может сэкономить большое количество времени исследователя. Правильный выбор квантиля может существенно улучшить показатели модели на тестовых наборах данных и, как следствие, позволит получать более надежные прогнозы при реальном использовании такой математической модели. Разработанный подход представляет собой комбинацию модифицированной квантильной регрессии и градиентного спуска, что улучшает адаптацию модели к различным данным. В работе приведено подробное описание разрабатываемого алгоритма, сравнение точности работы предложенной модели с традиционной квантильной регрессией и градиентным спуском, и их комбинациями, а также анализируется время обучения моделей, включая количество эпох обучения. Эксперименты показывают, что адаптивная квантильная регрессия демонстрирует повышенную точность при сокращении времени обучения. Результаты подчеркивают эффективность этого метода в области анализа данных и прогнозирования, открывая новые перспективы для более эффективных и быстрых моделей машинного обучения.

Ключевые слова: квантильная регрессия, адаптивный алгоритм, градиентный спуск, математическое моделирование, численные методы.

Для цитирования: Тюрин А.С. Адаптивная квантильная регрессия. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии.* 2024;12(1). URL: https://moitvivt.ru/ru/journal/pdf?id=1514 DOI: 10.26102/2310-6018/2024.44.1.016

Adaptive quantile regression

A.S. Tyurin✉

Lipetsk State Technical University, Lipetsk, the Russian Federation

Abstract. The relevance of the research is due to the growing need for fast and accurate tools for building mathematical models. This paper discusses approaches to building adaptive quantile regression because selecting the optimal quantile during the training process can save a large amount of researcher's time. The correct choice of quantile can significantly improve the performance of the model on test datasets and, as a consequence, obtain more reliable predictions when such a mathematical model is actually used. The developed approach is a combination of modified quantile regression and gradient descent, which improves the adaptation of the model to different data. A detailed description of the developed algorithm is given. The paper also presents a comparison of the performance accuracy of the proposed model with traditional quantile regression and gradient descent along with their combinations. It also analyzes the training time of the models, including the number of training epochs. Experiments show that adaptive quantile regression exhibits improved accuracy with reduced training time. The results emphasize the effectiveness of this method in data analysis and prediction, opening new perspectives for more efficient and faster machine learning models.

Keywords: quantile regression, adaptive algorithm, gradient descent, mathematical modeling, numerical methods.

For citation: Tyurin A.S. Adaptive quantile regression. *Modeling, Optimization and Information Technology*. 2024;12(1). URL: https://moitvivt.ru/ru/journal/pdf?id=1514 DOI: 10.26102/2310-6018/2024.44.1.016 (In Russ.).

Введение

Общей целью данного исследования является разработка метода построения адаптивной квантильной регрессии, отличающегося динамическим подбором оптимального значения квантиля, что позволяет сократить время обучения модели. Квантильная регрессия, представляющая собой современный и эффективный аналитический инструмент, играет ключевую роль в исследовании сложных данных, особенно в контексте изучения зависимости между целевой переменной и различными предикторами. Этот метод позволяет не только глубже понять природу этих зависимостей, но и обладает потенциалом для достижения более высокой точности прогнозирования по сравнению с традиционными методами регрессии. Одним из ключевых аспектов эффективности квантильной регрессии является выбор подходящего квантиля, который может существенно повлиять на точность модели, особенно в ситуациях, когда исходные данные характеризуются сложным распределением.

Вместо традиционного ручного выбора квантиля, было бы разумно использовать методы машинного обучения и статистические алгоритмы для автоматизированного определения оптимального квантиля, чтобы обеспечить более высокую точность и адаптивность моделей. Выбор уровня квантиля важен, так как он влияет на результаты модели на тестовом наборе данных. Таким образом, задача оптимального выбора уровня квантиля является актуальной в математическом моделировании.

В этом контексте, исследования, такие как представленные в работе [1], предлагают новые подходы, например, включение дополнительных компонентов в функцию ошибки L1 [2], что способствует более точному и последовательному определению квантилей в широком диапазоне. Альтернативные методы, изложенные в работах [3-5], предлагают использовать симплекс-метод, алгоритмы внутренней точки и различные сглаживающие процедуры для заблаговременного определения оптимального квантиля, что может значительно повысить эффективность и точность моделирования.

Разработка алгоритма

Квантильная регрессия – это метод анализа зависимости между непрерывной зависимой переменной Y и одной или несколькими независимыми переменными X_1, X_2, ..., X_p, который позволяет оценить квантильные значения условного распределения Y при заданных значениях предикторов X, где p количество независимых переменных в наборе данных.

Для оценки квантильной регрессии используется следующий алгоритм:

1. Задание уровня квантиля $\tau \in (0,1)$. Этот параметр определяет, какое квантильное значение мы хотим оценить.

2. Минимизация функции потерь, которая представляет собой сумму абсолютных отклонений квантильных значений от фактических наблюдений:

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \rho_\tau \left(y_i - x_i^T \beta\right), \quad (1)$$

где n – количество наблюдений, y_i – фактическое наблюдение, x_i – вектор признаков для наблюдения i, а $\rho_\tau(\upsilon)$ – функция потерь, которая определена как:

$$\rho_\tau(u) = \begin{cases} \tau \cdot u, \text{ если } u \geq 0 \\ (1-\tau) \cdot u, \text{ если } u < 0 \end{cases} \quad (2)$$

3. Решение задачи минимизации для оценки параметров β.

4. Построение квантильной регрессионной функции:

$$Q_\tau(X) = X^T \hat{\beta}_\tau, \tag{3}$$

где $\hat{\beta}_\tau$ – оцененные параметры регрессии для заданного уровня квантиля τ.

Здесь обозначения имеют следующее значение:

– Y – зависимая переменная (наблюдаемая величина);

– $X_1, X_2, \ldots, X_n$ – независимые переменные (предикторы);

– τ – уровень квантиля (значение между 0 и 1);

– β – параметры регрессии, которые нужно оценить.

Дадим описание алгоритма построения квантильной регрессии с использованием метода градиентного спуска:

1. Задание уровня квантиля τ: начнем с выбора уровня квантиля τ, который определяет, какое квантильное значение условного распределения мы хотим оценить.

2. Инициализация параметров β : инициализируем параметры регрессии β случайными значениями или нулями.

3. Определение функции потерь: для данного уровня квантиля τ определяем функцию потерь $\rho_\tau(\upsilon)$.

4. Определение функции потерь для всей выборки: вычисляем функцию потерь $Q(\beta)$ для всей выборки, которая представляет собой сумму абсолютных отклонений квантильных значений от фактических наблюдений.

5. Обновление параметров с использованием градиентного спуска: используем метод градиентного спуска для обновления параметров β с целью минимизировать функцию потерь. Градиент функции потерь вычисляется по формуле:

$$\nabla Q(\beta) = -\sum_{i=1}^{n} \acute{\rho}_\tau \left(y_i - x_i^T \beta\right) \cdot x_i, \tag{4}$$

где $\acute{\rho}_\tau(u)$ – производная функции потерь $\rho_\tau(u)$.

Обновление параметров β выполняется с использованием следующей формулы:

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - \alpha \nabla Q(\beta^{(t)}), \tag{5}$$

где α – скорость обучения (learning rate), t – номер итерации.

6. Повторение шагов 4 и 5: продолжаем обновлять параметры β с использованием градиентного спуска до тех пор, пока не достигнем заданного критерия остановки, например, определенного числа итераций или пока изменение параметров становится незначительным.

7. Построение квантильной регрессионной функции: после завершения обучения получаем оцененные параметры β , которые позволяют построить квантильную регрессионную функцию по формуле 3.

Этот алгоритм позволяет оценить параметры квантильной регрессии с использованием метода градиентного спуска для минимизации функции потерь, а затем построить квантильную регрессионную функцию для заданного уровня квантиля τ. Далее модифицируем алгоритм таким образом, чтобы во время обучения модели происходила динамическая корректировка уровня квантиля на основе одной из целевых метрик – оценке MSE. Одним из основных показателей оптимальности выбора квантиля является медианное значение отклонений прогнозных значений и истинных. Данная метрика вычисляется по формуле:

$$MedE = median(y_i - \hat{y}_i). \tag{6}$$

Для модификации алгоритма воспользуемся предположением о том, что мы можем динамически изменять квантиль, и, как следствие, функцию ошибки при построении модели в алгоритме градиентного спуска. Изменение квантиля будет осуществляться на основании информации о смещении медианного значения ошибки относительно 0. Обновление квантиля будет производиться на шаге 5, сразу после вычисления параметров β.

На Рисунке 1 приведено распределение ошибки и показана медиана для случаев с уровнем квантиля 0,5 и 0,8. Как видно на иллюстрации, если квантиль завышен, то медиана будет смещена влево относительно 0. Таким образом, можно построить гипотезу о том, что оптимально подобранный квантиль будет иметь медианную ошибку в окрестности 0.

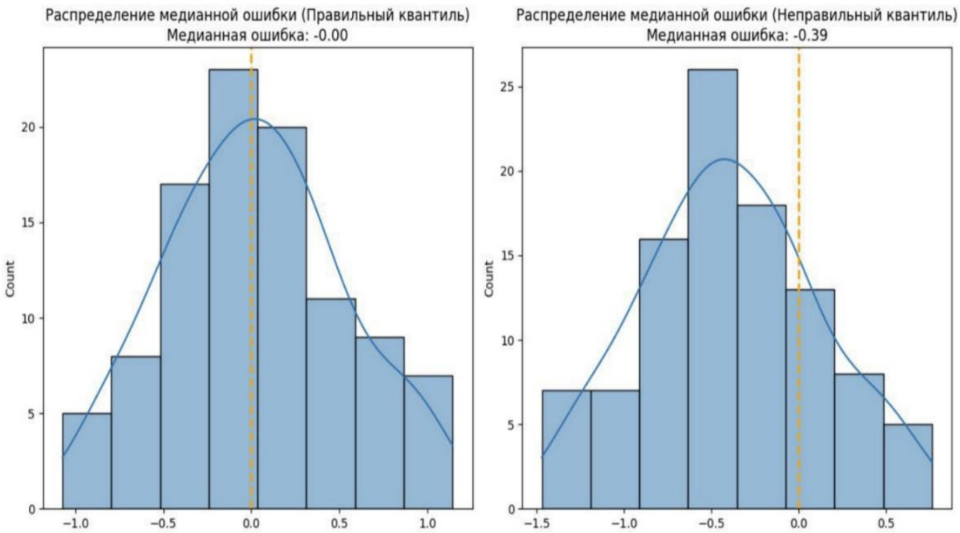

Рисунок 1 – Распределение ошибки для квантилей 0,5 и 0,8
Figure 1 – Error distribution for quantiles 0,5 and 0,8

Важно подчеркнуть, что коррекция квантиля представляет собой ключевой этап в оптимизации. Этот процесс возможен лишь после накопления достаточного количества итераций, либо когда обновления параметров модели становятся настолько малыми, что дальнейшее обучение не приводит к существенному улучшению. Основная причина этого заключается в том, что корректировка квантиля на начальных этапах итераций не является эффективной, так как в это время модель еще недостаточно хорошо адаптирована к данным и, как следствие, демонстрирует высокую степень ошибки. Как правило, порог изменения параметров в процессе градиентного спуска устанавливается через параметр скорости обучения (learning rate), а в рассматриваемом контексте, параметр β определяет уровень изменений параметров модели, при котором становится возможной коррекция уровня квантиля.

Кроме того, необходимо учитывать, что оптимальный уровень квантиля во многом зависит от общего качества и точности самой модели. Если рассмотреть процесс обучения модели с использованием метода градиентного спуска с различным числом итераций, можно заметить значительные различия в точности моделей. Эти различия будут особенно заметны, если сравнивать модели с одинаковым уровнем квантиля, но обученные с разным количеством итераций. На примере графика (Рисунок 2) можно увидеть, как изменяется оптимальный уровень квантиля в зависимости от количества итераций обучения модели. Отсюда следует, что при сравнении эффективности различных подходов и методик важно использовать одно и то же количество итераций для обучения, чтобы обеспечить корректность и объективность сравнения.

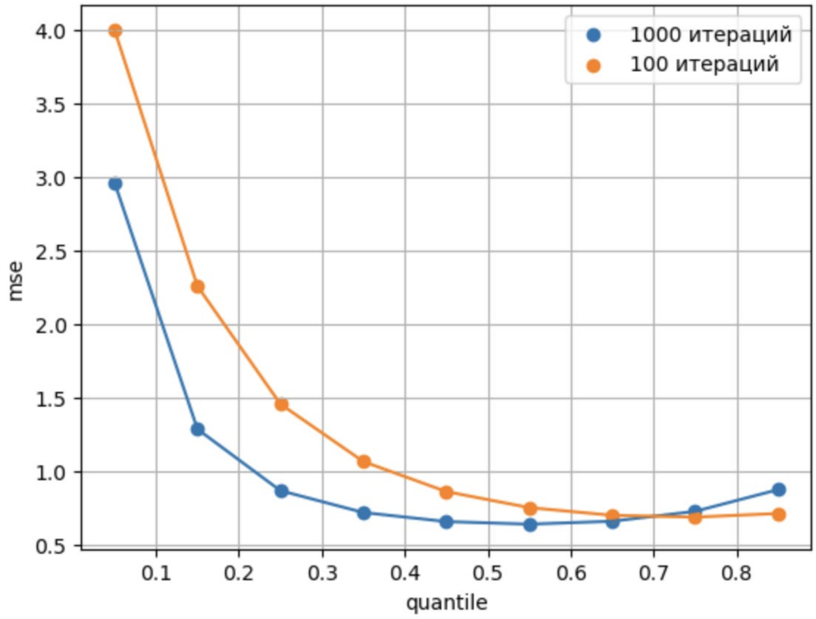

Рисунок 2 – Точности модели в зависимости от квантиля и количества итераций
Figure 2 – Model accuracy depending on quantile and number of iterations

Сравнение методов

Для сравнение предложенного метода с классической реализацией квантильной регрессии и градиентным спуском был взят набор данных California house prices из библиотеки sklearn. Также для моделирования набора данных с нестандартным видом распределения сгенерирован синтетический набор данных. Для генерации использованы случайные значения Y в диапазоне от 0 до 1, после чего к данным добавлен случайный шум. В качестве зависимости использовано уравнение вида:

$$Y = 2X_1 + X_2^2 \cdot noise, \tag{7}$$

где noise – значение Гауссовского шума, а X_1 и X_2 – независимые переменные. Для всех значений квантиля порядка 0,85 добавлено дополнительное масштабирование данных путем умножения значений на константу 100, чтобы смоделировать перевес значений с одного из концов распределения целевой переменной.

В качестве метрик сравнения используем R2 и MSE с реализацией из библиотеки машинного обучения sklearn. Для проверки времени и количества шагов сходимости была разработана собственная реализация градиентного спуска с квантильной регрессией. В случае применения градиентного спуска без динамического изменения квантиля подбор оптимального уровня квантиля осуществляется полным перебором с шагом в 0,05 от 0,05 до 0,95. Для замера времени выполнения кода используется стандартная библиотека time в Python. Все замеры проводились 100 раз и усреднялись во избежание влияния непредвиденных факторов – случайной загрузки центрального процессора и оперативной памяти сторонними задачами.

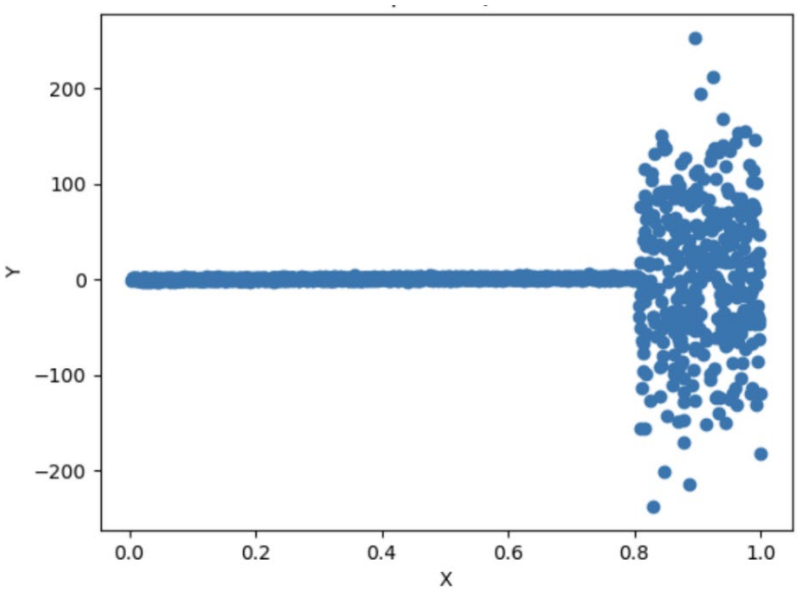

Рисунок 3 – Диаграмма рассеяния независимой переменной для синтетического набора данных
Figure 3 – Scatterplot of the independent variable for a synthetic data set

В качестве обучающей и тестовой выборки исходный набор данных разделен в соотношении 80 % и 20 %. Результаты проведения вычислительных экспериментов приведены в Таблице 1.

Таблица 1 – Сравнение методов по скорости сходимости и точности
Table 1 – Comparison of methods in terms of convergence speed and accuracy

	Собственная реализация	Quantile regression	Quantile regression + градиентный спуск (полный перебор квантилей)
R2	0,87	0,81	0,84
MSE	0,567	0,76	0,576
Время сходимости, сек	2	0,1	15,9
Время сходимости, кол-во эпох	1000	-	1000

Как видно из таблицы, предложенный метод быстрее классической реализации по временным затратам и превосходит его по точности, так как позволяет изменять уровень квантиля на достаточно малое значение. В случае равного шага изменения квантиля для классической реализации потребовало бы еще больше времени, чтобы проверить все варианты.

Таблица 2 – Сравнение методов по скорости сходимости и точности
Table 2 – Comparison of methods in terms of convergence speed and accuracy

	Собственная реализация	Quantile regression	Quantile regression + градиентный спуск (полный перебор квантилей)
R2	0,87	0,81	0,84
MSE	0,567	0,76	0,576
Время сходимости, сек	2	0,1	15,9
Время сходимости, кол-во эпох	1000	-	1000

Заключение

В заключении стоит особо подчеркнуть, что, несмотря на демонстрируемый практический потенциал и обоснованность использования предложенного подхода в решении реальных задач, остаются важные аспекты, требующие дальнейшего изучения и уточнения. Одним из ключевых направлений для будущих исследований является повышение точности этого подхода, особенно в сценариях, где распределение целевой переменной отличается от стандартных моделей и характеризуется, например, наличием «тяжелых хвостов». Этот аспект уже упоминался в ряде научных работ [6-9], но требует более глубокого анализа и разработки новых методик для адаптации предложенного подхода к таким специфическим условиям.

Более того, результаты, представленные в данной работе, открывают перспективы для дальнейшего развития и совершенствования подходов в этой области. В частности, разработанный нами подход может быть успешно интегрирован с методами и результатами, представленными в исследовании [10], что позволит создать более эффективную и гибкую методику для построения адаптивной квантильной регрессии. Использование натурального градиентного спуска в этом контексте обещает значительное улучшение в адаптивности моделей к сложным распределениям исходных данных, что будет способствовать более точному моделированию и прогнозированию в различных прикладных областях.

Таким образом, несмотря на достигнутый прогресс и убедительные результаты, работа подчеркивает необходимость и важность продолжения исследований в данной области с акцентом на улучшение методов обработки нестандартных распределений и интеграции с существующими моделями для достижения еще большей эффективности и точности в применении.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Zheng Qi, Limin Peng, Xuming He. Globally adaptive quantile regression with ultra-high dimensional data. *The Annals of Statistics.* 2015;43(5):2225–2258. DOI: 10.1214/15-AOS1340.
2. Barrodale I., Roberts F.D.K. An improved algorithm for discrete L_1 linear approximation. *SIAM Journal on Numerical Analysis.* 1973;10(5):839–848. DOI: 10.1137/0710069.
3. Chen C. An Adaptive Algorithm for Quantile Regression. In: *Theory and Applications of Recent Robust Methods by ICORS2003: International Conference on Robust Statistics – 2003, 13–18 July 2003, Antwerp, Belgium.* Basel: Springer Basel AG; 2004. p. 39–48.

4. Chen C. A finite smoothing algorithm for quantile regression. *Journal of Computational and Graphical Statistics.* 2007;16(1):136–164. DOI: 10.1198/106186007X180336.
5. Behl P., Claeskens G., Dette H. Focussed model selection in quantile regression. *Statistica Sinica.* 2014;24(2):601–624. DOI: 10.5705/ss.2012.097.
6. Wang K., Wang H.J. Optimally combined estimation for tail quantile regression. *Statistica Sinica.* 2016;26(1):295–311. DOI: 10.5705/ss.2014.051.
7. Zheng S. Gradient descent algorithms for quantile regression with smooth approximation. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics.* 2011;2:191–207. DOI: 10.1007/s13042-011-0031-2.
8. Li Y., Zhu J. L1-norm quantile regression. *Journal of Computational and Graphical Statistics.* 2008;17(1):1–23. DOI: 10.1198/106186008X289155.
9. Wang B., Hu T., Yin H. Quantile regression with Gaussian Kernels. *Contemporary Experimental Design, Multivariate Analysis and Data Mining.* 2020;373–386.
10. Тюрин А.С., Сараев П.В. Построение квантильной регрессии с использованием натурального градиентного спуска. *Прикладная математика и вопросы управления.* 2023;(2):43–52.

REFERENCES

1. Zheng Qi, Limin Peng, Xuming He. Globally adaptive quantile regression with ultra-high dimensional data. *The Annals of Statistics.* 2015;43(5):2225–2258. DOI: 10.1214/15-AOS1340.
2. Barrodale I., Roberts F.D.K. An improved algorithm for discrete L_1 linear approximation. *SIAM Journal on Numerical Analysis.* 1973;10(5):839–848. DOI: 10.1137/0710069.
3. Chen C. An Adaptive Algorithm for Quantile Regression. In: *Theory and Applications of Recent Robust Methods by ICORS2003: International Conference on Robust Statistics – 2003, 13–18 July 2003, Antwerp, Belgium.* Basel: Springer Basel AG; 2004. p. 39–48.
4. Chen C. A Finite Smoothing Algorithm for Quantile Regression. *Journal of Computational and Graphical Statistics.* 2007;16(1):136–164. DOI: 10.1198/106186007X180336.
5. Behl P., Claeskens G., Dette H. Focused model selection in quantile regression. *Statistica Sinica.* 2014;24(2):601–624. DOI: 10.5705/ss.2012.097.
6. Wang K., Wang H.J. Optimally combined estimation for tail quantile regression. *Statistica Sinica.* 2016;26(1):295–311. DOI: 10.5705/ss.2014.051.
7. Zheng S. Gradient descent algorithms for quantile regression with smooth approximation. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics.* 2011;2:191–207. DOI: 10.1007/s13042-011-0031-2.
8. Li Y., Zhu J. L1-norm quantile regression. *Journal of Computational and Graphical Statistics.* 2008;17(1):1–23. DOI: 10.1198/106186008X289155.
9. Wang B., Hu T., Yin H. Quantile regression with Gaussian Kernels. *Contemporary Experimental Design, Multivariate Analysis and Data Mining.* 2020;373–386.
10. Tyurin A.S., Saraev P.V. Construction of quantile regression using natural gradient descent. *Prikladnaya matematika i voprosy upravleniya = Applied Mathematics and Control Sciences.* 2023;(2):43–52. (In Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ / INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Тюрин Алексей Сергеевич, доцент, кафедра Автоматизированных систем управления Липецкого государственного технического университета, Липецк, Российская Федерация.
e-mail: leha2148@gmail.com

Aleksey S. Tyurin, Associate Professor, Department of Automated Control Systems, Lipetsk State Technical University, Lipetsk, the Russian Federation.

ORCID: 0009-0000-1313-5826

Статья поступила в редакцию 04.02.2024; одобрена после рецензирования 19.02.2024; принята к публикации 26.02.2024.

The article was submitted 04.02.2024; approved after reviewing 19.02.2024; accepted for publication 26.02.2024.