# Прикладная статистика 7. Регрессионный анализ.

1 апреля 2013 г.

# Постановка задачи линейной регрессии

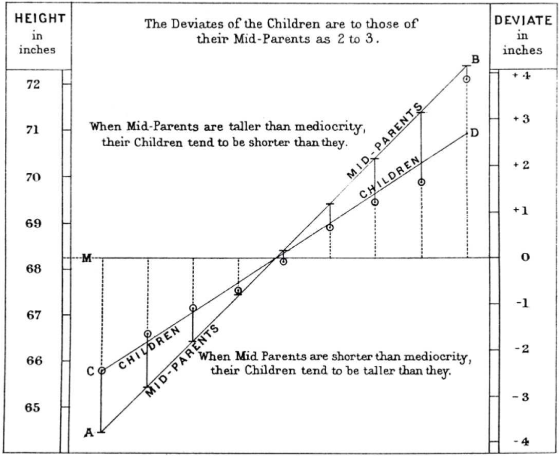
$x_1, \dots, x_n$ — объекты;
$f_1, \dots, f_k, y$ — признаки, значения которых измеряются на объектах;
$f_1, \dots, f_k$ — объясняющие переменные, предикторы, регрессоры, факторы, признаки;
$y$ — зависимая переменная, отклик.

$y \approx F(f_1, \dots, f_k)$ — модель регрессии;
$y \approx \sum\limits_{j=1}^{k} \theta_j f_j$ — модель линейной регрессии.

Здесь и далее $n > k$ (или даже $n \gg k$).

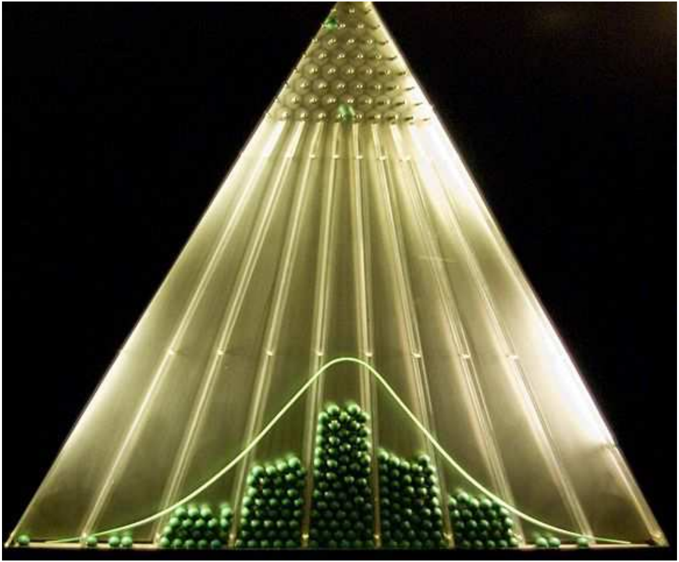
# Первое появление

Впервые такая постановка появляется в работе Гальтона 1885 г. «Регрессия к середине в наследственности роста».




$$y - \bar{y} \approx \frac{2}{3}\left(x - \bar{x}\right).$$

# Машина Гальтона



# МНК

Матричные обозначения:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix}; \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}; \qquad \theta = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_k \end{pmatrix}.$$

Метод наименьших квадратов:

$$\sum_{i=1}^{n} \left( y_i - \sum_{j=1}^{k} \theta_j x_{ij} \right)^2 \to \min_{\theta_1, \dots, \theta_k};$$

$$\|y - X\theta\| \to \min_{\theta};$$

$$2X^T (y - X\theta) = 0;$$

$$\hat{\theta} = \left( X^T X \right)^{-1} X^T y = X^+ y.$$

## Сингулярное разложение

$$\underset{n\times k}{X} = \underset{n\times k}{V} \cdot \underset{k\times k}{D} \cdot \underset{k\times k}{U}^{T}$$

1. $V = (v_1, \dots, v_k)$ — собственные векторы $\underset{n\times n}{XX^T}$; $V^TV = I_k$;
2. $U = (u_1, \dots, u_k)$ — собственные векторы $\underset{k\times k}{X^TX}$; $U^TU = I_k$;
3. $D = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sqrt{\lambda_k} \end{pmatrix}$, $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ — собственные значения $X^TX$ и $XX^T$;
4. $V = XUD^{-1}$ (достаточно найти только $U$);

# Сингулярное разложение

$$\underset{n\times k}{X} = \underset{n\times k}{V} \cdot \underset{k\times k}{D} \cdot \underset{k\times k}{U}^T$$

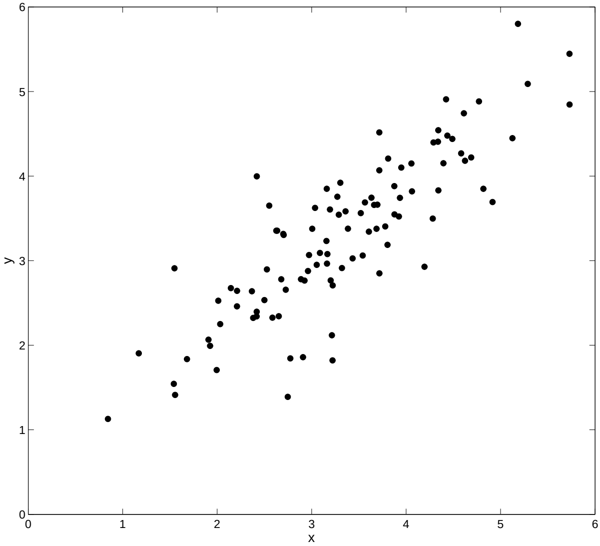
$$X^+ = UD^{-1}V = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j v_j^T, \qquad \left(X^T X\right)^{-1} = UD^{-2}U^T = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{\lambda_j} u_j u_j^T;$$

$$\hat{\theta} = X^+ y = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j v_j^T y, \qquad \hat{y} = X\hat{\theta}VV^T y = \sum_{j=1}^{k} v_j v_j^T y;$$

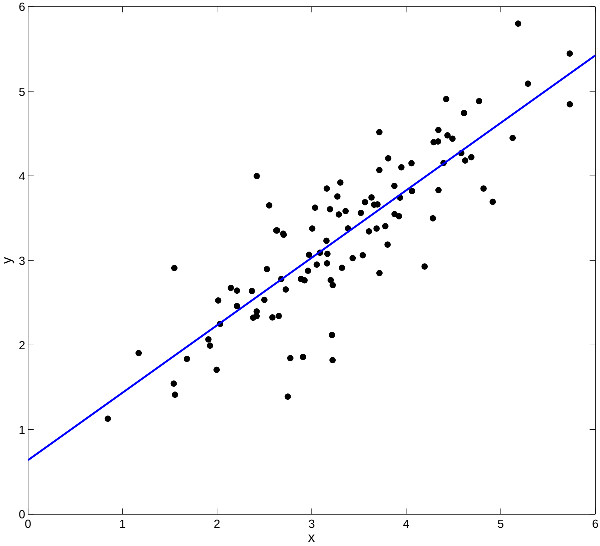
$$\|\theta\|^2 = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{\lambda_j} \left(v_j^T y\right)^2; \qquad \left\|y - X\hat{\theta}\right\|^2 \equiv RSS = y^T y - \sum_{j=1}^{k} v_j^T y.$$

Вывод: зная SVD, легко выписать МНК-решение задачи регрессии.

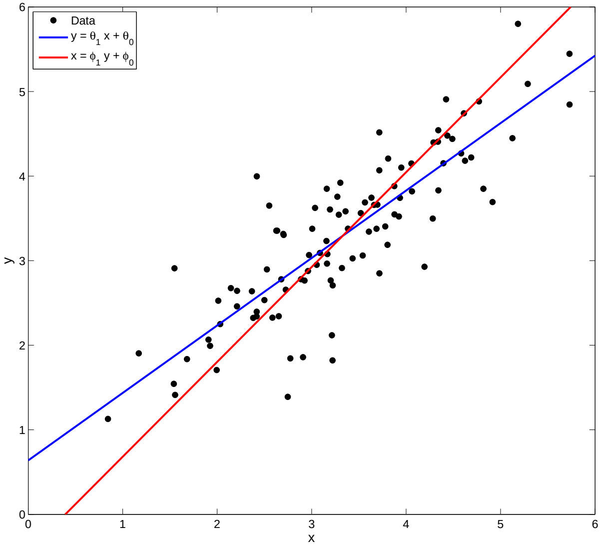
# Инверсия задачи регрессии



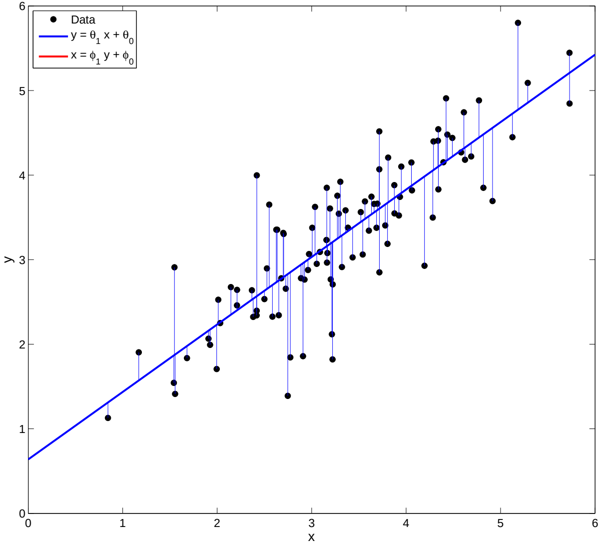
# Инверсия задачи регрессии



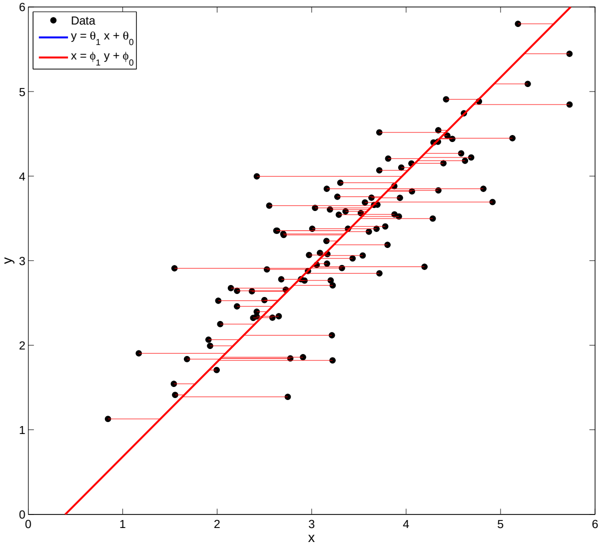
# Инверсия задачи регрессии



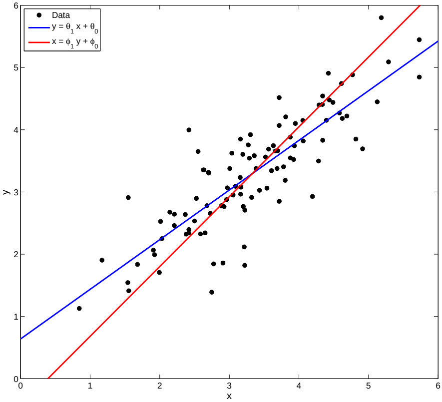
# Инверсия задачи регрессии



# Инверсия задачи регрессии



# Инверсия задачи регрессии




Косинус угла между прямыми, осуществляющими линейную МНК-регрессию $x$ на $y$ и $y$ на $x$, равен значению выборочного коэффициента корреляции между $x$ и $y$.

## Goodness-of-fit

$$TSS = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 \text{ (Total Sum of Squares);}$$

$$ESS = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \text{ (Explained Sum of Squares);}$$

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \text{ (Residual Sum of Squares);}$$

$$TSS = ESS + RSS.$$

Коэффициент детерминации:

$$R^2 = \frac{ESS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS}.$$

$R^2 = corr\,(y, \hat{y})^2\,.$

# Предположения модели

1. Линейность: $y = X\theta + \varepsilon$.
2. Случайность: имеется независимая выборка наблюдений $(x_i, y_i)\,, i = 1, \ldots, n$.
3. Полнота ранга: ни в популяции, ни в выборке ни один из признаков не является константой; кроме того, ни один из признаков не является линейной комбинацией других $(rank\, X = k)$.
4. Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(\varepsilon \middle| X\right) = 0$.

В предположениях (1-4) МНК-оценки коэффициентов $\theta$ являются несмещёнными:

$$\mathbb{E}\hat{\theta}_j = \theta_j, j = 1, \ldots, k$$

и состоятельными:

$$\forall \gamma > 0 \quad \lim_{n \to \infty} P\left(\left|\theta_j - \hat{\theta}_j\right| < \gamma\right) = 1, j = 1, \ldots, k.$$

# Предположения модели

1. Линейность: $y = X\theta + \varepsilon$.
2. Случайность: имеется независимая выборка наблюдений $(x_i, y_i)\,, i = 1, \ldots, n$.
3. Полнота ранга: ни в популяции, ни в выборке ни один из признаков не является константой; кроме того, ни один из признаков не является линейной комбинацией других $(rank\, X = k)$.
4. Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(\varepsilon | X\right) = 0$.
5. Гомоскедастичность ошибок: дисперсия ошибки не зависит от значений признаков: $\mathbb{D}\left(\varepsilon | X\right) = \sigma^2$.

(предположения Гаусса-Маркова).

Теорема Гаусса-Маркова: в предположениях (1-5) МНК-оценки имеют наименьшую дисперсию в классе оценок $\theta$, линейных по $y$.

# Дисперсия $\hat{\theta}_j$

В предположениях (1-5) дисперсии МНК-оценок коэффициентов $\theta$ задаются следующим образом:

$$\mathbb{D}\hat{\theta}_j = \frac{\sigma^2}{TSS_j\left(1 - R_j^2\right)},$$

где $TSS_j = \sum\limits_{i=1}^{n}\left(x_{ij} - \bar{x}_j\right)^2$, $R_j^2$ — коэффициент детерминации при регрессии $x_j$ на все остальные признаки из $X$.

- чем больше дисперсия ошибки $\sigma^2$, тем больше дисперсия оценки $\hat{\theta}_j$;
- чем больше вариация значений признака $x_j$ в выборке, тем меньше дисперсия оценки $\hat{\theta}_j$;
- чем лучше признак $x_j$ объясняется линейной комбинацией оставшихся признаков, тем больше дисперсия оценки $\hat{\theta}_j$.

$R_j^2 < 1$ по предположению (3); тем не менее, может быть $R_j^2 \approx 1$.

## Дисперсия $\hat{\theta}_j$

В матричном виде:

$$cov\,\hat{\theta} = \sigma^2 \left(X^T X\right)^{-1}.$$

Если столбцы $X$ почти линейно зависимы, то матрица $X^T X$ плохо обусловлена, и дисперсия оценок $\hat{\theta}_j$ растёт.

Близкая к линейной зависимость между двумя или более признаками $x_j$ называется **мультиколлинеарностью**.

# Неправильное определение модели

**Недоопределение:** если зависимая переменная определяется моделью

$$y = \theta_1 x_1 + \ldots + \theta_{j-1} x_{j-1} + \theta_j x_j + \theta_{j+1} x_{j+1} + \ldots + \theta_k x_k,$$

а мы вместо этого использовали модель

$$y = \theta_1 x_1 + \ldots + \theta_{j-1} x_{j-1} + \theta_{j+1} x_{j+1} + \ldots + \theta_k x_k,$$

то МНК-оценки $\hat{\theta}_1, \ldots, \hat{\theta}_{j-1}, \hat{\theta}_{j+1}, \ldots, \hat{\theta}_k$ являются смещёнными и несостоятельными оценками $\theta_1, \ldots, \theta_{j-1}, \theta_{j+1}, \ldots, \theta_k$.

**Переопределение:** если признак $x_j$ не влияет на $y$, т.е., $\theta_j = 0$, то МНК-оценка $\hat{\theta}$ остаётся несмещённой состоятельной оценкой $\theta$, но дисперсия её возрастает.

# Бинарные признаки

Если $x_j$ принимает только два значения, то они кодируются нулём и единицей. Например, если $x_j$ — пол испытуемого, то можно задать $x_j = [\text{пол} = \text{мужской}]$.

Механизм построения регрессии не меняется.

# Категориальные признаки

Как кодировать дискретные признаки $x_j$, принимающие более двух значений?

Пусть $y$ — средний уровень заработной платы, $x$ — тип должности; рассматриваются три типа: рабочий, инженер и управляющий. Допустим, мы закодировали эти должности следующим образом:

| Тип должности | $x$ |
|---|---|
| рабочий | 1 |
| инженер | 2 |
| управляющий | 3 |

и построили регрессию $y = \theta_0 + \theta_1 x$. Тогда для рабочего, инженера и управляющего ожидаемые средние уровни заработной платы определяются следующим образом:

$$y_{bc} = \theta_0 + \theta_1;$$
$$y_{pr} = \theta_0 + 2\theta_1;$$
$$y_{wc} = \theta_0 + 3\theta_1.$$

Согласно построенной модели, разница в средних уровнях заработной платы рабочего и инженера в точности равна разнице между зарплатами инженера и управляющего.

# Фиктивные переменные

Верный способ использования категориальных признаков в регрессии — введение бинарных фиктивных переменных (dummy variables).
Пусть признак $x_j$ принимает $m$ различных значений, тогда для его кодирования необходима $m-1$ фиктивная переменная.

Способы кодирования:

| | Dummy | | Deviation | |
|---|---|---|---|---|
| Тип должности | $x_1$ | $x_2$ | $x_1$ | $x_2$ |
| рабочий | 0 | 0 | 1 | 0 |
| инженер | 1 | 0 | 0 | 1 |
| управляющий | 0 | 1 | -1 | -1 |

$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$

- При dummy-кодировании коэффициенты $\theta_1, \theta_2$ оценивают среднюю разницу в уровнях зарплат инженера и управляющего с рабочим.
- При deviation-кодировании коэффициенты $\theta_1, \theta_2$ оценивают среднюю разницу в уровнях зарплат инженера и управляющего со средним по всем профессиям.

# Вопросы

1. Как найти доверительные интервалы для $\theta_j$?
2. Как проверить гипотезу $H_0\colon \theta_j = 0$?
3. Как найти доверительный интервал для значения отклика на новом объекте $y(x_0)$?
4. Адекватна ли построенная модель?

# Предположение нормальности ошибок

6. Нормальность ошибок: $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

- В предположениях (1-6) МНК-оценки совпадают с оценками максимального правдоподобия.

ММП:

$$p(\varepsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{\frac{1}{2\sigma^2}\varepsilon_i^2},$$

$$\ln \prod_{i=1}^{n} p(\varepsilon_i) \to \max_{\theta},$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left( -\ln\left(\sigma\sqrt{2\pi}\right) - \frac{1}{2\sigma^2}\varepsilon_i^2 \right) \to \max_{\theta},$$

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left( y_i - \sum_{j=1}^{k} \theta_j x_{ij} \right)^2 \to \min_{\theta}.$$

# Предположение нормальности ошибок

6. Нормальность ошибок: $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

- Эквивалентная запись предположения 6:

$$y|\,X \sim N\left(X\theta, \sigma^2\right).$$

- МНК-оценки $\hat{\theta}$ имеют наименьшую дисперсию среди всех несмещённых оценок $\theta$.
- МНК-оценки $\hat{\theta}$ имеют нормальное распределение $N\left(\theta, \sigma^2\left(X^TX\right)^{-1}\right)$.
- Несмещённой оценкой $\sigma^2$ является

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-k} RSS;$$

кроме того, $\frac{1}{\sigma^2} RSS \sim \chi^2_{n-k}$.

- $\forall c \in \mathbb{R}^k$

$$\frac{c^T\left(\theta - \hat{\theta}\right)}{\hat{\sigma}\sqrt{c^T\left(X^TX\right)^{-1}c}} \sim St(n-k).$$

# Доверительные интервалы

$100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для $\sigma$:

$$\sqrt{\frac{RSS}{\chi^2_{n-k,1-\alpha/2}}} \leq \sigma \leq \sqrt{\frac{RSS}{\chi^2_{n-k,\alpha/2}}}.$$

Возьмём $c = \left(0 \dots 0\underset{j}{1}0 \dots 0\right)$; $100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для $\theta_j$:

$$\hat{\theta}_j - t_{n-k,1-\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{(X^TX)^{-1}_{jj}} \leq \theta_j \leq \hat{\theta}_j + t_{n-k,\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{(X^TX)^{-1}_{jj}}.$$

Для нового объекта $x_0$ возьмём $c = x_0$; $100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для $y(x_0)$:

$$x_0^T\hat{\theta} - t_{n-k,1-\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{x_0^T\left(X^TX\right)^{-1}x_0} \leq y(x_0) \leq x_0^T\hat{\theta} + t_{n-k,1-\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{x_0^T\left(X^TX\right)^{-1}x_0}$$

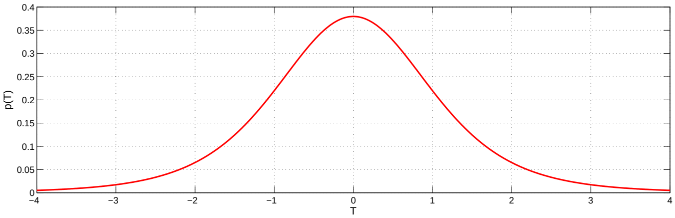
## t-критерий Стьюдента

нулевая гипотеза: $H_0: \theta_j = 0;$

альтернатива: $H_1: \theta_j <\neq> 0;$

статистика: $T = \dfrac{\hat{\theta}_j}{\frac{RSS}{n-k}\sqrt{\left(X^T X\right)^{-1}_{jj}}};$

$T \sim St(n-k)$ при $H_0;$




достигаемый уровень значимости:

$$p(t) = \begin{cases} 1 - tcdf\left(t, n-k\right), & H_1: \theta_j > 0, \\ tcdf\left(t, n-k\right), & H_1: \theta_j < 0, \\ 2 \cdot \left(1 - tcdf\left(|t|, n-k\right)\right), & H_1: \theta_j \neq 0. \end{cases}$$

# t-критерий Стьюдента

**Пример:** имеется 12 испытуемых, $x$ — результат прохождения испытуемым составного теста скорости реакции, $y$ — результат его теста на симулятора транспортного средства. Проведение составного теста значительно проще и требует меньших затрат, поэтому ставится задача предсказания $y$ по $x$, для чего строится линейная регрессия согласно модели

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \varepsilon.$$

Значима ли переменная $x$ для предсказания $y$?

$H_0 : \theta_1 = 0.$
$H_1 : \theta_1 \neq 0 \Rightarrow p = 2.2021 \times 10^{-5}.$

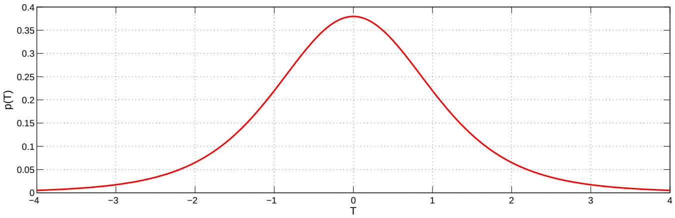
# t-критерий Стьюдента

нулевая гипотеза: $H_0\colon \theta_j = a;$

альтернатива: $H_1\colon \theta_j <\neq> a;$

статистика: $T = \dfrac{\hat\theta_j - a}{\frac{RSS}{n-k}\sqrt{\left(X^TX\right)^{-1}_{jj}}};$

$T \sim St(n-k)$ при $H_0;$




достигаемый уровень значимости:

$$p(t) = \begin{cases} 1 - tcdf\left(t, n-k\right), & H_1\colon \theta_j > a, \\ tcdf\left(t, n-k\right), & H_1\colon \theta_j < a, \\ 2\cdot\left(1 - tcdf\left(|t|, n-k\right)\right), & H_1\colon \theta_j \neq a. \end{cases}$$

# t-критерий Стьюдента

**Пример:** по выборке из 506 жилых районов, расположенных в пригородах Бостона, строится модель средней цены на жильё следующего вида:

$$\ln price = \theta_0 + \theta_1 \ln nox + \theta_2 \ln dist + \theta_3 rooms + \theta_4 stratio + \varepsilon,$$

где $nox$ — содержание в воздухе двуокиси азота, $dist$ — взвешенное среднее расстояние от жилого района до пяти основных мест трудоустройства, $rooms$ — среднее число комнат в доме жилого района, $stratio$ — среднее отношения числа студентов к числу учителей в школах района.

Коэффициент $\theta_1$ имеет смысл эластичности цены по признаку $nox$. По экономическим соображениям интерес представляет гипотеза о том, что эластичность равна -1.

$H_0\colon \theta_1 = -1$ .
$H_1\colon \theta_1 \neq -1 \Rightarrow p = 0.6945.$

# Критерий Фишера

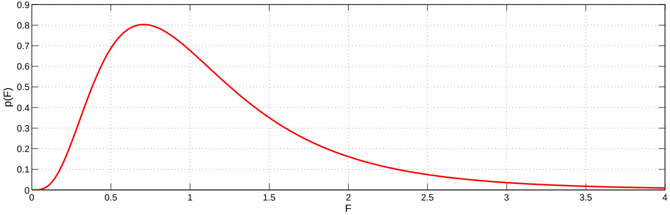
$$\underset{n\times k}{X} = \left(\underset{n\times k_1}{X_1} \quad \underset{n\times(k-k_1)}{X_2}\right), \quad \underset{k\times 1}{\theta^T} = \left(\underset{k_1\times 1}{\theta_1^T} \quad \underset{(k-k_1)\times 1}{\theta_2^T}\right)^T;$$

нулевая гипотеза: $H_0: \theta_2 = 0;$

альтернатива: $H_1: H_0$ неверна;

статистика: $F = \dfrac{\frac{1}{k-k_1}\left\|X\hat{\theta} - X_1\hat{\theta}_1\right\|^2}{\frac{1}{n-k}\left\|y - X\hat{\theta}\right\|^2};$

$F \sim F(k-k_1, n-k)$ при $H_0$;




достигаемый уровень значимости:

$$p(t) = 1 - fcdf\left(f, k-k_1, n-k\right).$$

# Критерий Фишера

**Пример:** для веса ребёнка при рождении имеется следующая модель:

$$weight = \theta_0 + \theta_1 cigs + \theta_2 parity + \theta_3 inc + \theta_4 med + \theta_5 fed + \varepsilon,$$

где $cigs$ — среднее число сигарет, выкуривавшихся матерью за один день беременности, $parity$ — номер ребёнка у матери, $inc$ — среднемесячный доход семьи, $med$ — длительность в годах получения образования матерью, $fed$ — отцом.
Данные имеются для 1191 детей.
Зависит ли вес ребёнка при рождении от уровня образования родителей?

$H_0: \theta_4 = \theta_5 = 0.$
$H_1: H_0$ неверна $\Rightarrow p = 0.2421.$

# Связь между критериями Фишера и Стьюдента

Если $k_1 = 1$, критерий Фишера даёт тот же достигаемый уровень значимости, что и критерий Стьюдента для соответствующей двусторонней альтернативы.

Возможны ситуации, когда критерий Фишера отвергает гипотезу о незначимости признаков $X_2$, но ни один из них не признаётся значимым критерием Стьюдента. Возможные объяснения:

- отдельные признаки из $X_2$ недостаточно хорошо объясняют $y$, но совокупный эффект значим;
- признаки $X_2$ мультиколлинеарны.

Возможны ситуации, когда, несмотря на то, что некоторые из признаков в $X_2$ признаются значимыми критерием Стьюдента, критерий Фишера не отвергает гипотезу о незначимости $X_2$. Возможные объяснения:

- незначимые признаки в $X_2$ маскируют влияние значимых;
- значимость отдельных признаков из $X_2$ — результат эффекта множественной проверки гипотез.

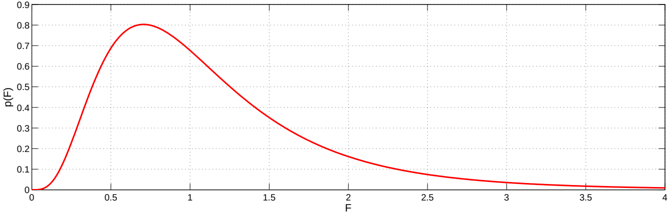
# Критерий Фишера

нулевая гипотеза: $H_0\colon \theta_1 = \ldots = \theta_k = 0;$

альтернатива: $H_1\colon H_0$ неверна;

статистика: $F = \frac{R^2/(k-1)}{\left(1-R^2\right)/(n-k)};$

$F \sim F\left(k-1, n-k\right)$ при $H_0;$




достигаемый уровень значимости:

$$p\left(t\right) = 1 - fcdf\left(f, k-1, n-k\right).$$

# Критерий Фишера

**Пример:** имеет ли вообще смысл модель веса ребёнка при рождении, рассмотренная выше?

$H_0: \theta_1 = \ldots = \theta_5 = 0.$
$H_1: H_0$ неверна $\Rightarrow p = 6.0331 \times 10^{-9}.$

# Отбор признаков и категориальные переменные

Запрещено включать в модель только часть фиктивных переменных, кодирующих один категориальный признак.

Не имеет смысл отдельно проверять значимость фиктивных переменных, кодирующих один и тот же категориальный признак — представляет интерес только их совместная значимость.

# Приведённый коэффициент детерминации

Стандартный коэффициент детерминации всегда увеличивается при добавлении регрессоров в модель, поэтому для отбора признаков его использовать нельзя.

Для сравнения моделей, содержащих разное число признаков, можно использовать приведённый коэффициент детерминации:

$$R_a^2 = \frac{ESS/\left(n-k\right)}{TSS/\left(n-1\right)} = 1 - \left(1 - R^2\right)\frac{n-1}{n-k}.$$

# Пошаговая регрессия

- **Шаг 0.** Настраивается модель с одной только константой, а также все модели с одной переменной. Рассчитывается $F$-статистика каждой модели и достигаемый уровень значимости. Выбирается модель с наименьшим достигаемым уровнем значимости. Соответствующая переменная $X_{e_1}$ включается в модель, если этот достигаемый уровень значимости меньше порогового значения $p_E = 0.05$.
- **Шаг 1.** Рассчитывается $F$-статистика и достигаемый уровень значимости для всех моделей, содержащих две переменные, одна из которых $X_{e_1}$. Аналогично принимается решение о включении $X_{e_2}$.
- **Шаг 2.** Если была добавлена переменная $X_{e_2}$, возможно, $X_{e_1}$ уже не нужна. В общем случае просчитываются все возможные варианты исключения одной переменной, рассматривается вариант с наибольшим достигаемым уровнем значимости, соответствующая переменная исключается, если он превосходит пороговое значение $p_R = 0.1$.
- ...

# Эксперимент Фридмана

David A. Freedman, A Note on Screening Regression Equations. The American Statistician, Vol. 37, No. 2 (May, 1983), pp. 152-155.

Как избежать построения переобученных моделей?

- Требовать $n \gg k$.
- Использовать кросс-валидацию.

Прикладная статистика
7. Регрессионный анализ.

Рябенко Евгений
riabenko.e@gmail.com