

# **01RAD**

doc. Ing. Tomáš Hobza, Ph.D., Martin Kovanda, Michaela Mašková, Filip Bár

1. října 2020

# Obsah

<b>1</b>	<b>SME – regresní analýza</b>	<b>1</b>
1.1	Jednorozměrná lineární regrese . . . . .	1
1.2	Intervaly predikce . . . . .	5
1.3	Vícerozměrná lineární regrese . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Jednorozměrná lineární regrese</b>	<b>9</b>
2.1	Data s předpokladem normality dat . . . . .	10
2.2	Data bez předpokladu normality . . . . .	11
2.3	Vlastnosti odhadů . . . . .	13
2.4	Gauss - Markov theorem . . . . .	16
2.5	IS pro $\beta_0, \beta_1$ . . . . .	18
2.6	TH pro $\beta_0, \beta_1$ . . . . .	19
	2.6.1 Test významnosti interceptu . . . . .	19
2.7	ANOVA přístup pro testování . . . . .	20

# Předmluva

Materiál byl sestaven na základě poznámek doc. Ing. Tomáše Hobzy, Ph.D., kterému bychom tímto chtěli poděkovat za rozsáhlou korekci vzniklého materiálu. Zmíněné přednášky proběhly v zimním semestru akademického roku 2020/2021 na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT v Praze. Přednášky nebyly uskutečněny prezenční formou vzhledem k probíhající pandemii Covid-19.

Tento učební text je určen posluchačům 1. ročníku navazujícího magisterského studia navštěvujícím kurs 01RAD *Regresní analýza dat*, který je zařazen mezi předměty oborů AMSM. Při sestavování textu se předpokládaly znalosti základů matematiky na úrovni absolvování kurzů 01MAB2-4, 01LAB1-2 a 01MIP.

## Doporučená literatura:

(1) ...

# 1 SME – regresní analýza

## 1.1 Jednorozměrná lineární regrese

Předpokládejme, že se sledují dvě fyzikální veličiny  $X$  a  $Y$  mezi kterými existuje lineární závislost

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X.$$

$\beta_0$  a  $\beta_1$  nejsou známy, a proto se provádí experiment, při němž se zjišťují hodnoty dvojic  $(X, Y)$ . Často se stává, že měření hodnot  $X$  probíhá prakticky zcela přesně (například  $X$  se nastavuje na předem dané úrovni), zatímco  $Y$  se měří s určitou chybou. Zavádí se tedy model

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + e_i \quad \forall i = 1, \dots, n,$$

kde  $e_i$  je náhodný šum a  $e_1, \dots, e_n$  jsou *iid*  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$  a dvojice  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  získáme měřením. Neznáme parametry jsou  $\beta_0, \beta_1, \sigma^2$ , chtěli bychom je odhadnout na základě výběru (MLE odhady).

Rozdělení  $Y_i$  je  $Y_i \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$ , a tedy věrohodnostní funkce výběru  $y_1, \dots, y_n$  je

$$L = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^n e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2}.$$

$$l = \ln L = -\frac{n}{2} \ln 2\pi - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2.$$

Je zřejmé, že pro libovolné  $\sigma^2$  potřebujeme minimalizovat

$$S(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

přes  $\beta_0, \beta_1$ , na což použijeme metodu nejmenších čtverců (poznámka?).

$$\frac{\partial l}{\partial \beta_0} = 2 \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0,$$

$$\frac{\partial l}{\partial \beta_1} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) x_i = 0.$$

Z toho pak

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n Y_i - n\beta_0 - \beta_1 \sum_{i=1}^n x_i &= 0, \\ \beta_0 &= \bar{Y}_n - \beta_1 \bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i - \beta_1 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \end{aligned}$$

## 1 SME – regresní analýza

Po vynásobení poslední rovnice  $n$  úpravou dostaneme vztah

$$\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y}_n + \beta_1 \bar{x}_n - \beta_1 x_i) x_i = 0$$

a následně i vztah

$$\sum_{i=1}^n Y_i x_i - \bar{Y}_n \sum_{i=1}^n x_i + \beta_1 \bar{x}_n \sum_{i=1}^n x_i - \beta_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0.$$

Z toho už následně vyjádříme

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i Y_i - n \bar{Y}_n \bar{x}_n}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n \bar{x}_n^2} \quad \text{a} \quad \hat{\beta}_0 = \bar{Y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{x}_n.$$

Nyní již spočítáme logaritmicke věrohodnostní funkci

$$\frac{\partial l}{\partial (\sigma^2)} = -\frac{n}{2} \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{2(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 = 0,$$

odkud

$$\hat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)^2.$$

Pokud dále označíme

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i,$$

pak rozdíl

$$r_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

nazýváme **rezidua** (která by měla mít normální rozdělení, aby byly splněny předpoklady modelu) a

$$\sum_{i=1}^n r_i^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)^2 = S_e$$

nazveme **reziduální součet čtverců**.

### $R^2$ statistika

Tuto statistiku definujeme vztahem

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n r_i^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y}_n)^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y}_n)^2},$$

který se dá chápat jako podíl součtu reziduálních čtverců a rozptylu  $Y$ .  $R^2$  se interpretuje jako poměr variability v datech vysvětlené lineárním modelem. Čím větší je  $R^2$ , tím lépe vysvětluje náš model data, v ideálním případě pak  $R^2 = 1$ . Dále bychom chtěli:

1. sestavit IS pro parametry modelu  $\beta_0, \beta_1, \sigma^2$ ,
2. intervaly pro predikci hodnoty  $y$  v daném bodě  $x$  a

## 1 SME – regresní analýza

3. testovat hypotézy na parametrech modelu, například F-stat. v MATLABu testuje  $H_0 : \beta_0 = 0$  a  $\beta_1 = 0$ , že vysvětlující proměnná  $y$  není korelovaná s vysvětlovanou proměnnou  $x$ .

Vše je podobné testům o parametrech  $N(\mu, \sigma^2)$  (t-test, F-test), potřebujeme rozdělení odhadů  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\sigma}^2$ . Sdružené rozdělení  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$  se najde snadno, protože to jsou lineární funkce  $Y_i$  takže budou mít normální rozdělení, stačí tedy určit střední hodnoty, rozptyly, kovariance,... Označme výběrový rozptyl  $x$  jako

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \bar{x}_n^2.$$

Platí, že

1.

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_1 &\sim \mathcal{N}\left(\beta_1, \frac{\sigma^2}{n\sigma_x^2}\right), \\ \hat{\beta}_0 &\sim \mathcal{N}\left(\beta_0, \sigma^2\left(\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x}_n)^2}{n\sigma_x^2}\right)\right) = \mathcal{N}\left(\beta_0, \frac{\sigma^2}{n\sigma_x^2} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2\right), \\ \text{Cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= -\frac{\bar{x}_n \sigma^2}{n\sigma_x^2},\end{aligned}$$

2.  $\hat{\sigma}^2$  je nezávislé na  $\hat{\beta}_0$  a  $\hat{\beta}_1$ ,

3.

$$\frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2).$$

POZNÁMKA 1.1. První bod znamená, že  $(\beta_0, \beta_1) \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ , kde

$$\mu = (\beta_0, \beta_1) \quad \text{a} \quad \Sigma = \frac{\sigma^2}{n\sigma_x^2} \begin{pmatrix} \bar{x}_n^2 & -\bar{x}_n \\ -\bar{x}_n & 1 \end{pmatrix}.$$

Konfidenční intervaly

1.  $\sigma^2$ , a protože  $\frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2)$ , víme, že s pravděpodobností  $\mathbb{P} = 1 - \alpha$  bude

$$\chi_{\frac{\alpha}{2}}^2(n-2) \leq \frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \leq \chi_{1-\frac{\alpha}{2}}^2(n-2),$$

a tedy  $(1 - \alpha)\%$  IS (interval spolehlivosti) pro  $\sigma^2$  je

$$\frac{n\hat{\sigma}^2}{\chi_{1-\frac{\alpha}{2}}^2(n-2)} \leq \sigma^2 \leq \frac{n\hat{\sigma}^2}{\chi_{\frac{\alpha}{2}}^2(n-2)}.$$

## 1 SME – regresní analýza

2.  $\beta_1$

Veličiny  $\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{n\sigma_x^2}}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$  a  $\frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2)$  jsou nezávislé. Z toho vyplývá, že

$$\frac{(\hat{\beta}_1 - \beta_1) / \sqrt{\frac{\sigma^2}{n\sigma_x^2}}}{\sqrt{\frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \frac{1}{n-2}}} \sim t(n-2).$$

Z toho potom

$$\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{(n-2)\sigma_x^2}}} = (\hat{\beta}_1 - \beta_1) \sqrt{\frac{(n-2)\sigma_x^2}{\hat{\sigma}^2}} \sim t(n-2), \quad (1.1)$$

což znamená, že

$$-t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \leq (\hat{\beta}_1 - \beta_1) \sqrt{\frac{(n-2)\sigma_x^2}{\hat{\sigma}^2}} \leq t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2)$$

s pravděpodobností  $\mathbb{P} = 1 - \alpha$ , a tedy

$$\hat{\beta}_1 - t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{(n-2)\sigma_x^2}} \leq \beta_1 \leq \hat{\beta}_1 + t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{(n-2)\sigma_x^2}}$$

je 100(1 -  $\alpha$ )% IS pro  $\beta_1$ . Podobně pro  $\beta_0$  dostaneme, že

$$\frac{\hat{\beta}_0 - \beta_0}{\sqrt{\sigma^2(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{\sigma_x^2})}} \frac{1}{\sqrt{\frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \frac{1}{n-2}}} \sim t(n-2),$$

$$\frac{\hat{\beta}_0 - \beta_0}{\sqrt{(1 + \frac{\bar{x}_n^2}{\sigma_x^2})\hat{\sigma}^2 \frac{1}{n-2}}} \sim t(n-2), \quad (1.2)$$

a tedy

$$\hat{\beta}_0 - t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{(1 + \frac{\bar{x}_n^2}{\sigma_x^2})\hat{\sigma}^2 \frac{1}{n-2}} \leq \beta_0 \leq \hat{\beta}_0 + t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{(1 + \frac{\bar{x}_n^2}{\sigma_x^2})\hat{\sigma}^2 \frac{1}{n-2}}$$

je 100(1 -  $\alpha$ )% IS pro  $\beta_0$ .

Statistiky (1.1) a (1.2) se dají použít i pro konstrukci testů například  $H_0 : \beta_1 = 0$ . Za platnosti  $H_0$  totiž

$$T_1 = \hat{\beta}_1 \sqrt{\frac{(n-2)\sigma_x^2}{\hat{\sigma}^2}} \sim t(n-2),$$

a tedy  $H_0$  zamítáme, pokud

$$|T_1| > t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2).$$

TEST:  $H_0$  zamítáme, pokud  $|T_1| > t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2)$ .

PŘÍKLAD 1.2 (Měření rychlosti zvuku v závislosti na teplotě).

teplota	-20	0	20	50	100
rychlost (m/s)	323	327	340	364	386

$$\overline{X_n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = 30, \quad \overline{Y_n} = 348, \quad \sum_{i=1}^n X_i Y_i = 57140, \quad \sum_{i=1}^n X_i^2 = 13300,$$

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2 - \overline{X_n}^2 = \frac{1}{5} 13300 - 900 = 1760,$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n X_i Y_i - 5 \overline{x_n} \overline{Y_n}}{\sum_{i=1}^n X_i^2 - 5 \overline{X_n}^2} = 0.561,$$

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y_n} - \hat{\beta}_1 \overline{x_n} = 331.16,$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X_i)^2 = 11.37 \text{ a nestranný}$$

$$s^2 = \frac{1}{5-2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X_i)^2 = 18.95.$$

Spočítáme IS například pro  $\beta_1$ . Dostaneme tedy  $t_{0.975}(5-2) = 3.18$ , který dosadíme do vzorečku na výpočet IS pro  $\beta_1$ , kde  $\beta_1 \in (0.414, 0.709)$ .

$\beta_1 = 0$ ,  $T_1 = 12.097$ ,  $|T_1| \geq t_{0.975}(3) = 3.18$ , a proto nezamítáme  $H_0$ .

## 1.2 Intervaly predikce

Předpokládejme, že máme nové pozorování  $X$ , pro které je  $Y$  neznámé a my bychom chtěli predikovat hodnoty  $Y$ , případně najít intervaly spolehlivosti pro  $Y$ . Vzhledem k lineárnímu regresnímu modelu  $Y = \beta_0 + \beta_1 X + e$  je přirozené vzít za predikci

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X.$$

Najdeme rozdělení rozdílu  $Y - \hat{Y}$ . Zřejmě se jedná o normální rozdělení ( $\beta_0 \sim \mathcal{N}(\dots)$ ,  $\beta_1 \sim \mathcal{N}(\dots)$ ,  $e_1 \sim \mathcal{N}(\dots)$ ,  $Y \sim \mathcal{N}(\dots)$ ) stačí tedy určit střední hodnotu a rozptyl.

$$\mathbb{E}(\hat{Y} - Y) = \mathbb{E}(\hat{\beta}_0) + \mathbb{E}(\hat{\beta}_1 X) - \beta_0 - \beta_1 X - \mathbb{E}(e) = \beta_0 + \beta_1 X - \beta_0 - \beta_1 X - 0 = 0.$$

Protože nový pár  $(X, Y)$  je nezávislý na předchozích datech, platí, že  $Y$  je nezávislé na  $\hat{Y}$  ( $\beta_0, \beta_1$  jsou spočteny pouze pomocí  $Y_1, \dots, Y_n$ ). Pak tedy

$$D(\hat{Y} - Y) = D(\hat{Y}) + D(Y) = D(\hat{Y}) + \sigma^2,$$

protože  $D(Y) = D(e) = \sigma^2$ .

$$\begin{aligned} D(\hat{Y}) &= D(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X) = \mathbb{E}(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X - \beta_0 - \beta_1 X)^2 = \mathbb{E} \left[ \hat{\beta}_0 - \beta_0 + X(\hat{\beta}_1 - \beta_1) \right]^2 = \\ &= \underbrace{\mathbb{E}(\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2}_{D\hat{\beta}_0} + \underbrace{X^2 \mathbb{E}(\hat{\beta}_1 - \beta_1)^2}_{D\hat{\beta}_0} + 2X \underbrace{\mathbb{E}(\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1 - \beta_1)}_{D(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)} = \\ &= \left( \frac{1}{n} + \frac{(\overline{x_n})^2}{x \sigma_x^2} \right) \sigma^2 + X^2 \frac{\sigma^2}{n \sigma_x^2} - 2X \frac{\overline{x_n} \sigma^2}{n \sigma_x^2} = \sigma^2 \left( \frac{1}{n} + \frac{(\overline{x_n} - X)^2}{n \sigma_x^2} \right) \end{aligned}$$



Máme tedy

$$\hat{Y} - Y \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x}_n - X)^2}{n\sigma_x^2}\right)\right),$$

a proto

$$\frac{(\hat{Y} - Y) / \sqrt{\sigma^2\left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x}_n - X)^2}{n\sigma_x^2}\right)}}{\sqrt{\frac{1}{n-2} \frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2}}}$$

a tedy  $100(1 - \alpha)\%$  interval prediktu??? je

$$\hat{Y} - t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{n-2} \left(n + 1 + \frac{(\bar{x}_n - X)^2}{\sigma_x^2}\right)} \leq Y \leq \hat{Y} + t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{n-2} \left(n + 1 + \frac{(\bar{x}_n - X)^2}{\sigma_x^2}\right)}.$$

Tohle kreslí MATLAB (polytool)

PŘÍKLAD 1.3 (Rychlost zvuku). Mějme  $\bar{x}_n = 30$ ,  $\sigma_X^2 = 1760$ ,  $\hat{\beta}_1 = 0.561$ ,  $\hat{\beta}_0 = 331.16$ ,  $\sigma^2 = 11.37$ , nestraný,  $\hat{s}^2 = 18.95$ . Nové  $X = 35^\circ\text{C}$  a  $\hat{Y} = 331.16 + 0.561 \cdot 35 = 350.8$ .

$$\sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{n-2} \left(n + 1 + \frac{(\bar{x}_n - X)^2}{\sigma_x^2}\right)} = \sqrt{\frac{11.37}{3} \left(6 + \frac{(30 - 35)^2}{1760}\right)} = 4.77$$

$$t_{0.975}(3) = 3.1824 \text{ a tedy } IP = (335.6, 366.0)$$

### 1.3 Vícerozměrná lineární regrese

Předpokládejme model

$$Y_i = \beta_1 X_{i1} + \dots + \beta_p X_{ip} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

kde  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n \text{ iid } \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ . V maticové formě

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon,$$

kde  $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_{n \times 1}$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_{n \times 1}$ ,  $\beta = \beta_{p \times 1}$  a  $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{n \times p}$ . Sloupce matice  $\mathbf{X}$  označíme  $X_1, \dots, X_p$ , tedy  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$  a předpokládejme, že jsou nezávislé. Pokud by nebyly nezávislé, nebylo by možné získat (rekonstruovat) parametr  $\beta$  z  $\mathbf{X}$  a  $\mathbf{Y}$  ani kdyby nebyl přítomný šum  $\varepsilon$ . (Vlastně bychom měli soustavu  $\mathbf{X}\beta = \mathbf{Y}$ .)

POZNÁMKA 1.4. V jednorozměrné regresi by to odpovídalo případu, kdy jsou všechny  $X_i$  stejné, tzn. že by nebylo možné odhadnout přímku přímo z pozorování pouze v jednom bodě.

Dále předpokládejme, že

$$n > p, \quad h(\mathbf{X}) = p.$$

Zkusíme následně vypočítat MLE parametrů  $\beta, \sigma^2$ .

**Věta 1.5.** Pro MLE parametrů  $\beta$  a  $\sigma^2$  platí, že

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$$

a

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta}) = \frac{1}{n} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta}\|^2 = \frac{1}{n} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}\|^2.$$

## 1 SME – regresní analýza

*Důkaz.* zřejmě  $Y_i \sim \mathcal{N}(\beta_1 X_{i1} + \dots + \beta_p X_{ip}, \sigma^2)$  a její hustota tedy je

$$f_i(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp - \frac{(y - \beta_1 X_{i1} - \dots - \beta_p X_{ip})^2}{2\sigma^2}$$

a věrohodnostní funkce

$$\begin{aligned} L &= \prod_{i=1}^n f_i(Y_i) = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^n \exp - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_1 X_{i1} - \dots - \beta_p X_{ip})^2}{2\sigma^2} \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^n \exp - \frac{1}{2\sigma^2} \|Y - X\beta\|^2 \\ l &= \ln L = C - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \|Y - X\beta\|^2 \end{aligned}$$

Je třeba minimalizovat

$$\begin{aligned} \|Y - X\beta\|^2 &= (Y - X\beta)^T (Y - X\beta) = (Y - \sum_{i=1}^p \beta_i X_i)^T (Y - \sum_{i=1}^p \beta_i X_i) \\ &= Y^T Y - 2 \sum_{i=1}^p \beta_i Y^T X_i + \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^p \beta_i \beta_j X_i^T X_j. \end{aligned}$$

Derivujeme podle  $\beta_i$ . Potom

$$-2Y^T X_i + 2 \sum_{j=1}^p \beta_j X_i^T X_j = 0, \quad \text{a tedy} \quad Y^T X_i = \sum_{j=1}^p \beta_j X_i^T X_j, \quad \forall i \leq p.$$

V maticovém zápisu se  $\mathbf{X}^T \mathbf{Y} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta$  nazývá **soustava normálních rovnic**. Matice  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  má rozměr  $p \times p$  a je invertibilní, protože  $h(\mathbf{X}) = p$  a  $h(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = h(\mathbf{X})$  pro libovolnou matici  $\mathbf{X}$ . Proto tedy

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}.$$

Derivujeme podle  $\sigma^2$ . Potom

$$\begin{aligned} -\frac{n}{2} \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \|Y - X\beta\|^2 &= 0, \\ \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \|Y - X\hat{\beta}\|^2 &= \frac{1}{n} \underbrace{(Y - X\hat{\beta})^T (Y - X\hat{\beta})}_R = \frac{1}{n} R, \end{aligned}$$

kde  $R$  je reziduální součet čtverců. □

Pro statistickou analýzu potřebujeme rozdělení odhadů  $\hat{\beta}, \hat{\sigma}^2$ .

**Věta 1.6.** *Platí, že*

$$\hat{\beta} \sim \mathcal{N}_p(\beta, \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}) \quad \text{a} \quad \frac{n\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-p}^2.$$

*Odhady  $\hat{\beta}, \hat{\sigma}^2$  jsou nezávislé.*

## 1 SME – regresní analýza

*Důkaz.*  $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$ , a proto

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbf{X}\beta + \varepsilon) = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})\beta + (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \varepsilon = \beta + (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \varepsilon.$$

Z toho vyplývá, že  $\mathbb{E}\hat{\beta} = \beta$ , protože  $\mathbb{E}\varepsilon = 0$ . Kovarianční matici můžeme napsat ve tvaru

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\hat{\beta} - \beta)(\hat{\beta} - \beta)^T &= \mathbb{E}((\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \varepsilon \varepsilon^T \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}) = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbb{E}(\varepsilon \varepsilon^T) \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \end{aligned}$$

□

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Předpokládejme, že sledujeme dvě veličiny  $x$  a  $y$  mezi kterými existuje lineární závislost

$$y = \beta_0 + \beta_1 x, \quad \text{kde } \beta_0, \beta_1 \text{ neznáme.}$$

Provede se experiment a zjistí se hodnoty dvojic  $(x, y)$ . Často se stává, že  $x$  je změřeno prakticky zcela přesně.

POZNÁMKA 2.1. To nastává například v případě, kdy se  $x$  nastavuje na předem dané úrovni a následně se k němu změří odpovídající  $y$ .

Oproti tomu u  $y$  obvykle předpokládáme měření s chybou. Chyba může být náhodná a proto i  $y$  budeme chápat jako náhodnou veličinu, kterou budeme značit  $Y$ . Pro dvojice  $(x_1, Y_1), \dots, (x_n, Y_n)$  se zavádí model

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i \quad (*) \quad i = 1, \dots, n.$$

Jednotlivé proměnné se pak nazývají následovně

- $Y_i$  – vysvětlovaná (závislá) proměnná
- $x_i$  – vysvětlující (nezávislá) proměnná, *popřípadě prediktor nebo regresor*
- $\beta_0, \beta_1$  – neznámé regresní parametry
- $e_i$  – náhodný šum, (náhodná chyba)

Budeme předpokládat, že  $e_i$  jsou nezávislé (někdy bude dokonce stačit, aby byly nekorelované) a  $e_i \sim (0, \sigma^2)$ . A tedy splňuje  $\mathbb{E}[e_i] = 0$ ,  $D[e_i] = \sigma^2$  pro  $\forall i$  (homoskedasticita).

Měřením získáme data  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  a cílem statistické analýzy je určit, zda model (\*) schopen popsat pozorovanou variabilitu u  $y$ .

### První krok

Odhadneme neznámé parametry  $\beta_0, \beta_1, \sigma^2$ . Proložíme data přímkou ve tvaru

$$\hat{y}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$$

a porovnáme  $y_i$  – naměřená data a  $\hat{y}(x_i)$  – predikovaná hodnota lineární regrese pro  $\forall i$ . To nám umožňuje posoudit adekvátnost modelu.

Pro proložení dat přímkou existuje několik způsobů. Zásadní ovšem bude znalost rozdělení  $e_i$  a tedy i  $Y_i$  i když apriori není zřejmé proč znát rozdělení a ne  $\beta_0, \beta_1$ .

Zde máme následující možnosti:

1. Odhadnout  $\beta_0, \beta_1$  pomocí metody nezávislé na rozdělení chyb
2. Udělat věrohodnostní předpoklad o rozdělení chyb, odhadnout  $\beta_0, \beta_1$  a následně ověřit předpoklad

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

POZNÁMKA 2.2. Speciální důležitý případ je  $e_i \sim N(0, \sigma^2)$  který při MLE odhadu  $\beta_0, \beta_1$  vede na metodu nejmenších čtverců, která může být použita bez ohledu na rozdělení chyb.

### Odhady parametrů

## 2.1 Data s předpokladem normality dat

Předpokládáme, že  $e_1, \dots, e_n \text{ iid } N(0, \sigma^2)$ . To znamená, že  $Y_i \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$  a jednotlivé  $Y_1, \dots, Y_n$  jsou nezávislé.

### MLE odhady

Věrohodnostní funkce je ve tvaru

$$L = L(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^n \exp \left( -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 \right)$$
$$l = \ln L = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

pro pevné  $\sigma^2 > 0$  je maximalizace  $l$  ekvivalentní s minimalizováním  $S$ , kde

$$S = S(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2.$$

Proto tuto metodu někdy nazýváme metodou nejmenších čtverců.

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0,$$
$$\frac{\partial S}{\partial \beta_1} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) x_i = 0.$$

Z první rovnice pak dostaneme

$$\beta_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i - \beta_1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \bar{y}_n - \beta_1 \bar{x}_n$$

a dosazením do druhé dostaneme výraz

$$\sum_{i=1}^n y_i x_i - \beta_0 \sum_{i=1}^n x_i - \beta_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0,$$
$$\sum_{i=1}^n y_i x_i - \bar{y}_n \sum_{i=1}^n x_i - \beta_1 \bar{x}_n \sum_{i=1}^n x_i - \beta_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0.$$

Jednotlivé MLE odhady parametrů pak mají následující tvar

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{x}_n \quad a \quad \hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i x_i - n \bar{x}_n \bar{y}_n}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n \bar{x}_n^2}.$$

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Nyní najdeme odhad parametru  $\sigma^2$

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2} \cdot \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{2(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 = 0,$$

vyjádřením  $\sigma^2$  z rovnice dostaneme výraz

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n} \text{SSE},$$

kde  $\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_i$  je predikce modelu (odhad  $\mathbb{E}[Y_i]$ ) a zkratka SSE je odvozena z anglického *sum of the squares of errors*. Rozdíl  $\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i$  nazýváme  $i$ -té reziduum. Velikost reziduí indikuje, jak dobře odhadnutá přímka odpovídá datům. Rezidua jsou vlastně odhady chyb  $e_i$ , jejich analýza hraje významnou roli v ověření předpokladů rozdělení chyb.

POZNÁMKA 2.3. Pro odhad  $\sigma^2$  se používá častěji statistika  $s_n^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n-2} \text{SSE}$ , která je nestranným odhadem parametru  $\sigma^2$  (pro libovolné rozdělení  $e_i$ ), zatímco  $\sigma_{\text{MLE}}^2$  je vychýlený odhad i pro normální rozdělení chyb.

### Odhad $\sigma$

pro odhad parametru  $\sigma$  využíváme statistiku nazývanou standardní chyba regrese (standard error), která má tvar

$$s_n = \sqrt{\frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}.$$

Tento odhad není nestranný.

## 2.2 Data bez předpokladu normality

Bez předpokladu normality chyb. Tedy, že  $e_1, \dots, e_n$  jsou nekorelované,  $e_1, \dots, e_n \sim (0, \sigma^2)$ . Pro odhad  $\beta_0, \beta_1$  lze použít minimalizaci S (nejmenší čtverce), což je rozumné provedení, když si uvědomíme ????? interpret??? (strana 5).

Nechť  $y = \beta_0 + \beta_1 x$  je rovnice nějaké přímky, potom  $y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)$  je vertikální vzdálenost bodu  $(x_i, y_i)$  od přímky a

$$S = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

je míra udávající, jak dobře přímka prokládá data. Dává smysl vybrat takovou přímku, která minimalizuje S. Minimalizací S získáme stejné odhady  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$  jako u MLE odhadů pro normální data. Teď se ale nazývají odhad metodou nejmenších čtverců LSE (least squares estimators). Existuje více měř vhodnosti přímky. Použití LSE pro libovolné rozdělení chyb má dvě zdůvodnění.

1. pro normální rozdělení chyby LSE splývá s MLE.
2. LSE odhad je navíc BLUE (best linear unbiased estimator) jak ukážeme v Gauss–Markov theorem

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

PŘÍKLAD 2.4. Necht'  $e_1, \dots, e_n$  jsou iid s hustotou

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{2}e^{-|\varepsilon|} \quad \text{Laplaceovo rozdělení}$$

potom hustota  $Y_i$  je

$$f_{Y_i}(y_i) = \frac{1}{2}e^{-|y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i|}$$

a věrohodnostní funkce  $L$  a  $l$  mají tvar

$$L = \frac{1}{2^n} e^{-\sum_{i=1}^n |y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i|}$$

$$l = -n \ln 2 - \sum_{i=1}^n |y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i|$$

MLE odhady parametrů  $\beta_0, \beta_1$  získáme minimalizací

$$A = \sum_{i=1}^n |y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i| \quad \dots \quad \text{MAD (minimum absolute deviation).}$$

Zde budou odhady jiné než u LSE.

Uvažujme 3 body:  $(0, 0), (1, 0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .

$$\begin{aligned} \text{MLE:} \quad & \beta_0 = \beta_1 = 0 \quad , \quad A = 0.5 \quad , \quad \hat{y} = 0 \\ \text{LSE:} \quad & \bar{x} = \frac{1}{2}, \bar{y} = \frac{1}{6} \quad , \quad \sum_{i=1}^n x_i^2 = \frac{5}{4}, \sum_{i=1}^n x_i y_i = \frac{1}{4} \quad , \quad \beta_1 = 0, \beta_0 = \frac{1}{6} \end{aligned}$$

POZNÁMKA 2.5. I když  $s_n^2$  je nestranný odhad  $\sigma^2$ ,  $s_n$  je vychýlený odhad  $\sigma$ ! Je to obecná vlastnost odhadů (nestranných) rozptylů, neboť  $s^2$  nestranný odhad  $\sigma^2 \Rightarrow \mathbb{E}[s] \leq \sigma$

Uvažujme náhodnou veličinu  $X$  pro kterou platí, že  $D[X] < +\infty$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X^2] &= D[X] + \mathbb{E}[X]^2 \quad \text{dosazením } X = s \quad \text{dostaneme} \\ \mathbb{E}[s^2] &= D[s] + \mathbb{E}[s]^2 \end{aligned}$$

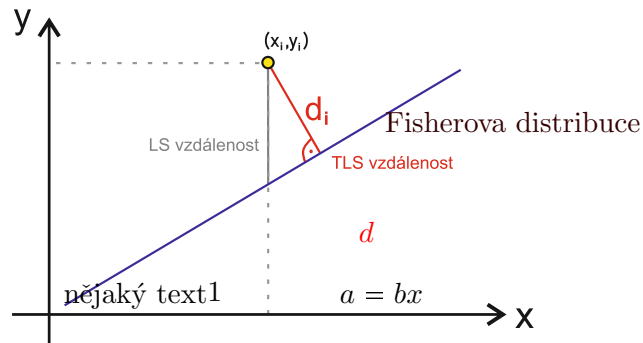
$$\mathbb{E}[s]^2 \leq \sigma^2 \quad \mathbb{E}[s] \leq \sigma \tag{2.1}$$

a rovnost nastává pokud  $D[s] = 0$ .

Například pro normální chyby je  $s_n^2 \propto \chi^2 \Rightarrow \mathbb{E}[s_n] < \sigma$

POZNÁMKA 2.6. předpokládali jsme, že hodnoty  $x_i$  jsou dány přesně, což nemusí být vždy pravda. Často obě veličiny  $(x, y)$  jsou měřeny nepřesně. EIV models "error in variable" v těchto modelech jsou často preferovány jiné odhady než LSE. Populární metoda: total least squares (ortogonal least squares). Zde minimalizujeme  $\sum_{i=1}^n d_i^2$ , kde  $d_i$  je minimální vzdálenost bodu a přímky (kolmice na přímku protínající bod). To znamená, že neupřednostňujeme veličinu  $x$ , ale přistupujeme k  $x$  a  $y$  rovnoměrně.

## 2 Jednorozměrná lineární regrese



POZNÁMKA 2.7. v literatuře se někdy  $x$  uvažují jako realizace náhodné veličiny ( ne vždy se  $x$  nastavuje předem, nebo je jasně dané (třeba pohlaví – ??? (8 strana))

Model má potom tvar

$$\mathbb{E}[Y_i|X_i] = \beta_0 + \beta_1 X_i \quad D[Y_i|X_i] = \sigma^2$$

pro většinu výsledků prezentovaných v této přednášce ale není podstatné, zde je  $x$  chápáno jako pevné nebo náhodné. Důkazy většinou fungují s podmíněnými výrazy ( $\mathbb{E}, D, \dots$ ) při dané hodnotě  $x$  místo nepodmíněných. Nicméně větší pozornost je třeba u odvození asymptotických rozdělení odhadů.

### 2.3 Vlastnosti odhadů

Vlastnosti odhadů  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, s_n^2$ .

**Věta 2.8.** Nechť  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$  jsou LSE odhady parametrů  $\beta_0, \beta_1$  v lineárním modelu

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i \quad i = 1, \dots, n,$$

kde  $e_i$  jsou nezávislé náhodné veličiny (postačí i nekorelovanost) se stejným rozptylem  $\sigma^2$ . Potom platí:

1.  $\mathbb{E}[\hat{\beta}_0] = \beta_0$  ,  $\mathbb{E}[\hat{\beta}_1] = \beta_1$  , (nestranné odhady)
2.  $D[\hat{\beta}_0] = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$  , kde  $S_{xx} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2$
3.  $D[\hat{\beta}_0] = \sigma^2 \left( \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{S_{xx}} \right)$
4. Pokud navíc platí, že  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$   $i = 1, \dots, n$  potom  $\hat{\beta}_j \sim \mathcal{N}(\beta_j, D[\hat{\beta}_j])$   $j = 0, 1$

Důkaz

1. upravíme  $\hat{\beta}_1$

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_1 &= \frac{\sum_{i=1}^n y_i x_i - n \bar{x}_n \bar{y}_n}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n \bar{x}_n^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2} = \\ &= \frac{1}{S_{xx}} \left( \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) y_i - \bar{y}_n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) \right) = \frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) y_i \end{aligned}$$



## 2 Jednorozměrná lineární regrese

potom má střední hodnota  $\hat{\beta}_1$  tvar

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\hat{\beta}_1] &= \mathbb{E}\left[\frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) Y_i\right] = \frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) \mathbb{E}[Y_i] = \frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) (\beta_0 + \beta_1 x_i) = \\ &= \frac{\beta_0}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) + \frac{\beta_1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) x_i = 0 + \frac{\beta_1}{S_{xx}} S_{xx} = \beta_1\end{aligned}$$

a střední hodnota pro  $\hat{\beta}_0$  má tvar

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}_0] = \mathbb{E}[\bar{Y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{x}_n] = \mathbb{E}[\bar{Y}_n] - \bar{x}_n \mathbb{E}[\hat{\beta}_1] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[Y_i] - \bar{x}_n \beta_1 = \beta_0 + \frac{\beta_1}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \bar{x}_n \beta_1 = \beta_0$$

2.

$$D[\hat{\beta}_1] = D\left[\frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) Y_i\right] = \frac{1}{S_{xx}^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2 D[Y_i] = \frac{\sigma^2 S_{xx}}{S_{xx}^2} = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$$

3.

$$\begin{aligned}D[\hat{\beta}_0] &= D[\bar{Y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{x}_n] = D[\bar{Y}_n] + \bar{x}_n^2 D[\hat{\beta}_1] - 2\bar{x}_n \text{cov}(\bar{Y}_n, \hat{\beta}_1) = \\ &= \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\bar{x}_n^2 \sigma^2}{S_{xx}} - 2\bar{x}_n \text{cov}(\bar{Y}_n, \hat{\beta}_1) \\ \text{cov}(\bar{Y}_n, \hat{\beta}_1) &= \text{cov}\left(\bar{Y}_n, \frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) Y_i\right) = \frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) \text{cov}(\bar{Y}_n, Y_i) \\ \text{cov}(\bar{Y}_n, Y_i) &= \text{cov}\left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n Y_j, Y_i\right) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \text{cov}(Y_j, Y_i) = \frac{1}{n} \text{cov}(Y_i, Y_i) = \frac{1}{n} D Y_i = \frac{\sigma^2}{n} \\ &\Rightarrow \text{cov}(\bar{Y}_n, \hat{\beta}_1) = 0 = \frac{\sigma^2}{n S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)\end{aligned}$$

**Věta 2.9.** *Za předpokladu předchozí věty platí*

$$\mathbb{E}(s_n^2) = \sigma^2,$$

*tedy  $s_n^2$  je nestranný odhad  $\sigma^2$ .*

*Důkaz.*

$$\mathbb{E}(s_n^2) = \frac{1}{n-2} \mathbb{E} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \frac{1}{n-2} \underbrace{\sum_{i=1}^n \mathbb{E}(Y_i - \hat{Y}_i)^2}_{\text{ozn. } A}$$

Protože  $\mathbb{E}(\hat{Y}_i) = \mathbb{E}(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i = \mathbb{E}Y_i$ , platí, že:

$$\mathbb{E}(Y_i - \hat{Y}_i)^2 = D(Y_i - \hat{Y}_i) = \mathbb{E}(Y_i - \hat{Y}_i)^2 - \underbrace{(\mathbb{E}(Y_i - \hat{Y}_i))^2}_{=0}$$

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Dostáváme tak

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i=1}^n D(Y_i - \hat{Y}_i) = \sum_{i=1}^n [D(Y_i) + D(\hat{Y}_i) - 2\text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i)] = \\ &= n\sigma^2 + \sum_{i=1}^n D(\hat{Y}_i) - 2 \sum_{i=1}^n \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i) \end{aligned} \quad (\#)$$

Rozepíšeme

$$D\hat{Y}_i = D(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i) = D\hat{\beta}_0 + x_i^2 D\hat{\beta}_1 + 2x_i,$$

kde

$$\text{Cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \text{Cov}(\hat{Y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{x}_n, \hat{\beta}_1) = \underbrace{\text{Cov}(\hat{Y}_n, \hat{\beta}_1)}_{=0 \text{ (viz. dříve)}} - \bar{x}_n \underbrace{D(\hat{\beta}_1)}_{\frac{\sigma^2}{s_{xx}}} = -\frac{\sigma^2 \bar{x}_n}{s_{xx}}$$

a tedy

$$\begin{aligned} D\hat{Y}_i &= \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{s_{xx}} + x_i^2 \frac{1}{s_{xx}} - \frac{2x_i \bar{x}_n}{s_{xx}} \right] = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x}_n)^2}{s_{xx}} \right] \\ \sum_{i=1}^n D\hat{Y}_i &= \sigma^2 + \frac{\sigma^2}{s_{xx}} \underbrace{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}_{=s_{xx}} = 2\sigma^2 \end{aligned}$$

Následně máme

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i) &= \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i) = \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_0) + x_i \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_1) \\ \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_1) &= \frac{1}{s_{xx}} \sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x}_n) \underbrace{\text{Cov}(Y_i, Y_j)}_{=0 \text{ pro } i \neq j} = \frac{\sigma^2 (x_i - \bar{x}_n)}{s_{xx}} \\ \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_0) &= \text{Cov}(Y_i, \bar{Y}_n - \bar{x}_n \hat{\beta}_1) = \text{Cov}(Y_i, \bar{Y}) - \bar{x}_n \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{n} - \frac{\bar{x}_n \sigma^2 (x_i - \bar{x}_n)}{s_{xx}} \end{aligned}$$

a tedy

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i) &= \frac{\sigma^2}{n} - \frac{\bar{x}_n \sigma^2 (x_i - \bar{x}_n)}{s_{xx}} + \frac{x_i \sigma^2 (x_i - \bar{x}_n)}{s_{xx}} = \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\sigma^2}{s_{xx}} (x_i - \bar{x}_n)^2 \\ \sum_{i=1}^n \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i) &= \sigma^2 + \frac{\sigma^2}{s_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2 = 2\sigma^2 \end{aligned}$$

Dosazením do (#) dostaneme

$$A = n\sigma^2 + 2\sigma^2 - 4\sigma^2$$

a celkem máme

$$\mathbb{E}(s_n^2) = \frac{1}{n-2} A = \sigma^2.$$

□

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

**Tvrzení 2.10.** *Nechť platí předpoklady věty 1 a necht'  $e_1, \dots, e_n$  iid  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ . Potom platí:*

a)  $\frac{(n-2)s_n^2}{\sigma^2} \sim \chi(n-2)$

b)  $s_n^2$  je nezávislé na  $\hat{\beta}_0$  a  $\hat{\beta}_1$ .

*Důkaz.* Vyplyne z obecnějších tvrzení pro vícerozměrnou regresi. □

POZNÁMKA 2.11. Spočetli jsme

$$\underbrace{D(\hat{\beta}_0)}_{\text{ozn. } \sigma^2(\hat{\beta}_0)} = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{s_{xx}} \right] \quad \text{a} \quad \underbrace{D(\hat{\beta}_1)}_{\text{ozn. } \sigma^2(\hat{\beta}_1)} = \frac{\sigma^2}{s_{xx}}$$

Nestranné odhady jsou:

$$\sigma^2(\hat{\beta}_0) = s_n^2 \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{s_{xx}} \right] = s_n^2 \delta_0$$

$$\sigma^2(\hat{\beta}_1) = \frac{s_n^2}{s_{xx}} = s_n^2 \delta_1,$$

kde  $\delta_0$  a  $\delta_1$  jsou tzv. variance multiplication factors.

Odhady směrodatné odchylky veličin  $\hat{\beta}_0$  a  $\hat{\beta}_1$  pak jsou

$$\hat{\sigma}(\hat{\beta}_0) = s_n \sqrt{\delta_0} \quad \text{a} \quad \hat{\sigma}(\hat{\beta}_1) = s_n \sqrt{\delta_1},$$

kterým se pak říká standardní chyby odhadů  $\hat{\beta}_0$  a  $\hat{\beta}_1$ . Hrají zásadní roli při konstrukci IS a TH.

## 2.4 Gauss - Markov theorem

- Chyby normální  $\Rightarrow$  LSE pro  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$  je MLE ... parametrů (eficientní odhad)
- Pokud nejsou chyby normální, jaké je opodstatnění použít LSE?  
Ukážeme, že LSE jsou BLUE (best linear unbiased estimators), tedy lineární nestranné odhady s minimálním rozptylem
- Je ale třeba poznamenat, že můžou existovat nelineární nebo vychýlené odhady parametrů  $\beta_0, \beta_1$ , které jsou eficientnější než LSE, pokud se rozdělení chyb liší výrazně od normálního (tím se zabývá robustní regresní analýza).

Uvažujme model

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (*)$$

**Definice 2.12.** Lineární odhad parametru  $\beta$  je statistika tvaru

$$\hat{\beta} = \sum_{i=1}^n c_i Y_i,$$

kde  $c_i$  jsou dané reálné konstanty a  $i = 1, \dots, n$ .

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

**Věta 2.13.** *Nechť  $e_1, \dots, e_n$  v modelu (\*) jsou nekorelované a mají stejný rozptyl  $D(e_i) = \sigma^2, i = 1, \dots, n$ . Potom LSE  $\hat{\beta}_j, j = 0, 1$  je BLUE parametru  $\beta_j$ .*

*Důkaz.* Ukážeme pro  $\beta_1$ , pro  $\beta_0$  je důkaz podobný.

Nechť  $\hat{\beta}_1 = \sum_{i=1}^n c_i Y_i$ , pak

$$D\hat{\beta}_1 = \sum_{i=1}^n c_i^2 D Y_i = \sigma^2 \sum_{i=1}^n c_i^2$$

Aby byl  $\hat{\beta}_1$  nestranný, musí platit  $\mathbb{E}\hat{\beta}_1 = \beta_1$ , tedy

$$\mathbb{E}\hat{\beta}_1 = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{E}Y_i = \beta_0 \sum_{i=1}^n c_i + \beta_1 \sum_{i=1}^n c_i x_i \stackrel{!}{=} \beta_1$$

protože to musí platit pro lib.  $\beta_0, \beta_1$ , dostáváme

$$\sum_{i=1}^n c_i = 0 \quad \text{a} \quad \sum_{i=1}^n c_i x_i = 1.$$

Hledání lineárního, nestranného odhadu  $\beta_1$  je tedy redukováno na minimalizaci  $\sum_{i=1}^n c_i^2$  za vazebných podmínek  $\sum_{i=1}^n c_i = 0$  a  $\sum_{i=1}^n c_i x_i = 1$ .

Lagrangeova funkce:  $L = \sum_{i=1}^n c_i^2 - 2\lambda_1 \left( \sum_{i=1}^n c_i \right) - 2\lambda_2 \left( \sum_{i=1}^n c_i x_i - 1 \right)$ .

$$\frac{\partial L}{\partial c_i} = 2c_i - 2\lambda_1 - 2\lambda_2 x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = -2 \left( \sum_{i=1}^n c_i \right) = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = -2 \left( \sum_{i=1}^n c_i x_i - 1 \right) = 0$$

Sečteme prvních  $n$  rovnic

$$\underbrace{\sum_{i=1}^n c_i}_{=0} - n\lambda_1 - \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i = 0 \Rightarrow n\lambda_1 + \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i = 0 \Rightarrow \lambda_1 = -\lambda_2 \bar{x}_n$$

Sečteme dále prvních  $n$  rovnic vynásobených  $x_i$ :

$$\sum_{i=1}^n c_i x_i - \lambda_1 \sum_{i=1}^n x_i - \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_1 \sum_{i=1}^n x_i + \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = 1$$

$$-\lambda_2 \bar{x}_n \cdot n\bar{x}_n + \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = 1$$

$$\lambda_2 \left( \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}_n^2 \right) = 1 \Rightarrow \lambda_2 = \frac{1}{s_{xx}} \quad \text{a} \quad \lambda_1 = -\frac{\bar{x}_n}{s_{xx}}$$

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Dosadíme za  $\lambda_1, \lambda_2$ :

$$c_i + \frac{\bar{x}_n}{s_{xx}} - \frac{x_i}{s_{xx}} = 0 \Rightarrow c_i = \frac{x_i - \bar{x}_n}{s_{xx}}$$

a  $\hat{\beta}_1 = \frac{1}{s_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n) Y_i$ , což je LSE.

□

POZNÁMKA 2.14. Ukázali jsme pouze, že to je stacionární bod, že je tam i minimum ukážeme v obecnější větě ve vícerozměrné regresi.

### 2.5 IS pro $\beta_0, \beta_1$

- IS poskytují jistou "míru přesnosti" bodových odhadů
- pro jejich konstrukci potřebujeme znát rozdělení pravděpodobnosti bodového odhadu
- budeme tedy uvažovat normalitu chyb
- spočtené IS se ale často používají, i když rozdělení chyb není normální, jejich použití se zdůvodňuje tím, že LSE odhady par.  $\beta$  jsou lineární funkcí  $Y_i, i = 1, \dots, n$ , což umožňuje aplikovat CLT a dostat asymptotickou normalitu odhadů  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$

Uvažujme model  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i$ ,  $e_i$  i.i.d  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ . Víme:

$$\hat{\beta}_i \sim \mathcal{N}(\beta_i, \sigma^2(\hat{\beta}_i)), \quad \frac{(n-2)s_n^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1) \text{ a nezávisí na } \hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1.$$

POZNÁMKA 2.15.

$$X \sim \mathcal{N}(0, 1), Y \sim \chi^2(n), X, Y \text{ nezávislé} \Rightarrow \frac{X}{\sqrt{Y/n}} \sim t(n)$$

Tedy

$$T_i = \frac{\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sigma(\hat{\beta}_i)}}{\frac{s_n}{\sigma}} = \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\hat{\sigma}}(\hat{\beta}_i) \sim t(n-2, i=0, 1)$$

neboť  $\sigma(\hat{\beta}_i) = \sigma\sqrt{\delta_i}$  a  $\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i) = s_n\sqrt{\delta_i}$ .

Tzn.  $P \left[ -t_{1-\alpha/2}(n-2) \leq \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\hat{\sigma}}(\hat{\beta}_i) \leq t_{1-\alpha/2}(n-2) \right]$  a vyjádřením  $\beta_i$  dostaneme

$$P \left[ \hat{\beta}_i - t_{1-\alpha/2}(n-2)\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i) \leq \beta_i \leq \hat{\beta}_i + t_{1-\alpha/2}(n-2)\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i) \right] = 1 - \alpha$$

a tedy  $(\hat{\beta}_i \pm t_{1-\alpha/2}(n-2)\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i))$  je  $100(1-\alpha)\%$  IS pro  $\beta_i, i = 0, 1$ .

Dosazením za  $\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i)$  dostaneme

- $100(1-\alpha)\%$  IS pro  $\beta_0$ :  $\hat{\beta}_0 \pm t_{1-\alpha/2}(n-2) \cdot s_n \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{s_{xx}}}$
- $100(1-\alpha)\%$  IS pro  $\beta_1$ :  $\hat{\beta}_1 \pm t_{1-\alpha/2}(n-2) \cdot s_n \frac{1}{\sqrt{s_{xx}}}$

POZNÁMKA 2.16. Z tvarů IS lze pozorovat, že IS pro  $\beta_0$  bude ve většině praktických případů širší než IS pro  $\beta_1$ , tzn. směrnice je obecně odhadnuta s větší přesností než absolutní člen (intercept).

POZNÁMKA 2.17. Někdy se konstruuje simultánní IS pro oba parametry. (Obr?) Zmíníme podrobněji u vícerozměrné regrese.

## 2.6 TH pro $\beta_0, \beta_1$

Chtěli bychom ověřit platnost předpokladu lineárního vztahu mezi  $x$  a  $y$ .

Předpokládejme nyní, že model je lineární a že  $x$  je jediná dostupná vysvětlující proměnná. Otázkou je, zda je  $x$  užitečná ve vysvětlení variability v  $y$ , chceme tedy rozhodnout mezi dvěma modely:

$$Y_i = \beta_0 + e_i \quad \text{a} \quad Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i$$

tzn. otestovat hypotézu  $H_0 : \beta_1 = 0$  vs.  $H_1 : \beta_1 \neq 0$ .

Pokud nezamítneme  $H_0$ , závěr bude, že  $x$  nevysvětluje nic z variability  $y$  a není v modelu významné. Pokud zamítneme  $H_0$ , znamená to, že  $x$  je významné.

POZNÁMKA 2.18. Tyto závěry jsou správné pouze za předpokladu, že model je lineární!

- nezamítnutí  $H_0$  nemusí znamenat, že  $x$  není užitečná, může to pouze indikovat, že vztah mezi  $y$  a  $x$  není lineární
- zamítnutí  $H_0$  naopak říká, že existuje lineární trend mezi  $x$  a  $y$ , ale mohou tam být i jiné typy závislosti

Pro konstrukci testů využijeme odvozené IS.

POZNÁMKA 2.19. Opakování:  $H_0 : \theta = \theta_0$  vs.  $H_1 : \theta \neq \theta_0 \Rightarrow (\theta, \bar{\theta})$  je  $100(1 - \alpha)\%$  IS pro  $\theta$ . Pak  $W = \{x | \theta_0 \notin (\underline{\theta}, \bar{\theta})\}$  je kritický obor test na hladině  $\alpha$ .

$H_0 : \beta_1 = 0$  zamítneme, pokud  $0 \notin \left( \hat{\beta}_1 \pm t_{1-\alpha/2}(n-2) \cdot \frac{s_n}{\sqrt{s_{xx}}} \right)$ , tzn.

$$\text{buď } \hat{\beta}_1 + t_{1-\alpha/2}(n-2) \cdot \frac{s_n}{\sqrt{s_{xx}}} < 0 \iff \hat{\beta}_1 \frac{\sqrt{s_{xx}}}{s_n} < -t_{1-\alpha/2}(n-2)$$

$$\text{nebo } \hat{\beta}_1 - t_{1-\alpha/2}(n-2) \cdot \frac{s_n}{\sqrt{s_{xx}}} > 0 \iff \hat{\beta}_1 \frac{\sqrt{s_{xx}}}{s_n} > t_{1-\alpha/2}(n-2)$$

A zapsáno dohromady

$$|T_n| = |\hat{\beta}_1| \frac{\sqrt{s_{xx}}}{s_n} > t_{1-\alpha/2}(n-2).$$

POZNÁMKA 2.20. Intuitivní interpretace:  $|T_n| = |\hat{\beta}_1| \frac{\sqrt{s_{xx}}}{s_n} = \frac{|\hat{\beta}_1|}{\hat{\sigma}(\hat{\beta}_1)}$  je převrácená hodnota relativní chyby.

Pokud je  $\beta_1$  dobře odhadnuto, očekáváme malý rozptyl  $\hat{\sigma}(\hat{\beta}_1)$ , tedy  $T$  bude velké.

t-test tedy říká, že zamítneme  $H_0$ , pokud je relativní chyba odhadu malá.

POZNÁMKA 2.21. Někdy dopředu známe kandidáta  $b_1$  jako hodnotu parametru  $\beta_1$  a chtěli bychom testovat  $H_0 : \beta_1 = b_1$  vs.  $H_1 : \beta_1 \neq b_1$ . Test bude zamítnut  $H_0$ , pokud

$$|\beta_1 - b_1| \cdot \frac{\sqrt{s_{xx}}}{s_n} > t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2).$$

### 2.6.1 Test významnosti interceptu

Otázka je, zda přímka prochází počátkem  $(0, 0)$ , tedy  $H_0 : \beta_0 = 0$  vs.  $H_1 : \beta_0 \neq 0$ . Nezamítnutí  $H_0$  znamená, že jednodušší model  $y = \beta_1 x + e$  lépe popisuje data, než  $y = \beta_0 + \beta_1 x + e$ .  $H_0$  potom zamítneme, pokud

$$T_n = \frac{|\hat{\beta}_0|}{\hat{\sigma}(\hat{\beta}_0)} = |\hat{\beta}_0| \frac{1}{s_n \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{s_{xx}}}} > t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2).$$

## 2.7 ANOVA přístup pro testování

Odvodili jsme  $t$ -test významnosti koeficientů a nyní odvodíme ekvivalentní  $F$ -test, který může být zobecněn na test celkové významnosti vícerozměrného regresního modelu (testy významnosti jednotlivých koeficientů mohou být totiž zavádějící).

Myšlenkou metody (analýza rozptylu ANOVA) je určit, kolik variability v pozorováních  $(y_1, y_2, \dots, y_n)$  je "vysvětleno" regresním modelem (přímkou). Míru variability v datech pak spočítáme jako podíl součtu sum od regrese a celkového počtu čtverců, tedy

$$\text{SST} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2,$$

pokud regresní přímka  $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$  dobře prokládá data, tedy  $\hat{y}_i \approx y_i$ . Dále bude platit, že

$$\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}}_n)^2 \approx \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2.$$

Ukážeme, že  $\bar{\hat{y}} = \bar{y}_n$  a tak

$$\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}}_n)^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_n)^2 = \text{SSR}$$

regresi sum of squares, regresní součet čtverců. Podíl

$$R^2 = \frac{\text{SSR}}{\text{SST}} = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_n)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2}$$

tak vyjadřuje variabilitu v  $(y_1, \dots, y_n)$  vysvětlené regresním modelem.

$R^2$  - *koeficient determinace (coefficient of determination)* (pro každý model by měl mít hodnotu  $R^2 \approx 1$ ). Ukážeme, že  $R^2$  je kvadrát výběrového korelačního koeficientu mezi  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{y}$ , což dává statistice  $R^2$  význam míry "dobré shody".

Pokud bychom znali rozdělení pravděpodobnostní statistiky  $R^2$ , nabízí se její použití pro test  $H_0 : \beta_1 = 0$ , kterou bychom zamítli, pokud bude  $R^2 \approx 1$ . Protože každá monotonní funkce  $R^2$  vede na ekvivalentní test, budeme uvažovat statistiku

$$F = \frac{(n-2)R^2}{1-R^2}.$$

**Lemma 2.22.** *Nechť  $\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i$  značí rezidua, kde  $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$  a  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$  jsou LSE. Potom*

1.  $\sum_{i=1}^n \hat{e}_i = 0$ ,
2.  $\bar{\hat{y}}_n = \bar{y}_n$ ,
3.  $\sum_{i=1}^n \hat{e}_i \hat{y}_i = 0$ .

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

*Důkaz.* 1. Z rovnice  $\frac{\partial S}{\partial \beta_0} = 0$  dostaneme

$$0 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i.$$

2. Z bodu 1) plyne, že  $\sum_{i=1}^n \hat{y}_i = \sum_{i=1}^n y_i$ , podělením  $n$  dostaneme dokazované tvrzení.

3. Z rovnice  $\frac{\partial S}{\partial \beta_1} = 0$  dostaneme

$$0 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) x_i = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i x_i$$

a tedy

$$\sum_{i=1}^n \hat{e}_i \hat{y}_i = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i) = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^n x_i \hat{e}_i \hat{\beta}_1 = \hat{\beta}_0 \underbrace{\sum_{i=1}^n \hat{e}_i}_{=0} + \hat{\beta}_1 \underbrace{\sum_{i=1}^n x_i \hat{e}_i}_{=0} = 0.$$

□

**Věta 2.23.** Předpokládejme, že  $SST \neq 0$ . Potom platí

1.  $0 \leq R^2 \leq 1$ ,
2.  $R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST}$ , kde  $SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$  jako reziduální součet čtverců,
3.  $R^2 = 1 \Leftrightarrow (\forall i \in \hat{n})(\hat{y}_i = y_i)$  (všechna data leží na přímce),
4. pokud označíme  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  a  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$ , potom  $R^2 = \varrho^2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , kde

$$\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\left( \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n) \right)^2}{S_{xx} S_{yy}}$$

je druhá mocnina výběrového korelačního koeficientu vektorů  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ ,

5.  $F = \frac{SSR}{s_n^2} = T^2$ ,
6. pokud jsou chyby  $e_1, \dots, e_n$  iid  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$  a  $\beta_1 = 0$  (platí  $H_0 : \beta_1 = 0$ ) v modelu, potom  $F \sim F(1, n-2)$ .

*Důkaz.* Důkaz věty bude založen na rozkladu

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$



## 2 Jednorozměrná lineární regrese

neboli  $SST = SSR + SSE$ . Z lemmatu 2.22 vyplývá, že

$$\begin{aligned} SST &= \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 = \sum_{i=1}^n [(y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y}_n)]^2 = \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_n)^2 + 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}_n) = SSE + SSR + 0, \end{aligned}$$

neboť

$$\sum_{i=1}^n ((y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}_n)) = \sum_{i=1}^n \underbrace{\hat{e}_i \hat{y}_i}_{=0} - \bar{y}_n \sum_{i=1}^n \underbrace{\hat{e}_i}_{=0} = 0.$$

Z toho potom dokazujeme jednotlivé body věty.

1. Protože  $SST = SSE + SSR$ , pak  $0 \leq R^2 = \frac{SSR}{SST} \leq \frac{SST}{SST} = 1$ .
2.  $SSR = SST - SSE \Rightarrow R^2 = \frac{SST - SSE}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$ .
3. Z bodu 2 plyne, že  $R^2 = 1 \Leftrightarrow SSE = 0$  a  $SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = 0 \Leftrightarrow y_i = \hat{y}_i \forall i \in \hat{n}$ .
4.  $\hat{y}_i = \underbrace{\hat{\beta}_0}_{=\bar{y}_n = \hat{\beta}_1 \bar{x}_n} + \hat{\beta}_1 x_i = \bar{y}_n - \hat{\beta}_1 (\bar{x}_n - x_i)$ . Proto pak

$$SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_n)^2 + \hat{\beta}_1^2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2 = \hat{\beta}_1^2 S_{xx},$$

a protože  $\hat{\beta}_1 = \frac{1}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)$ , dostaneme

$$\rho^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\left[ \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n) \right]^2}{S_{xx} S_{yy}} = \frac{\hat{\beta}_1^2 S_{xx}}{S_{yy}} = \frac{SSR}{SST} = R^2,$$

neboť  $S_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 = SST$ .

5. Z definice F plyne, že

$$F = \frac{(n-2)R^2}{1-R^2} = \frac{(n-2)\frac{SSR}{SST}}{\frac{SSE}{SST}} = \frac{SSR}{\frac{SSE}{n-2}} = \frac{SSR}{s_n^2}.$$

Protože  $T_n = \hat{\beta}_1 \frac{\sqrt{S_{xx}}}{s_n}$ , pak

$$T^2 = \frac{\hat{\beta}_1^2 S_{xx}}{s_n^2} = \frac{SSR}{s_n^2} = F.$$

6.  $T \sim t(n-2) \Rightarrow F = T^2 \sim F(1, n-2)$ .

□

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

POZNÁMKA 2.24. 1. Z bodů 5 a 6 vyplývá, že použití libovolné statistiky  $T_n, R^2$  nebo  $F$  vede na ekvivalentní test významnosti regrese.

2.  $R^2$  poskytuje hrubou představu o kvalitě modelu, čím je blíže 1, tím lépe přímka prokládá data (nicméně je třeba jisté obezřetnosti, jak uvidíme později).

3.  $F$  lze chápat jako statistiku pro test významnosti velkých hodnot  $R^2$ .

Výsledky se většinou uvádí v tabulce ANOVA:

Source	df	SS	MS	F
Regression	1	SSR	MSR=SSR	$\frac{MSR}{MSE}$
Residual	$n - 2$	SSE	$MSE = \frac{SSE}{n-2} = s_n^2$	
Total	$n - 1$	SST		

$$R^2 = \frac{SSR}{SST}$$

Kde **source** je zdroj součtu čtverců, **df** počet stupňů volnosti příslušný danému součtu čtverců, **SS** počet čtverců a **MS** ( $MS = \frac{SS}{df}$ ) "mean squares".

POZNÁMKA 2.25.  $H_0 : \beta_1 = 0$  je zamítnul, pokud  $F > F_{1-\alpha}(1, n-2)$ . V tomto jednorozměrném případě je to ekvivalentní  $t$ -testu, neboť  $F = T^2$ .

**Věta 2.26.** Mějme  $e_1, \dots, e_n$  iid  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ . Za platnosti  $H_0 : \beta_1 = 0$  je splněno, že

$$\frac{SSR}{\sigma^2} \sim \chi^2(1), \quad \frac{SSE}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2), \quad \frac{SST}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1).$$

POZNÁMKA 2.27. Proto v tabulce ANOVA 2.7 uvádí df po řadě  $1, n-2, n-1$ . Používají se však i v případě jiného rozdělení chyb. Představit si je lze takto:

1.  $SSE = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i^2$ , na  $n$ -rezidní  $\hat{e}_1, \dots, \hat{e}_n$  máme 2 podmínky  $\sum_{i=1}^n \hat{e}_i = 0$  a  $\sum_{i=1}^n x_i \hat{e}_i = 0$ . Z toho vyplývá, že mají  $n-2$  stupňů volnosti.
2.  $SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2$ ...  $y_i - \bar{y}_n$  musí splňovat  $\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n) = 0$ , a proto má  $n-1$  stupňů volnosti.
3.  $SSR = SST - SSE$ , a počet stupňů volnosti je roven  $(n-1) - (n-2) = 1$ .

*Důkaz.* V důkazu věty ?? jsme ukázali, že  $SSR = \hat{\beta}_1^2 S_{xx}$ , takže  $\frac{SSR}{\sigma^2} = \left( \frac{\hat{\beta}_1 \sqrt{S_{xx}}}{\sigma} \right)^2$ , víme, že  $\hat{\beta}_1 \sim \mathcal{N}\left(\beta_1, \frac{\sigma^2}{S_{xx}}\right)$  a tedy  $(\hat{\beta}_1 - \beta_1) \frac{\sqrt{S_{xx}}}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . Pro  $\beta_1 = 0$  tedy

$$\hat{\beta}_1 \frac{\sqrt{S_{xx}}}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0, 1) \Rightarrow \frac{SSR}{\sigma^2} \sim \chi^2(1).$$

Zároveň také  $\frac{SSE}{\sigma^2} = \frac{(n-2)s_n^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2)$  (viz dříve) a nezávisí na  $\hat{\beta}_1$ . Z toho vyplývá, že  $\frac{SSR}{\sigma^2}$  a  $\frac{SSE}{\sigma^2}$  jsou nezávislé. Dále platí, že

$$\frac{SST}{\sigma^2} = \frac{SSR}{\sigma^2} + \frac{SSE}{\sigma^2} \Rightarrow \frac{SST}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1).$$

□

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

POZNÁMKA 2.28.  $R^2$  statistika - pozor na zjednodušení kvality modelu.

1. Nízké hodnoty  $R^2$  nemusí znamenat, že regresní model není významný. V datech jen může být velké množství nevysvětlitelné náhodné variability. Například opakování hodnoty regresoru  $x$  snižují hodnotu  $R^2$  oproti modelům s různými  $x$ .
2. Velké hodnoty  $R^2$  mohou být způsobeny velkým měřítkem dat ( $S_{xx}$  je velká). Platí totiž, že

$$\mathbb{E}(R^2) \approx \frac{\beta_1^2 S_{xx}}{\beta_1^2 S_{xx} + \sigma^2},$$

což je rostoucí funkce  $S_{xx}$ .

Velký rozptyl  $(x_1, \dots, x_n)$  může mít za následek velké  $R^2$  a přitom nic neříká o kvalitě modelu.

$\mathbb{E}(R^2)$  je také rostoucí funkcí  $\beta_1^2$ . Modely s *velkou* směrnici tedy budou mít obecně větší  $yRMR^2$ , než modely s "malou" směrnici.

Při hodnocení kvality modelu potřebujeme více kritérií. Mezi ně patří například

1. "velké"  $R^2$ ,
2. "velké"  $F$  nebo  $|T|$  hodnoty,
3. "malé" hodnoty  $s_n^2$  vzhledem k  $\bar{y}_n$ .

Další kritéria budeme probírat později.

PŘÍKLAD 2.29. Velká hodnota  $R^2$  indikuje přibližně lineární vztah mezi  $x$  a  $y$ , ale vysoký stupeň korelace nemusí znamenat příčinný vztah. data: 1924-1937

$y_i$  - počet mentálních onemocnění na 100000 obyvatel Anglie.

$x_i$  - počet rádií v populaci.

model -  $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i$ .

$$\hat{\beta}_0 = 4.5822, \quad \hat{\beta}_1 = 2.2042, \quad R^2 = 0.984,$$

tzv. velmi významný lineární vztah mezi  $x$  a  $y$ . Závěr by mohl být, že rádia způsobují mentální onemocnění. I když by to mohla být pravda, nabízí se věrohodnější vysvětlení, a to takové, že  $x$  i  $y$  rostou lineárně s časem, tzn.  $y$  roste lineárně s  $x$ .

Rádia byla s časem dostupnější, lepší diagnostické procedury umožňovaly identifikovat více lidí s mentálními problémy.