

# **01RAD**

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

22. října 2020

# Obsah

<b>1 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 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 . . . . .	17
2.5 IS pro $\beta_0, \beta_1$ . . . . .	18
2.6 TH pro $\beta_0, \beta_1$ . . . . .	19
2.6.1 Test významnosti interceptu . . . . .	20
2.7 ANOVA přístup pro testování . . . . .	20
2.8 Regrese skrz počátek . . . . .	25
2.8.1 Odhadování a testy v případě $\beta_0 = 0$ . . . . .	26
2.8.2 Ad 1 . . . . .	28
2.8.3 Ad 2 . . . . .	29
2.8.4 Ad 3 - Analýza reziduí . . . . .	31
2.9 Grafy reziduí . . . . .	32

# 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 úrovně), 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).

Rozdelení  $Y_i$  je  $Y_i \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x, \sigma^2)$ , 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

$$\sum_{i=1}^n Y_i - n\beta_0 - \beta_1 \sum_{i=1}^n x_i = 0,$$

$$\beta_0 = \bar{Y}_n - \beta_1 \bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i - \beta_1 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i.$$

## 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

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

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 logaritmickou 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 rozdíly

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

nazýváme **rezipua** (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 **rezipuální 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 rezipuálních 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. sestrojit 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

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

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

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

a tedy

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

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

## 1 SME – regresní analýza

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

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

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = 30, \quad \bar{Y}_n = 348, \quad \sum_{i=1}^n X_i Y_i = 57140, \quad \sum_{i=1}^n X_i^2 = 13300,$$

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

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n X_i Y_i - 5\bar{X}_n \bar{Y}_n}{\sum_{i=1}^n X_i^2 - 5\bar{X}_n^2} = 0.561,$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{X}_n = 331.16,$$

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

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

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 ( $\beta_0 \sim \mathcal{N}(\dots)$ ,  $\beta_1 \sim \mathcal{N}(\dots)$ ,  $e \sim \mathcal{N}(\dots)$ ,  $Y \sim \mathcal{N}(\dots)$ ) stačí tedy určit střední hodnotu a rozptyl.

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

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

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

protože  $\text{D}(Y) = \text{D}(e) = \sigma^2$ .

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

## 1 SME – regresní analýza

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  $X = 35^\circ C$  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  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$  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

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

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

## 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

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

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

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

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

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

□

## 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 tady 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 nezáviselých 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  $e_1, \dots, e_n$  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 reziduů 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. Ted' se ale nazývají odhad metodou nejmenších čtverců LSE (least squares estimators). Existuje více měr 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. Nechť  $e_1, \dots, e_n$  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 odhad parametrů  $\beta_0, \beta_1$  získáme minimalizací

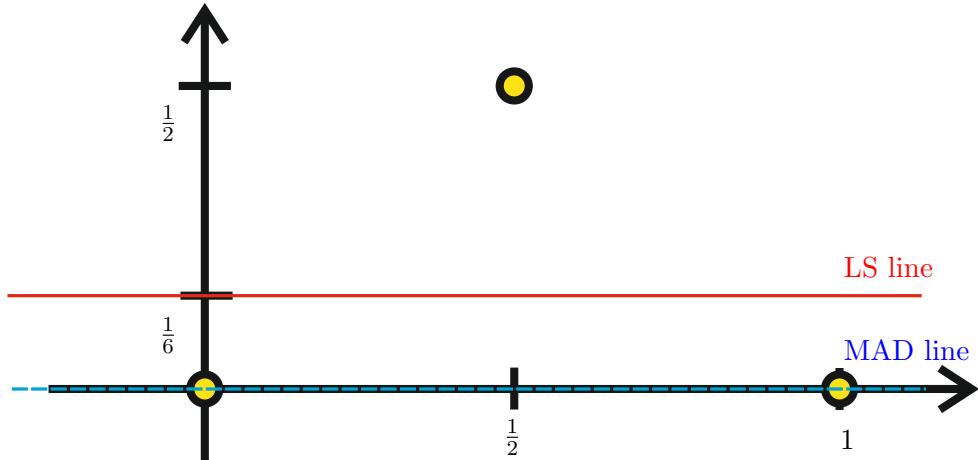
$$A = \sum_{i=1}^n |y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i| \quad \dots \quad \text{MAD (minimum absolute deviation).}$$

Zde budou odhady jiné než u LSE.

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

$$\text{MLE: } \beta_0 = \beta_1 = 0, \quad A = 0.5, \quad \hat{y} = 0$$

$$\text{LSE: } \bar{x} = \frac{1}{2}, \bar{y} = \frac{1}{6}, \quad \sum_{i=1}^n x_i^2 = \frac{5}{4}, \quad \sum_{i=1}^n x_i y_i = \frac{1}{4}, \quad \beta_1 = 0, \beta_0 = \frac{1}{6}$$



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  $D[X] < +\infty$

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

$$\mathbb{E}[s^2] = D[s] + \mathbb{E}[s]^2$$

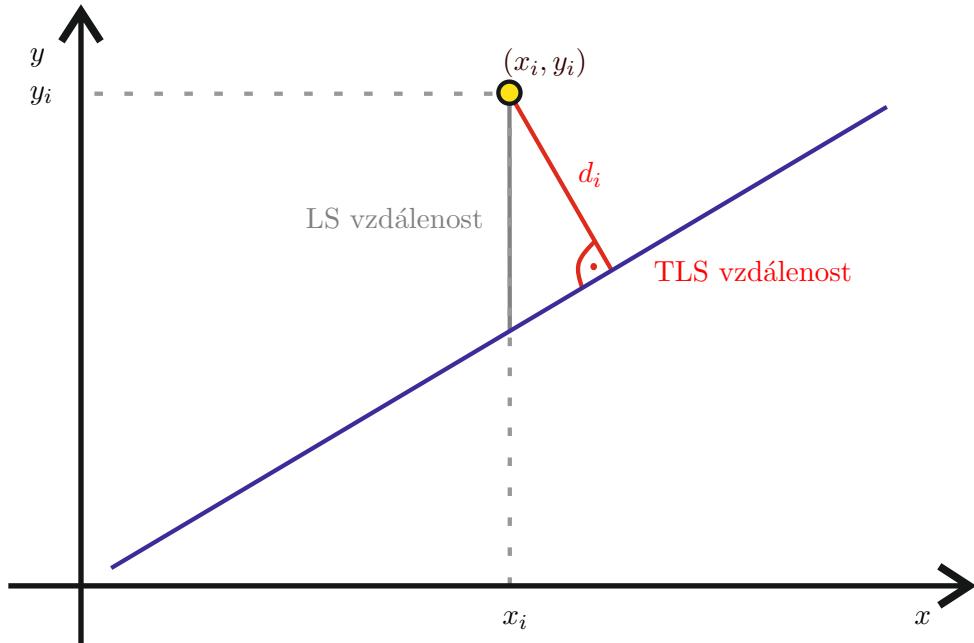
$$\mathbb{E}[s]^2 \leq \sigma^2 \quad \mathbb{E}[s] \leq \sigma \tag{2.1}$$

a rovnost nastává pokud  $D[s] = 0$ .

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

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.



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:

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

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  $\hat{\beta}_1$

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

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.

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

**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.

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i) &= \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0) = \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_0) + x_0 \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_1) \\ \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_1) &= \frac{1}{s_{xx}} \sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x}_n) \underbrace{\text{Cov}(Y_i, Y_j)}_{=0 \text{ pro } i \neq j} = \frac{\sigma^2(x_i - \bar{x}_n)}{s_{xx}} \\ \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_0) &= \text{Cov}(Y_i, \bar{Y}_n - \bar{x}_n \hat{\beta}_1) = \text{Cov}(Y_i, \bar{Y}) - \bar{x}_n \text{Cov}(Y_i, \hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{n} - \frac{\bar{x}_n \sigma^2 (x_i - \bar{x}_n)}{s_{xx}} \end{aligned}$$

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

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

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

□

**Tvrzení 2.10.** Nechť platí předpoklady věty 1 a nechť  $e_1, \dots, e_n$  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.* Vyplýne 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:

$$\begin{aligned}\sigma^2(\hat{\beta}_0) &= s_n^2 \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{s_{xx}} \right] = s_n^2 \delta_0 \\ \sigma^2(\hat{\beta}_1) &= \frac{s_n^2}{s_{xx}} = s_n^2 \delta_1,\end{aligned}$$

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  $i = 1, \dots, n$ .

**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  $E\hat{\beta}_1 = \beta_1$ , tedy

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

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

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

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

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Sečteme prvních  $n$  rovnic

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

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

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n c_i x_i - \lambda_1 \sum_{i=1}^n x_i - \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 &= 0 \\ \Rightarrow \lambda_1 \sum_{i=1}^n x_i + \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 &= 1 \\ -\lambda_2 \bar{x}_n \cdot n \bar{x}_n + \lambda_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 &= 1 \\ \lambda_2 \left( \sum_{i=1}^n x_i^2 - n \bar{x}_n^2 \right) &= 1 \Rightarrow \lambda_2 = \frac{1}{s_{xx}} \quad \text{a} \quad \lambda_1 = -\frac{\bar{x}_n}{s_{xx}} \end{aligned}$$

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 poskytuje 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:

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

**Poznámka 2.15.**

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Tedy

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

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

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

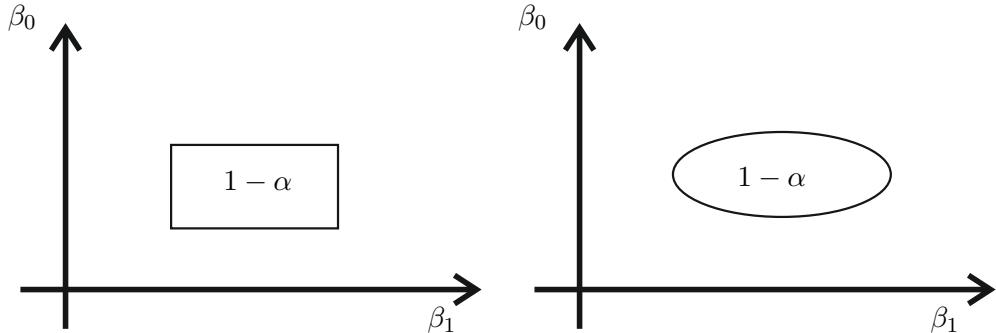
a tedy  $(\hat{\beta}_i \pm t_{1-\alpha/2}(n-2)\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i))$  je  $100(1-\alpha)\%$  IS pro  $\beta_i, i=0,1$ .

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 tvaru 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 konstruují simultánní IS pro oba parametry.



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. Otázku 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 nezamítнемe  $H_0$ , závěr bude, že  $x$  nevysvětuje nic z variability  $y$  a není v modelu významné. Pokud zamítнемe  $H_0$ , znamená to, že  $x$  je významné.

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

- 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 ří, 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.  $H_1 : \theta \neq \theta_0 \Rightarrow (\underline{\theta}, \bar{\theta})$  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.

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

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

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

Otzáka 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 datta, 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).

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

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

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

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

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

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

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

regresi sum of squares, regresní součet čtverců. Podíl

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

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 zamítlí, pokud bude  $R^2 \approx 1$ . Protože každá monotonní funkce  $R^2$  vede na ekvivalentní test, budeme uvažovat statistiku

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

**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

$$1. \sum_{i=1}^n \hat{e}_i = 0,$$

$$2. \bar{\hat{y}}_n = \bar{y}_n,$$

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

*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 Jednorozměrná lineární regrese

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  $R^2 = \rho^2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , kde

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

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

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

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

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

neboť

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

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.  $\hat{y}_i = \underbrace{\hat{\beta}_0}_{=\bar{y}_n} + \hat{\beta}_1 x_i = \bar{y}_n - \hat{\beta}_1 (\bar{x}_n - x_i)$ . 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

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

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

□

**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  $R^2$ .

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

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

Výsledky se většinou uvádí v tabulce ANOVA:

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

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

POZNÁMKA 2.25.  $H_0 : \beta_1 = 0$  je zamítelný, 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

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

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.  $\text{SSE} = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i^2$ , na  $n$ -reziďní  $\hat{e}_1, \dots, \hat{e}_n$  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.  $\text{SST} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 \dots y_i - \bar{y}_n$  musí splňovat  $\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n) = 0$ , a proto má  $n - 1$  stupňů volnosti.
3.  $\text{SSR} = \text{SST} - \text{SSE}$ , a počet stupňů volnosti je roven  $(n - 1) - (n - 2) = 1$ .

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

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

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

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

□

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  $x$  snižuje hodnotu  $R^2$  oproti modelům s různými  $x$ .

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

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* směrnicí tedy budou mít obecně větší  $yRM R^2$ , než modely s ”malou” směrnicí.

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.

**POZNÁMKA 2.30.** korelace VS příčinnost

- **Příčinná spojitost** - i když je příčinná spojitost mezi  $x$  a  $y$  korelace samotná nám neřekne, zda  $x$  ovlivňuje  $y$  nebo naopak.
- **Skrytá příčinnost** - skrytá veličina  $z$  ovlivňuje  $x$  i  $y$ , což způsobuje jejich korelovanost.
- **Confounding factor** - skryté proměnné  $z$  i  $x$  ovlivňují  $y$ , výsledek tedy závisí i na  $z$ .
- **Coincidence** - korelace je náhodná.

## 2.8 Regrese skrz počátek

Existují případy, kdy přípustný model vyžaduje  $\beta_0 = 0$ , tj.

$$Y_i = \beta_1 x_i + e_i, \quad \text{kde } i = 1, \dots, n$$

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

PŘÍKLAD 2.31.

- Je to předem známo na základě nějakých fyzikálních úvah

$$\mathbb{E}[Y_0] = \beta_0 = 0$$

potom nemá smysl odhadnout  $\beta_0$ , protože to obecně sníží přesnost odhadu  $\sigma^2$  a tedy i  $\beta_1$

- Na začátek předpokládáme, že  $\beta_0 \neq 0$  a t-test nezamítne hypotézu  $H_0 : \beta_0 = 0$ , potom  $\beta_0$  může být z modelu odstraněn.

POZNÁMKA 2.32. V praktických situacích si často nemůžeme být jisti, že model platí i blízko počátku. Část statistiků trvá na přitomnosti interceptu v modelu, i když je nevýznamný.

Položit  $\beta_0$  apriorně, může nýt chybné i když  $\mathbb{E}[Y_0] = 0$ . Pokud totiž nevíme jistě, že model je lineární na okolí 0, volba  $\beta_0 = 0$  může vést k vychýleným odhadům  $\beta_1$ , pokud jsou nezávislé proměnné daleko od  $x = 0$ .

—————PICTURE—————

### 2.8.1 Odhad a testy v případě $\beta_0 = 0$

LSE parametru  $\beta_1$  dostaneme minimalizací  $S = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_1 x_i)^2$  ve tvaru:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i x_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2},$$

pokud  $e_1, \dots, e_n$  i.i.d.  $N(0, \sigma^2)$ , potom  $\mathbb{E}[\hat{\beta}_1] = \beta_1$  a  $D[\hat{\beta}_1] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ . Takže  $\hat{\beta}_1 \sim N(\beta_1, \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2})$

a  $s_n^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-1} = \frac{SSE}{n-1}$  je nestranný odhad  $\sigma^2$ . Dále  $\frac{SSE}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1)$  a nezávisí na  $\hat{\beta}_1$ .  $H_0 : \beta_1 = 0$  lze otestovat za pomoci statistiky:

$$T = \frac{\frac{\hat{\beta}_1}{s_n}}{\sqrt{\sum x_i^2}} \sim t(n-1)$$

$$100(1-\alpha)\% \text{ IS pro } \beta_1 \text{ je } (\hat{\beta}_1 \pm t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-1) \frac{s_n}{\sqrt{\sum x_i^2}})$$

- Zatím je vše podobné jako pro případ  $\beta_1 \neq 0$ .
- Rozdíl je ale v tabulce ANOVA a v míře dobré shody, problém je, že neplatí rozklad  $SST = SSR + SSE$  neboť součet reziduí  $\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})$  nemusí být 0 a tedy  $\bar{\hat{y}}_n \neq \bar{y}_n$ . Odvodíme nový rozklad, který platí v obou případech, dokážeme ho ale jen pro  $\beta_0 = 0$

**Věta 2.33.** *V modelu s  $\beta_0 = 0$  platí*

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Důkaz.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i^2 &= \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i + \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 + 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i \\ \text{z rovnice } \frac{dS}{d\beta_1} &= 0 \quad \text{dostaneme} \quad \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_1 x_i) x_i = 0 \\ &\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i = 0 \quad \text{Q. E. D.} \end{aligned}$$

□

Pokud vezmeme  $\sum y_i^2$  jako míru variability v datech, analogie  $R^2$  statistiky bude

$$\begin{aligned} R^2 &= \frac{\sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2}{\sum_{i=1}^n y_i^2} \quad \Leftrightarrow \quad 1 - R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2}{\sum_{i=1}^n y_i^2} = \frac{\sum_{i=1}^n \hat{e}_i^2}{\sum_{i=1}^n y_i^2} \\ &= \text{definujeme } F = \frac{(n-1)R^2}{1-R^2} \text{ potom} \\ F &= \frac{\sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2}{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} = \frac{\hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_i^2}{s_n^2} = T^2 \end{aligned}$$

vztah mezi  $R^2$ ,  $F$  a  $T^2$  je tedy stejný jako pro  $\beta_0 \neq 0$ .

**POZNÁMKA 2.34.** Tato definice  $R^2$  se ale v praxi moc nepoužívá, protože neumožňuje přímé srovnání modelů bez a s interceptem.

$$\begin{aligned} \beta_0 = 0 \quad : \quad R^2 &= 1 - \frac{\text{SSE}}{\sum_{i=1}^n y_i^2} & \beta_0 \neq 0 \quad : \quad R^2 &= 1 - \frac{\text{SSE}}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2} \\ \text{obecně ale } \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 &< \sum_{i=1}^n y_i^2, \text{ R}^2 \text{ v modelu s } \beta_0 = 0 \text{ tedy bude větší než R}^2 \text{ modelu s } \beta_0 \neq 0 \text{ i když jsou jejich SSE srovnatelné.} \end{aligned}$$

- Definice vhodné  $R^2$  pro  $\beta_0 = 0$  vyvolává jistou kontroverzi a existuje několik verzí.
- Možná volba je  $R^2 = (\rho(y_I, \bar{y}_I))^2$ , kde  $\bar{y}_I = (\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n)$  protože tato vlastnost platí i pro případ  $\beta_0 = 0$ .
- Další možnost je srovnat modely pomocí hodnot  $s_n^2$ . (preferuje se model s nejnižší hodnotou  $s_n^2$ )

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Source	df	SS	MS	F
Regression	1	$\sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2$	$\text{MSR} = \frac{\text{SSR}}{1}$	$\frac{\text{SSR}}{s_n^2}$
Residual	$n - 1$	$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$	$\text{MSE} = \frac{\text{SSE}}{n-1}$	
Total	$n$	$\sum_{i=1}^n y_i^2$		
		$R^2 = \rho^2(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}})$		

Tabulka 2.1: Tabulka ANOVA pro  $\beta_0 = 0$ .

### Predikce

Jakmile máme model, často bývá cílem odhadnout hodnoty veličiny  $Y_0$  pro nové  $x_0$ , které není v původních datech. Budeme uvažovat dva typy predikce:

1. predikce střední hodnoty  $\mu_0 = \mathbb{E}[Y_0]$  v bodě  $x_0$ ,
2. predikce hodnoty nového pozorování  $Y_0$  v bodě  $x_0$ .

Pro oba typy použijeme bodový odhad

$$\hat{Y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0.$$

Intervalové odhady se ale budou lišit.

#### 2.8.2 Ad 1

Protože je  $\mu_0 = \beta_0 + \beta_1 x_0$  vlastně parametr, lze pro něj odvodit IS (za předpokladu normality chyb).

Spočteme tedy  $D(\hat{Y}_0)$ . Dosazením odhadů  $\hat{\beta}_0$  a  $\hat{\beta}_1$  dostaneme  $\hat{Y}_0 = \bar{y} + \hat{\beta}_1(x_0 - \bar{x})$  a

$$D\hat{Y}_0 = D(\bar{Y}) + (x_0 - \bar{x})^2 D(\hat{\beta}_1) + 2(x_0 - \bar{x}) \underbrace{\text{Cov}(\bar{Y}, \hat{\beta}_1)}_{=0} = \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\sigma^2(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right].$$

Nahrazením  $\sigma^2$  statistika  $s_n^2$  dostaneme odhad  $D(\hat{Y}_0)$  ve tvaru

$$\hat{\sigma}^2(\hat{Y}_0) = s_n^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right].$$

$\hat{\sigma}(\hat{Y}_0)$  se obvykle nazývá **standardní chyba predikce v bodě**  $x_0$ . Jsou-li  $e_1, \dots, e_m$  iid  $\mathbb{N}(0, \sigma^2)$ , platí, že

$$\hat{Y}_0 \sim \mathbb{N}\left(\mu_0, \underbrace{\sigma^2 \left[ \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]}_{\sigma^2(\hat{Y}_0)}\right)$$

a tedy

$$\frac{\hat{Y}_0 - \mu_0}{\sigma(\hat{Y}_0)} \sim \mathbb{N}(0, 1).$$

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

Celkem tedy

$$T = \frac{\frac{\hat{Y}_0 - \mu_0}{\sqrt{\sigma^2 \left( \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right)}}}{\sqrt{\frac{(n-2)s_n^2}{\sigma^2} \frac{1}{n-2}}} = \frac{\hat{Y}_0 - \mu_0}{\sqrt{s_n^2 \left( \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right)}} = \frac{\hat{Y}_0 - \mu_0}{\hat{\sigma}^2(\hat{Y}_0)} \sim t(n-2).$$

Vyjádřením získáme  $100(1-\alpha)\%$  IS pro  $\mu_0$  ve tvaru

$$\hat{Y}_0 \pm t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{\sigma}^2(hY_0).$$

**POZNÁMKA 2.35.** Z tvaru IS je vidět, že bude nejkratší pro  $x_0 = \bar{x}$  a s rostoucí vzdáleností  $|x_0 - \bar{x}|$  se prodlužuje.

- Speciálně potom čím dále jsme od oblasti, kde jsou naše data  $x$ , tím méně spolehlivé jsou naše predikce.
- Je třeba opatrnosti při predikci hodnot  $Y$  mimo interval  $(\min x_i, \max x_i)$ .

### 2.8.3 Ad 2

Intervalové odhady pro  $Y_0$  nejsou IS, protože  $Y_0$  není parametr. Říká se jim **intervaly predikce**. Potřebujeme rozptyl  $Y_0 - \hat{Y}_0$ , pokud je nené pozorování  $Y_0$  nezávislé na  $Y_i, i \in \hat{n}$ , potom

$$D(Y_0 - \hat{Y}_0) = \underbrace{DY_0}_{\sigma^2} + D\hat{Y}_0 + 0 = \sigma^2 \left[ 1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right].$$

Odhad tohto rozptylu bude  $s_p^2$ , kde

$$s_p = s_n \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}.$$

Za předpokladu normality chyb pak

$$T = \frac{Y_0 - \hat{Y}_0}{s_n \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}} = \frac{Y_0 - \hat{Y}_0}{s_p} \sim t(n-2).$$

Vyjádřením získáme  $100(1-\alpha)\%$  interval predikce pro  $Y_0$  ve tvaru

$$\hat{Y}_0 \pm t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2)s_p.$$

**POZNÁMKA 2.36.** Přesnost predikce

- roste s rostoucím  $n$  a rostoucím rozsahem  $x$  naměřeným pomocí  $S_{xx}$ ,
- klesá s rostoucím  $|x_0 - \bar{x}|$ .

Pokud můžeme předem zvolit  $x_1, \dots, x_n$ , lze přesnost predikce zvýšit volbou dostatečně rozptýlených hodnot  $x$ . To ale může zvyšovat  $R^2$  a někdy vést k horšímu modelu.

To je **základní rozpor v regresní analýze**:

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

- dobrý model nemusí poskytovat dobré predikce,
- dobré predikce mohou vycházet z méně přesných modelů.

**Poznámka 2.37.** Odvozené výsledky platí za předpokladu normality chyb. Protože jsou ale za podmínek regularity odhady  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$  asymptoticky normální, IS pro  $\mathbb{E}[Y_0]$  budou fungovat (jsou použitelné i pro velká  $n$ ). IP pro  $Y_0$  ale závisí na normalitě chyb i pro velká  $n$ , mohou tedy být nepřesné pro nenormální chyby.

**Příklad 2.38** (Ověření adekvátnosti modelu). Ověření adekvátnosti modelu je důležitá součást analýzy. Měla by být provedena dříve, než budeme interpretovat parametry modelu nebo přijímat nějaké závěry založené na modelu.

Všechny výsledky týkající se  $\beta_0, \beta_1$  byly odvozeny za předpokladu **linearity modelu** a některé za předpokladu **normality chyb**.

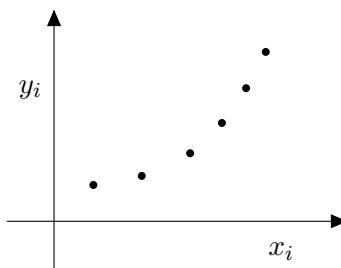
Bylo by tedy dobré mít testy ověřující linearitu.

Základní procedury jsou následující:

- 1) Prozkoumání **scatter plotu** dvojic  $(x_i, y_i)$ . Příklad lze vidět na obrázku 2.1. Takový scatter plot může indikovat, že lepší model bude

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + e_i.$$

Scatter plot ale může být zavádějící, pokud je odklon od linearity způsoben spíše chybějící



Obrázek 2.1: Scatter plot naměřených dat.

proměnnou než polynomiální závislostí na  $x$ .

### 2) Analýza hodnot testovacích statistik.

- Např. malá hodnota  $R^2$  společně s významem hodnot???  $t$ -statistiky pro parametry  $\beta_1$  obecně naznačuje, že skutečný model obsahuje i jiné proměnné  $x$ ,
  - velká hodnota  $R^2$  a významná  $t$ -statistika ale samo o sobě neznamená, že je model lineární.
- 3) **Obrázky reziduí.** Je to efektivní diagnostický nástroj. Rezidua odhadují, kolik variability v datech zůstne po odstranění lineární části v  $x$ . Dá se také očekávat, že jejich hodnoty budou užitečné pro detekci odchylek od normality.

**Příklad 2.39.** Analýza scatter plotů a obrázků reziduí je dost subjektivní. Bylo by dobré mít nějaký objektivní analytický nástroj pro ověření linearity modelu. Bohužel nejsou k dispozici skoro žádné takové nástroje. Pro většinu dat jsou v praxi nejvíce využívány metody 1) - 3).

Jinak je tomu u navržených experimentů typu industriálních nebo klinických studií, kde existuje doporučený analytický test, tzv. *lack of fit* test (LOFT). Ten předpokládá, že máme více pozorování pro jednu  $x_i$ .

### 2.8.4 Ad 3 - Analýza reziduí

Intuitivně, pokud je náš model správný, měla by se rezidua chovat jako náhodný výběr z  $\mathbb{N}(0, \sigma^2)$ . Pokud se bude zdát, že se tak nechovají, bude to znamenat neadekvátnost modelu. Později ukážeme grafický nástroj. Nejprve ale začneme vlastnostmi reziduů.

**Věta 2.40.** *Nechť  $\hat{e}_i$  jsou rezidua modelu (\*) odhadnutého metodou nejmenších čtverců. Potom platí:*

1.  $\mathbb{E}\hat{e}_i = 0, \quad i = 1, \dots, n$
2.  $D\hat{e}_i = \sigma^2 = \sigma^2 \left[ 1 - \left( \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right) \right] \approx \sigma^2 \text{ pro velká } n$
3.  $\text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{e}_j) = -\sigma^2 \left[ 1 - \left( \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x} - x_i)(\bar{x} - x_j)}{S_{xx}} \right) \right]$
4.  $\text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{Y}_i) = 0 = 0, \quad i = 1, \dots, n$
5. Pokud jsou  $e_1, \dots, e_n$  iid  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ , potom platí:

$$\hat{Z}_i = \frac{\hat{e}_i}{\sigma_{\hat{e}_i}} \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

*Důkaz.* 1.  $\hat{e}_i = Y_i - \hat{Y}_i$ , takže  $\mathbb{E}(\hat{e}_i) = \mathbb{E}Y_i - \mathbb{E}\hat{Y}_i$ , ale  $\mathbb{E}\hat{Y}_i = \mathbb{E}(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i = \mathbb{E}Y_i$

2.

$$D\hat{e}_i = D(Y_i - \hat{Y}_i) = DY_i + \underbrace{D\hat{Y}_i}_{\sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]} - 2 \underbrace{\text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i)}_{\sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]} = \sigma^2 \left[ 1 - \left( \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right) \right]$$

3.

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{e}_j) &= \text{Cov}(Y_i - \hat{Y}_i, Y_j - \hat{Y}_j) = \underbrace{\text{Cov}(Y_i, Y_j)}_{=0} - \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_j) - \text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_j) + \text{Cov}(\hat{Y}_i, \hat{Y}_j) \\ \text{Cov}(\hat{Y}_i, \hat{Y}_j) &= \text{Cov}(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i, \hat{\beta}_0 + x_j \hat{\beta}_1) = \underbrace{D(\hat{\beta}_0)}_{\sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}} \right]} + (x_i + x_j) \underbrace{\text{Cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)}_{-\frac{\sigma^2 \bar{x}}{S_{xx}}} + x_i x_j \underbrace{D(\hat{\beta}_1)}_{\frac{\sigma^2}{S_{xx}}} = \\ &= \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}} - \frac{(x_i + x_j)\bar{x}}{S_{xx}} + \frac{x_i x_j}{S_{xx}} \right] = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{S_{xx}} \right] \end{aligned}$$

Podobně bychom dostali

$$\text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_j) + \text{Cov}(\hat{Y}_i, Y_j) = 2\sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{S_{xx}} \right]$$

$$\text{takže } \text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{e}_j) = -\sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{S_{xx}} \right].$$

4.

$$\begin{aligned}\text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{Y}_i) &= \text{Cov}(Y - i - \hat{Y}_i, \hat{Y}_i) = \underbrace{\text{Cov}(Y_i, \hat{Y}_i)}_{=\sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]} - \underbrace{\text{D}(\hat{Y}_i)}_{=\text{Cov}(\hat{Y}_i, \hat{Y}_i) = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]} = 0\end{aligned}$$

5.  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \implies \hat{e}_i \sim \mathcal{N}(\cdot, \cdot)$ , protože  $\hat{e}_i$  je LK  $Y_1, \dots, Y_n$

- 1)  $\implies \mathbb{E}\hat{e}_i = 0$
- 2)  $\implies \text{D}\hat{e}_i = \sigma_{\hat{e}_i}^2$   
 $\implies \frac{\hat{e}_i}{\sigma_{\hat{e}_i}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$

□

POZNÁMKA 2.41. Z bodu 3) věty plyne, že  $\text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{e}_j) \approx 0$  pro velké  $n$ . Pokud jsou testy  $e_i$  iid  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ , měla by se standardizovaná rezidua  $\hat{Z}_i = \frac{\hat{e}_i}{\sigma_{\hat{e}_i}}$  chovat pro velké  $n$  jako náhodný výběr z  $\mathcal{N}(0, 1)$  rozdělení. V praxi ale budeme potřebovat odhad  $\sigma^2$  pro výpočet  $\hat{Z}_i$ .

Nejznámější procedura: odhadnout  $\sigma^2$  pomocí  $s_n^2$ , potom

$$\hat{z}_i = \frac{\hat{e}_i}{s_n \sqrt{1 - \left( \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right)}} \quad \text{standardizovaná rezidua}$$

by se opět pro velká  $n$  měla chovat jako NV z  $\mathcal{N}(0, 1)$ .

POZNÁMKA 2.42.  $\hat{e}_i$  se užívají pro grafickou analýzu.

Jiná třída reziduí – PRESS rezidua (? metody zkoumání reziduí):

ozn.  $\hat{\beta}_{0(-i)}, \hat{\beta}_{1(-i)}$  odhadu parametrů  $\beta_0, \beta_1$ , pokud je vynecháno  $i$ -té pozorování. Pak  $i$ -té PRESS reziduum je definováno jako

$$\hat{e}_{(-i)} = \hat{Y}_i - \hat{Y}_{(-i)}, \quad \text{kde } \hat{Y}_{(-i)} = \hat{\beta}_{0(-i)} + x_i \hat{\beta}_{1(-i)}.$$

Podrobněji se jim budeme věnovat později.

## 2.9 Grafy reziduí

- Histogram reziduí (náhled normality reziduí).
- Kvantilový graf (QQ plot) standardizovaných reziduí – seřadíme dle velikosti:  $\hat{r}_{(1)} \leq \hat{r}_{(2)} \leq \dots \leq \hat{r}_n$  a vyneseeme oproti  $\Phi^{-1}((i - \frac{1}{2})\frac{1}{n})$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Body by měly ležet přibližně na přímce ( $\mathbb{E}(e_i) \approx \Phi^{-1}((i - \frac{1}{2})\frac{1}{n})$  pro normální chyby).
- Použití: ověření normality, detekce odlehlych pozorování (obr. 3.6 str. 1077 GLM).
- Standardizovaná rezidua  $\times$  jednotlivým vysvětlujícím proměnným  $x - \hat{r}_i$  nezávisí na  $\sigma$ , graf  $\hat{r}_i \times x_i$  lze použít pro detekci nelinearity nebo nekonstantního rozptylu.
- Standardizovaná rezidua  $\hat{r}_i \times$  predikovaným hodnotám  $\hat{y}_i - \text{Cov}(\hat{e}_i, \hat{Y}_i) = 0$ , tedy  $\hat{e}_i(\hat{r}_i) \times \hat{Y}_i$  by měly být nekorelované, pokud platí model (\*). Tzn. graf  $\hat{r}_i \times \hat{y}_i$  by měl být náhodně rozptýlený kolem osy  $x$ , navíc  $\hat{r}_i$  by měla ležet v  $(-3, 3)$  ( $\hat{r}_i \approx \mathcal{N}(0, 1)$ ).

Obrázky....

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

- Standardizovaná rezidua  $\times$  pořadí pozorování – možná detekce řadové korelace mezi pozorováními.

Obrázek....

Předpokládejme, že kromě  $y_i$  máme pro každé  $i \in \hat{n}$  k dispozici také  $m$  nezávislých proměnných  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}$ . Pak získáme model

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{ij} + e_i, \quad i \in \hat{n},$$

kde  $e_1, \dots, e_n$  jsou **nezávislé (nekorelované)** chyby a  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ . Na základě pozorování  $(x_{i1}, \dots, x_{im}, y_i)$ ,  $i \in \hat{n}$  chceme odhadnout parametr  $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m)^T$  (proložení dat  $m+1$  dimenzionální nadrovinou). Předpokládejme, že  $n > m+1$ , tj. že máme více dat, než parametrů. Maticově můžeme tento stav zapsat jako

$$\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T, \quad \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^T, \quad \mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^T.$$

Označme

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & x_{n1} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

jako **matici modelu** (regresní matici, !!něco matrix, nepřečtu to???). Dostaneme tak model ve tvaru (důležitému)

$$\mathbf{Y}_{n \times 1} = \mathbf{X}_{n \times (m+1)} \beta_{(m+1) \times 1} + \mathbf{e}_{bn \times 1}. \quad (2.2)$$

Nyní budeme předpokládat, že  $e_1, \dots, e_n$  jsou nezávislé a  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ , tzn.  $\mathbf{e} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$  a  $\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{X}\beta, \sigma^2 I_n)$ .

Věrohodnostní funkce je potom ve tvaru

$$\begin{aligned} L(\beta, \sigma^2) &= f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \mu_i)^2} = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n}{2}}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_i)^2} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n}{2}}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^T (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})} = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n}{2}}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)}, \end{aligned}$$

kde  $\mu_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{ij}$  a  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_n)^T = \mathbf{X}\beta$ .

Pro pevné  $\sigma^2$  je

$$\max_{\beta} L(\beta, \sigma^2) \Leftrightarrow \min_{\beta} \underbrace{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)}_{g(\beta)}$$

je opět pomocí derivací, ukážeme algebraický přístup.

**Věta 2.43.** Uvažujme model 2.2 a nechť  $\mathbf{e} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$ . Potom  $\hat{\beta}$  je MLE  $\beta$  právě tehdy, když  $\hat{\beta}$  je řešením soustavy rovnic

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (\text{soustava normálních rovnic}).$$

Je-li matice  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  singulární, má tato soustava jednoznačné řešení ve tvaru

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

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

*Důkaz.*  $\Leftarrow$  Ukážeme, že každé řešení  $\hat{\beta}$  soustavy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  minimalizuje  $g(\beta)$  a pro každé  $\beta$  platí, že

$$g(\beta) = (\mathbf{y} - \mathbf{X} \eta^T (\mathbf{y} - \mathbf{x} \beta)) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2 \underbrace{\mathbf{y}^T \mathbf{X} \beta}_{\hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}} + \text{beta}^T \mathbf{X} \mathbf{X} \beta = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2 \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta + \beta^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta$$

má platit i pro  $\hat{\beta}$ :

$$g(\hat{\beta}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2 \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta} + \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta}$$

a tedy

$$g(\beta) - g(\hat{\beta}) = \beta^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta - 2 \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta + \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta} = (\mathbf{X} \beta - \mathbf{X} \hat{\beta})^T (\mathbf{X} \beta - \mathbf{X} \hat{\beta}) = \quad (2.3)$$

$$= (\mathbf{X}(\beta - \hat{\beta}))^T (\mathbf{X}(\beta - \hat{\beta})) = \langle \mathbf{X}(\beta - \hat{\beta}), \mathbf{X}(\beta - \hat{\beta}) \rangle \geq 0, \quad \forall \beta, \quad (2.4)$$

tedy  $\hat{\beta}$  minimalizuje  $g(\beta)$  a je tedy MLE parametru  $\beta$ .

$\Rightarrow$  Předpokládejme, že  $\hat{\beta}_1$  minimalizuje  $g(\beta)$  (je tedy MLE). To potom znamená, že  $g(\hat{\beta}_1) \leq g(\beta)$ ,  $\forall \beta$ , speciálně  $g(\hat{\beta}_1) \leq g(\hat{\beta})$ , kde  $\hat{\beta}$  je řešení soustavy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ . Z rovnice 2.4 vyplývá, že  $g(\hat{\beta}_1) \geq g(\hat{\beta})$ . Celkem tedy  $g(\hat{\beta}_1) = g(\hat{\beta})$ . Dosazením do 2.4 dostaneme, že

$$0 = g(\hat{\beta}_1) - g(\hat{\beta}) = \langle \mathbf{X}(\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}), \mathbf{X}(\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}) \rangle$$

a tedy  $\mathbf{X}(\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}) = \mathbf{0}$ . Potom ale vynásobením  $\mathbf{X}^T$  zleva dostaneme, že

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta}_1 \underbrace{\mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta}}_{\mathbf{X}^T \mathbf{y}} = 0 \Rightarrow \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\beta}_1 = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

a  $\hat{\beta}_1$  splňuje soustavu  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ .

Aby byl důkaz korektní, je třeba ukázat, že soustava  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  má vždy alespoň 1 řešení. Pokud existuje  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ , není co dokazovat, řešení máme přímo. Co když je ale  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  singulární?

□

**Lemma 2.44.** Soustava lineárních rovnic  $\mathbb{A}x = \mathbf{y}$  má řešení právě tehdy, když  $\langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = 0$  pro všechna  $\mathbf{z}$  splňující  $\mathbb{A}\mathbf{z} = \mathbf{0}$ .

**Věta 2.45.** Soustava normálních rovnic  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  má vždy alespoň jedno řešení.

*Důkaz.* Musíme ukázat, že  $\langle \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = 0$ ,  $\forall \mathbf{z}$  splňující  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{z} = \mathbf{0}$ . Potom  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{z} = \mathbf{0} \Rightarrow \langle \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{z}, \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{X} \mathbf{z}, \mathbf{X} \mathbf{z} \rangle = 0$  a tedy  $\mathbf{X} \mathbf{z} = \mathbf{0}$ . Celkem tedy  $\langle \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{X} \mathbf{z} \rangle = 0$ . Obecně totiž platí, že  $\langle \mathbf{x}, \mathbb{A} \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbb{A}^T \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ . □

**Poznámka 2.46.** Z vět vyplývá, že MLE  $\beta$  může být nalezeno řešením  $m+1$  lineárních rovnic o  $m+1$  neznámých. Málokdy existuje analytické řešení, je třeba použít numerické metody. Matice  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  může být v praktických aplikacích špatně podmíněná, což ovlivňuje numerickou přesnost  $\hat{\beta}$ . Proto se často užívají metody jako Choleského rozklad, QR rozklad, singulární rozklad (SVD).

Odvodili jsme to pro normální chyby. Minimalizace  $g(\beta)$  lze ale použít i pro jiné druhy chyb, potom se  $\hat{\beta}$  nazývá **ordinary least squares estimate (OLS)** (obyčejně nejmenší čtverce). Asi nejužívanější metoda pro oblast  $\beta$ .

Jak poznat, že mají normální rovnice jednoznačné řešení bez nutnosti výpočtu  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ ?

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

**Věta 2.47.** Matici  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  je nesignulární právě tehdy, když jsou sloupce matice  $\mathbf{X}$  LN.

*Důkaz.*  $\Leftarrow$  Sporem. Nechť jsou sloupce  $\mathbf{X}$  LN a matica  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  singulární, tzn.  $\exists c \neq 0$  tak, že  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} c = 0$ . Potom

$$0 = \langle c, \mathbf{X}^T \mathbf{X} c \rangle = \langle \mathbf{X} c, \mathbf{X} c \rangle \Rightarrow \mathbf{X} c = 0, \quad \sum c_i \mathbf{x}_i^c = 0,$$

kde  $c = (c_1, \dots, c_m)^T$  a  $\mathbf{x}_i^c$  je  $i$ -tý sloupec matice  $\mathbf{X}$ . Potom sloupce  $\mathbf{X}$  jsou LZ. Spor.

$\Rightarrow$  Sporem. Předpokládejme, že  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  je regulární a sloupce  $\mathbf{X}$  LZ. Potom existuje  $c \neq 0$  takové, že  $\mathbf{X} c = 0$ ,  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} c = 0$ . Z toho vyplývá, že  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  je singulární. Spor.

□

**Poznámka 2.48.** Pokud  $\mathbf{X}_{nx(m-1)}$ ,  $n > m + 1$ ,  $h(\mathbf{X}) = m + 1$ ,  $\mathbf{e} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_m)$ . Potom existuje jednoznačné řešení normálních rovnic  $\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ .

**Poznámka 2.49.** Pokud jsou sloupce  $\mathbf{X}$  LZ, je  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  sigulární, což je většinou detekováno numerickou metodou výpočtu  $\hat{\beta}$ .

**Poznámka 2.50.** • pokud jsou sloupce  $\mathbf{X}$  LZ, je  $\mathbf{x}^T \mathbf{x}$  singulární, což je většinou detekováno numerickou metodou výpočtu  $\hat{\beta}$

- horší situace je, pokud jsou sloupce  $\mathbf{X}$  ”téměř” LZ  $\rightarrow$  tzv. **multikolinearita** – způsobuje problémy při výpočtu  $\hat{\beta}$ , protože je  $\mathbf{x}^T \mathbf{x}$  ”téměř” singulární, jak ji detekovat probereme na konci přednášky

### Odhad parametru $\sigma^2$

Pro normální chybu získáme MLE  $\sigma^2$  derivací  $\ln L(\beta, \sigma^2)$ , z čehož plyne:

$$\hat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n} SSE = \frac{1}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\beta}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

kde  $\hat{y}_i = (\mathbf{X} \hat{\beta})_i = \mathbf{x}_i^T \hat{\beta}$ ,  $i = 1, \dots, n$

a  $\mathbf{x}_i^T$  značí  $i$ -tý řádek matice  $\mathbf{X}$ . Protože se jedná o vychýlený odhad, používá se obecně odhad

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

a  $s_n = \sqrt{s_n^2}$  jako odhad  $\sigma$  (už není nestranný).

Pro  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$  se také používají statistiky  $s_n^2, s_n$ .

Př. Ex. 5.13, str. 158 (nebo 138? jinak?)

Ex. 5.15, str. 203

**Vlastnosti odhadů**  $\hat{\beta}, s_n^2$

**Věta 2.51.** Nechť  $\hat{\beta}$  je OLS odhad parametru  $\beta$  v modelu (\*\*), kde  $h(\mathbf{X}) = m-1$  a  $e_1, \dots, e_n$  nezávislé,  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ . Potom platí:

1.  $\mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta$  (tj.  $\hat{\beta}$  je nestranný)
2.  $\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$
3.  $\mathbb{E}(s_n^2) = \sigma^2$
4. Pokud navíc  $e_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2), i = 1, \dots, n$ , potom  $\hat{\beta} \sim \mathcal{N}_{m-1}(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})$ . Speciálně  $\hat{\beta}_i \sim \mathcal{N}(\beta_i, \sigma^2 \nu_i)$ , kde  $\nu_i$  je  $i$ -tý diagonální prvek matice  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ .

Důkaz. 1.

$$\begin{aligned} h(\mathbf{X}) = m - 1 &\implies \hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \\ \mathbb{E}\hat{\beta} &= \mathbb{E}[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}] = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbb{E}\mathbf{Y} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta = \beta \end{aligned}$$

2. Značení:  $\mathbf{Y}$  velikosti  $(n \times 1)$  nádoný vektor,  $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \Sigma, \mathbb{A}_{m,n}$  matice, potom  $\text{Cov}(\mathbb{A}\mathbf{X}) = \mathbb{A}\Sigma\mathbb{A}^T$ .

Protože  $\hat{\beta} = \mathbb{A}\mathbf{Y}$ , kde  $\mathbb{A} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ ,  $\hat{\beta}$  je LK  $Y_1, Y_m$  a  $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \sigma^2 \mathbf{I}_n$

$$\text{Cov}\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \sigma^2 \mathbf{I}_n \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}.$$

3. Nejdříve přepíšeme vektor reziduí  $\hat{e} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$  a  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\beta} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} = \mathbb{H}\mathbf{Y}$ , kde  $\mathbb{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$  je tzv. **projekční matici**. Pak  $\hat{e} = \mathbf{Y} - \mathbb{H}\mathbf{Y} = (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{Y}$ .

Dále platí  $(\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X} = \mathbf{0}$ , takže

$$\hat{e} = (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{Y} = (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})(\mathbf{Y}\beta + \mathbf{e}) = \underbrace{(\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{X}\beta}_{=0} + (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{e} = (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{e}$$

Zřejmě  $\mathbb{H}^T = \mathbb{H}$  a  $\mathbb{H}^2 = [\mathbf{X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T] [\mathbf{X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T] = \mathbf{X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T = \mathbb{H}$  a  $(\mathbf{I}_n - \mathbb{H})^2 = \mathbf{I}_n - \mathbb{H}$  (neboli  $\mathbb{H}$  je symetrická a idempotentní?).

$$SSE = (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}})^T (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}) = \hat{e}^T \hat{e} = \hat{e}^T (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})(\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{e} = \mathbf{e}^T (\mathbf{I}_n - \mathbb{H})\mathbf{e} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n g_{ij} e_i e_j,$$

kde  $g_{ij}$  je (i,j)-prvek matice  $(\mathbf{I}_n - \mathbb{H})$ .

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(SSE) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n g_{ij} \underbrace{\mathbb{E}(e_i e_j)}_{\text{Cov}(e_i, e_j)} = [\text{nekorelované: } \mathbb{E}e_i = 0] = \sum_{i=1}^n g_{ii} \mathbb{E}e_i = \sigma^2 \sum_{i=1}^n g_{ii} \\ \sum_{i=1}^n g_{ii} &= \text{tr}(\mathbf{I}_n - \mathbb{H}) = \text{tr}(\mathbf{I}_n) - \text{tr}(\mathbb{H}) = n - \text{tr}(\mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T) = \\ &= n - \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}) = n - \text{tr}(\mathbb{I}_{m+1}) = n - (m+1) \end{aligned}$$

Celkem pak dostáváme  $\mathbb{E}s_n^2 = \frac{1}{n-(m+1)} \mathbb{E}(SSE) = \frac{1}{n-(m+1)} \sigma^2(n - (m+1)) = \sigma^2$ .

## 2 Jednorozměrná lineární regrese

4.  $\hat{\beta}$  e LK  $Y_1, \dots, Y_n$ , nezávislé, normálně rozdělené  $\rightarrow \hat{\beta} \sim \mathcal{N}_{m+1}(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})$ .

□

**Poznámka 2.52.** Vlastnosti projekční matice:

- $\mathbb{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ ,  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbb{H}\mathbf{Y}$ ,  $\mathbb{H}^T = \mathbb{H}$ ,  $(\mathbb{I}_n - \mathbb{H})^T = (\mathbb{I}_n - \mathbb{H})$  – symetrie
- $\mathbb{H}^2 = \mathbb{H}$ ,  $(\mathbb{I}_n - \mathbb{H})^2 = \mathbb{I}_n - \mathbb{H}$  – idempotentnost
- $\mathbb{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$ ,  $\text{tr}(\mathbb{H}) = \sum_{i=1}^n h_{ii} = m + 1$
- $\mathbb{H}(\mathbb{I}_n - \mathbb{H}) = (\mathbb{I}_n - \mathbb{H})\mathbb{H} = \mathbf{0}$ .

**Věta 2.53.** Nechť  $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \mathbf{e}$  je LM (\*\*), kde  $h(\mathbf{X}) = m + 1$  a  $\mathbf{e} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbb{I}_n)$ . Potom

1.  $\hat{\beta}$  a  $s_n^2$  jsou nezávislé náhodné veličiny,
2.  $(n - m - 1) \frac{s_n^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n - m - 1)$ .
3. Jestliže  $v_i = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})_{ii}^{-1}$ , potom  $T_i = \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{s_n \sqrt{v_i}} \sim t(n - m - 1)$ .
4. Nechť  $\mathbb{C} \in \mathbb{R}^{r, m+1}$  takové, že  $h(\mathbf{e}) = r$ . Potom kvadratická forma

$$\frac{q}{\sigma^2} = \frac{(\hat{\beta} - \beta)^T \mathbb{C}^T [C(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbb{C}^T]^{-1} \mathbb{C}(\hat{\beta} - \beta)}{\sigma^2} \sim \chi^2(r).$$