

01RAD

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

23. října 2020

Obsah

1 SME – regresní analýza	1
1.1 Jednorozměrná lineární regrese	1
1.2 Intervaly predikce	5
1.3 Vícerozměrná lineární regrese	6
2 Jednorozměrná lineární regrese	9
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 β_0, β_1	18
2.6 TH pro β_0, β_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

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

β_0 a β_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 σ^2 potřebujeme minimalizovat

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

přes β_0, β_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

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

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. σ^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 σ^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. β_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 β_1 . Podobně pro β_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 β_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 β_1 . Dostaneme tedy $t_{0.975}(5-2) = 3.18$, který dosadíme do vzorečku na výpočet IS pro β_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} (β_0, β_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 $\text{D}(Y) = \text{D}(e) = \sigma^2$.

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

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 β z \mathbf{X} a \mathbf{Y} ani kdyby nebyl přítomný šum ε . (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 β, σ^2 .

Věta 1.5. Pro MLE parametrů β a σ^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 β_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 σ^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*
- β_0, β_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 β_0, β_1 .

Zde máme následující možnosti:

1. Odhadnout β_0, β_1 pomocí metody nezáviselých na rozdělení chyb
2. Udělat věrohodnostní předpoklad o rozdělení chyb, odhadnout β_0, β_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 β_0, β_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 σ^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 σ^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 σ^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 σ^2 (pro libovolné rozdělení e_i), zatímco σ_{MLE}^2 je vychýlený odhad i pro normální rozdělení chyb.

Odhad σ

pro odhad parametru σ 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 β_0, β_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 β_0, β_1 získáme minimalizací

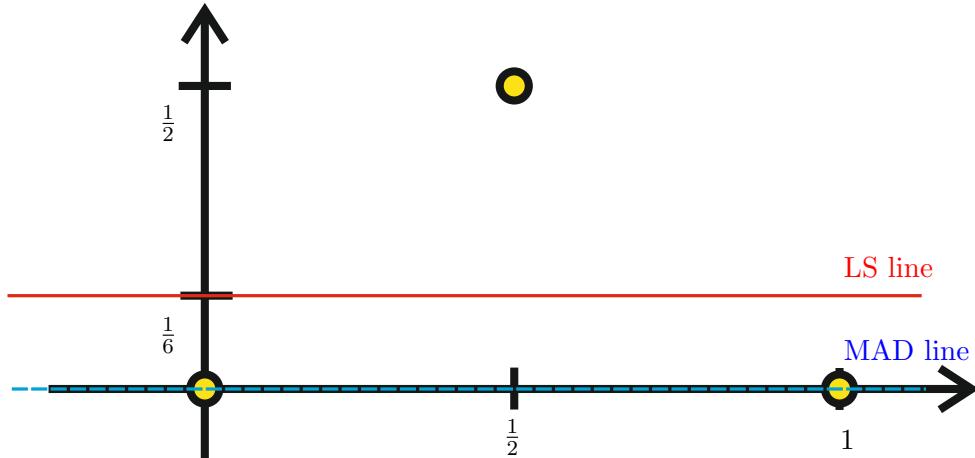
$$A = \sum_{i=1}^n |y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i| \quad \dots \quad \text{MAD (minimum absolute deviation).}$$

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 σ^2 , s_n je vychýlený odhad σ ! 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 $D[X] < +\infty$

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

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

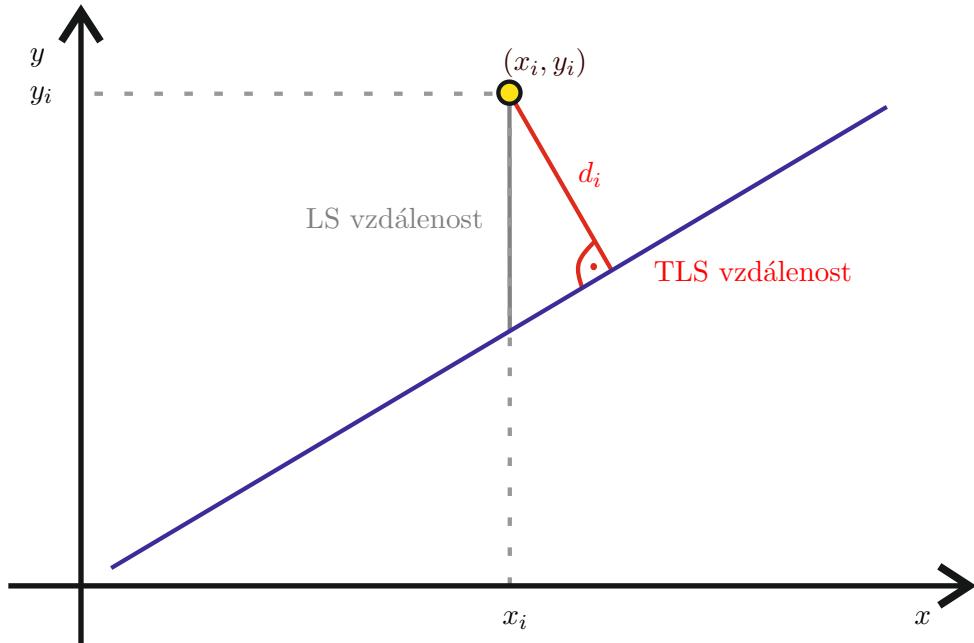
$$\mathbb{E}[s]^2 \leq \sigma^2 \quad \mathbb{E}[s] \leq \sigma \tag{2.1}$$

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 β_0, β_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 σ^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 σ^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 δ_0 a δ_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 β_0, β_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 β 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 β_j .

Důkaz. Ukážeme pro β_1 , pro β_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. β_0, β_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 β_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 λ_1, λ_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 β_0, β_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. β 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 β_i dostaneme

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

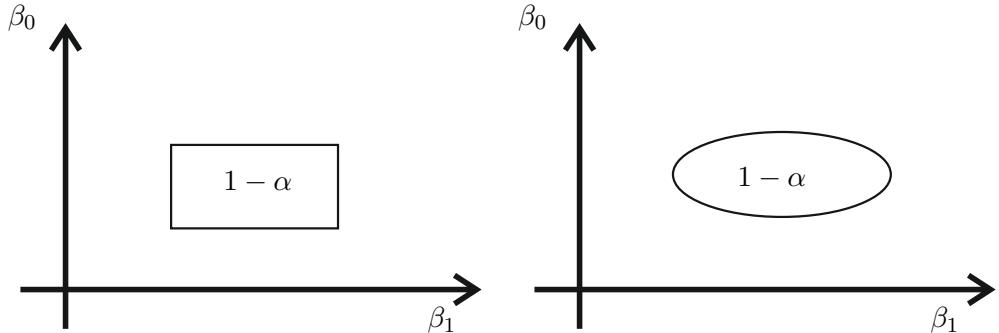
a tedy $(\hat{\beta}_i \pm t_{1-\alpha/2}(n-2)\hat{\sigma}(\hat{\beta}_i))$ je $100(1-\alpha)\%$ IS pro $\beta_i, i=0, 1$.

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

- $100(1-\alpha)\%$ IS pro β_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 β_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 β_0 bude ve většině praktických případů širší než IS pro β_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 β_0, β_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 θ . Pak $W = \{x | \theta_0 \notin (\underline{\theta}, \bar{\theta})\}$ je kritický obor test na hladině α .

$H_0 : \beta_1 = 0$ 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 β_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 β_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 β_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 β_0 , protože to obecně sníží přesnost odhadu σ^2 a tedy i β_1

- Na začátek předpokládáme, že $\beta_0 \neq 0$ a t-test nezamítne hypotézu $H_0 : \beta_0 = 0$, potom β_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 β_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 β_1 , pokud jsou nezávislé proměnné daleko od $x = 0$.

—————PICTURE—————

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

LSE parametru β_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 σ^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 σ^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 μ_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 β_0, β_1 byly odvozeny za předpokladu **linearity modelu** a některé za předpokladu **normality chyb**.

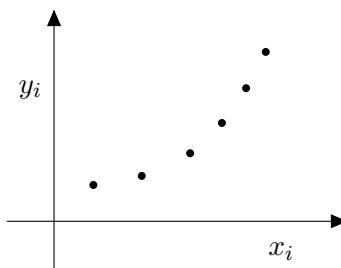
Bylo by tedy dobré mít testy ověřující linearitu.

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 β_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 σ^2 pro výpočet \hat{Z}_i .

Nejznámější procedura: odhadnout σ^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 β_0, β_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 σ , 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 σ^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 β 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 matici $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 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 β platí, že

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

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 β .

\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 β 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)** (obyčejné nejmenší čtverce). Asi nejužívanější metoda pro oblast β .

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 σ^2

Pro normální chybu získáme MLE σ^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 σ (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 β 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 ν_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 $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{r, m+1}$ takové, že $h(\mathbf{e}) = r$. Potom kvadratická forma

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

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

a tedy $\hat{\beta} - \beta = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{e}$

dále víme, že $\hat{\mathbf{e}} = (\mathbb{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{e}$ a vektor $(\hat{\beta} - \beta, \hat{\mathbf{e}})^T$ lze zapsat jako

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \hat{\beta} - \beta \\ \hat{\mathbf{e}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \\ \mathbb{I}_n - \mathbf{H} \end{pmatrix} \mathbf{e} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} \mathbf{e},$$

kde \mathbf{Z} je funkcií pouze $(e_1, \dots, e_n) = \mathbf{e} \sim \mathbb{N}(0, \sigma^2 \mathbb{I}_n) \Rightarrow \mathbf{Z}$ má vícerozměrné normální rozdělení (i když degenerované, protože $\text{Cov}(\mathbf{Z})$ je singulární) abychom ukázali, že $\hat{\beta}$ a $\hat{\mathbf{e}}$ jsou nezávislé.

$(s_n^2 = \frac{1}{n-m-1} \hat{\mathbf{e}}^T \hat{\mathbf{e}})$, tedy i $\hat{\beta}$ a s_n^2 jsou nezávislé)

Poznámka 2.54. $\mathbf{B}\mathbf{B}^T = \mathbb{I}_n - \mathbf{H}$ je singulární, protože $(\mathbb{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = 0$

Stačí nám tedy ukázat, že $\text{Cov}(\hat{\beta}_i, \hat{e}_j) = 0$ pro $i = 0, \dots, m$ a $j = 1, \dots, n$ spočtěme $\text{Cov}(\mathbf{Z})$:

$$\text{Cov}(\mathbf{Z}) = \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} \text{Cov}(\mathbf{e}) (\mathbf{A}^T \mathbf{B}^T) = \sigma^2 \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} (\mathbf{A}^T \mathbf{B}^T) = \sigma^2 \begin{pmatrix} \mathbf{A}\mathbf{A}^T & \mathbf{A}\mathbf{B}^T \\ \mathbf{B}\mathbf{A}^T & \mathbf{B}\mathbf{B}^T \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \left(\text{Cov}(\hat{\beta}_i, \hat{e}_j) \right)_{\substack{i=0, \dots, m \\ j=1, \dots, n}} &= \mathbf{A}\mathbf{B}^T = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbb{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T) = \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T = 0 \end{aligned}$$

2 Jednorozměrná lineární regrese

2. Výsledky z LA:

- $\mathbf{A}_{n \times n}$ symetrická matice \Rightarrow existuje ortogonální matice \mathbf{Q} a diagonální matice Λ tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^T$, sloupce \mathbf{Q} jsou ON vlastní vektory matice \mathbf{A} a diagonální prvky matice Λ jsou ??? odpovídající vlastní čísla.
- $\mathbf{A}_{n \times n}$ idempotentní matice \Rightarrow vlastní čísla jsou pouze 0 nebo 1 $\Rightarrow h(\mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{A})$

V důkazu předchozí věty $(n - m - 1) \frac{s_n^2}{\sigma^2} = \frac{\text{SSE}}{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{e}^T (\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) \mathbf{e}$
protože je $\mathbf{I}_n - \mathbf{H}$ symetrické a idempotentní

$$\mathbf{I}_n - \mathbf{H} = \mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^T \quad \text{kde} \quad \begin{array}{l} \mathbf{Q} \dots \text{ortogonální matice} \\ \Lambda \dots \text{diagonální matice s vlastními čísly } \mathbf{I}_n - \mathbf{H} \end{array}$$

protože vlastní čísla $\mathbf{I}_n - \mathbf{H}$ jsou 0 nebo 1 a $\text{tr}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) = h(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) = n - m - 1$
 Λ může být zapsána ve tvaru:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-m-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

takže

$$\mathbf{e}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{e} = \mathbf{e}\mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^T\mathbf{e} = \mathbf{q}^T\Lambda\mathbf{q} \quad \text{kde} \quad \mathbf{q} = \mathbf{Q}^T\mathbf{e}$$

Věta 2.55. $\mathbf{V} \sim \mathbf{N}_n(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n)$ a \mathbf{Q} je ortogonální matice, potom $\mathbf{Q}\mathbf{V} \sim \mathbf{N}_n(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n)$

tzn. \mathbf{q} je vektor nezávislých $N(0, \sigma^2)$ veličin ($\mathbf{q} \sim \mathbf{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$)
a $\frac{1}{\sigma^2} \mathbf{e}^T (\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) \mathbf{e} = \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{q}^T \Lambda \mathbf{q} = \sum_{i=1}^{n-m-1} \frac{q_i^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n - m - 1)$
je suma druhých mocnin $n - m - 1$ nezávislých $N(0, 1)$ veličin.

3. Z předchozí věty:

$$\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sigma \sqrt{v_i}} \sim N(0, 1) \quad \text{a} \quad \frac{s_n}{\sigma} = \sqrt{\frac{(n-m-1)s_n^2}{n-m-1}} = \sqrt{\frac{\chi^2(n-m-1)}{n-m-1}}$$

a z bodu 1) nezávislost

$$T_i = \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{s_n \sqrt{v_i}} = \frac{\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sigma \sqrt{v_i}}}{\frac{s_n}{\sigma}} \sim t(n - m - 1)$$

4. $\mathbf{C}\hat{\beta} \sim \mathbf{N}_r(\mathbf{C}\beta, \sigma^2 \mathbf{C}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{C}^T)$ a tedy
 $\mathbf{C}(\hat{\beta} - \beta) = \mathbf{C}\hat{\beta} - \mathbf{C}\beta \sim \mathbf{N}_r(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{C}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{C}^T)$
stačí tedy ukázat, že pokud $\mathbf{Z} \sim \mathbf{N}_r(\mathbf{0}, \Sigma)$, potom $\mathbf{Z}^T \Sigma \mathbf{Z} \sim \chi^2(r)$
protože Σ je pozitivně definitní, existuje regulární matice \mathbf{R} taková, že $\Sigma = \mathbf{R}\mathbf{R}^T$
protože $\mathbf{U} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}$, potom $\mathbb{E}\mathbf{U} = \mathbf{R}^{-1}\mathbb{E}[\mathbf{Z}] = \mathbf{0}$
 $\text{Cov}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}^{-1}\Sigma(\mathbf{R}^{-1})^T = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{R}^T(\mathbf{R}^T)^{-1} = \mathbf{I}_r$ tedy $\mathbf{U} \sim \mathbf{N}_r(\mathbf{0}, \mathbf{I}_r)$
takže složky \mathbf{U} jsou nezávislé $N(0, 1)$ rozdělené náhodné veličiny.
 $\mathbf{R}^T \Sigma^{-1} \mathbf{R} = \mathbf{U}^T \mathbf{R}^T (\mathbf{R}^T)^{-1} \mathbf{R} \mathbf{U} = \mathbf{U}^T \mathbf{U} = \sum_i^r U_i^2 \sim \chi^2(r)$
za $\mathbf{R} = \mathbf{C}(\hat{\beta} - \beta)$ a $\Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2} [\mathbf{C}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{C}^T]^{-1}$ Q. E. D.

□

2.9.1 Vlastnosti vektoru reziduí $\hat{\mathbf{e}}$

Věta 2.56. Uvažujeme model $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \mathbf{e}$, kde e_1, \dots, e_n jsou nekorelované a $e_i \sim (0, \sigma^2)$. Nechť $\hat{\beta}$ je OLS β a $\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$ je vektor reziduí. Potom platí:

1. $\mathbb{E}[\hat{\mathbf{e}}] = 0$
2. $\text{Cov}(\hat{\mathbf{e}}) = \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})$
3. pokud navíc $\mathbf{e} \sim \mathbf{N}_n(0, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$, potom $\hat{\mathbf{e}} \sim \mathbf{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}))$
4. jestliže má model intercept, tj. $\beta_0 \neq 0$, potom $\sum_{i=1}^n \hat{e}_i = 0$
5. $\sum_{i=1}^n \hat{e}_i \hat{y}_i = 0$

Důkaz. Ukázali jsme, že $\hat{\mathbf{e}} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{e}$

1. $\mathbb{E}[\hat{\mathbf{e}}] = (\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) \cdot \mathbb{E}[\mathbf{e}] = (\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) \cdot 0 = 0$
2. $\text{Cov}(\hat{\mathbf{e}}) = (\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\text{Cov}(\mathbf{e})(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})^T = \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})$
3. $\hat{\mathbf{e}}$ je LK složek $\mathbf{e} \Rightarrow \hat{\mathbf{e}} \sim \mathbf{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}))$
4. Soustava normálních rovnic $\mathbf{X}^T \mathbf{X}\beta = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ lze zapsat $\mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) = 0$

První rovnice:

$$\sum_{i=1}^n x_{i1} \cdot (y_i - \mathbf{x}_i^T \beta) = 0$$

pro $\hat{\beta}$ tedy platí

$$0 = \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{x}_i^T \hat{\beta}) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i$$

5. Z předchozího bodu platí pro OLS $\hat{\beta}$

$$\mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}) = 0 \quad \text{přenásobením zleva } \hat{\beta}^T$$

$$0 = \hat{\beta}^T \mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}) = \hat{y}^T(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) = \hat{\mathbf{y}}^T \hat{\mathbf{e}} = \sum_{i=1}^n \hat{y}_i \hat{e}_i$$

□

Použitím bodů 4. a 5. dostaneme (stejně jako u jednorozměrné regrese)

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

tedy

$$\text{SST} = \text{SSR} + \text{SSE}$$