线性回归 Linear Regression

一个数值变量的特征

两个变量的关系

$$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i}{n}$$

One-sample t-test

 $Var(X) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2}{n-1}$

Chi-square test

一个数值变量与一 个分类变量的关系

一个数值变量与两 个分类变量的关系

两个数值变量的关系

Two-sample t-test One-way ANOVA

Two-way ANOVA

?

协方差 Covariance

方差 vs 协方差

· 方差: 刻画一个数值变 量偏离其中心的程度

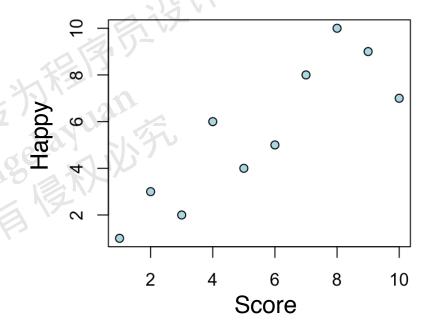
$$Var(X) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2}{n-1}$$

· 协方差: 刻画两个数值 变量共同变化的程度

$$Cov(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{n-1}$$

Score	Нарру
1	1
2	3
3	2
4 5	6
	4
6	5
7	8
8	10
9	9
10	7

• 散点图: 方向、形状、强度、极端值



Score	Нарру
1	1
2	3
3	2
4 5	6
	4
6	5
7	8
8	10
9	9
10	7

$$Cov(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{n-1}$$

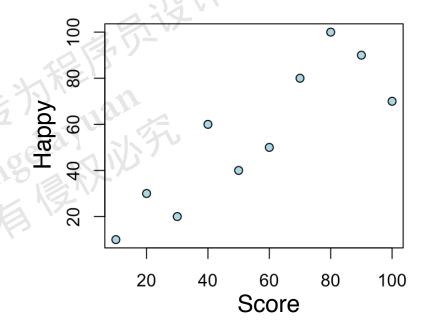
$$\overline{X} = 5.5, \overline{Y} = 5.5$$

$$Cov(X,Y) = \frac{(1-5.5)\times(1-5.5)+\dots+(10-5.5)\times(7-5.5)}{10-1}$$

强?弱?正?负?

Score	Нарру
10	10
20	30
30	20
40	60
50	40
60	50
70	80
80	100
90	90
100	70

• 散点图: 方向、形状、强度、极端值



Score	Нарру
10	10
20	30
30	20
40	60
50	40
60	50
70	80
80	100
90	90
100	70

$$Cov(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{n-1}$$

$$\longrightarrow \bar{X} = 55, \bar{Y} = 55$$

$$Cov(X,Y) = \frac{(10-55)\times(10-55)+\dots+(100-55)\times(70-55)}{10-1}$$

协方差 vs 相关系数

$$Cov(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{n-1}$$

$$r = \frac{Cov(X,Y)}{S_X S_Y}$$
 S_X 变量X的标准差 S_Y 变量Y的标准差

相关Correlation

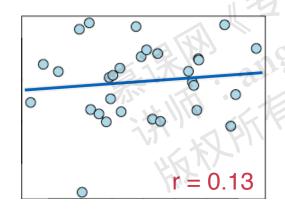
Score	Нарру
1	1
2	3
3	2
4	6
5	4
6	5
7	8
8	10
9	9
10	7

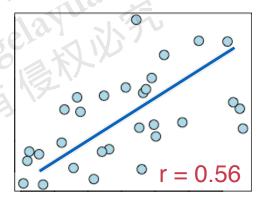
$\longrightarrow Cov(X,Y) = 7.94$
$S_X = 3.03, S_Y = 3.03$
$r = \frac{Cov(X,Y)}{S_X S_Y} = \frac{7.94}{3.03 \times 3.03} = 0.86$
Cov(X,Y) = 794
$S_X = 30.3, S_Y = 30.3$ $r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y} = \frac{794}{30.3 \times 30.3} = 0.86$

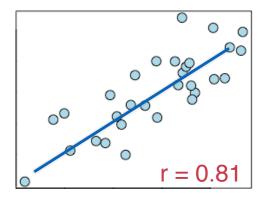
Score	Нарру
10	10
20	30
30	20
40	60
50	40
60	50
70	80
80	100
90	90
100	70

$$r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y}$$

- 描述两个数值变量线性关系的强度和方向
- 取值范围 -1≤r≤1
- · r的绝对值大小代表线性关系的强弱

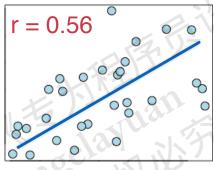


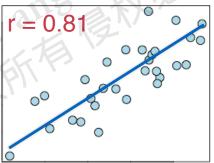


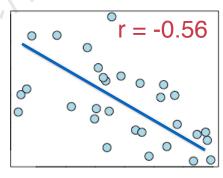


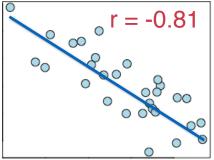
$$r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y}$$

· r的符号代表线性关系的方向



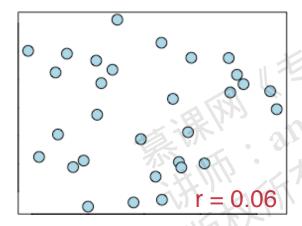


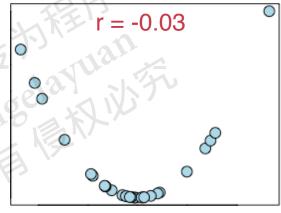


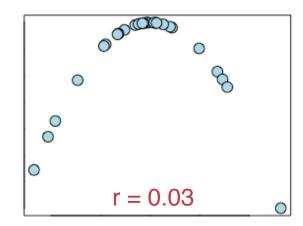


$$r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y}$$

•r=0:没有线性关系≠没有关系

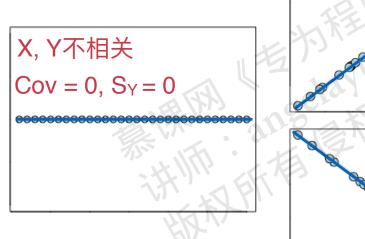


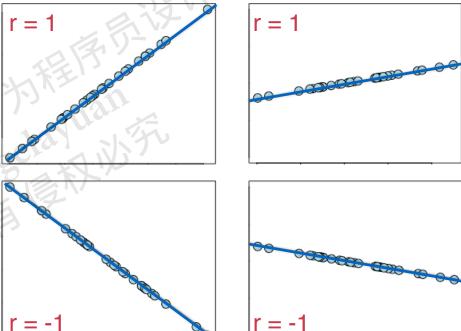




$$r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y}$$

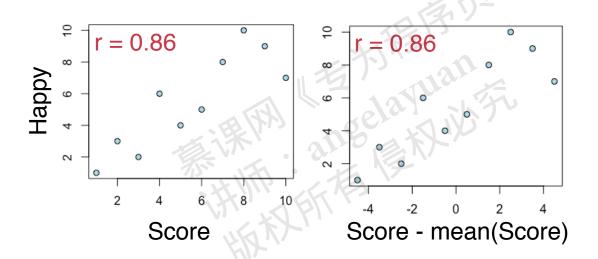
• r = 1: 完美线性正相关; r = -1: 完美线性负相关

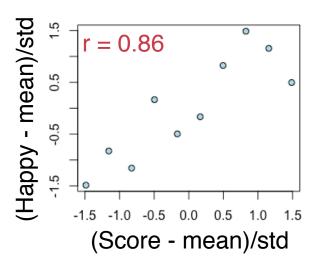




$$r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y}$$

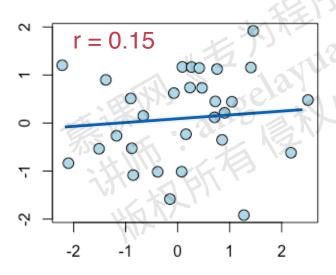
• r没有单位, 不受变量平移伸缩的影响

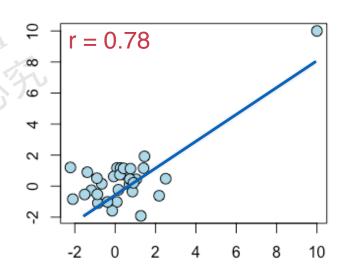




$$r = \frac{Cov(X, Y)}{S_X S_Y}$$

- X,Y的相关系数 = Y,X的相关系数
- · r受极端值影响大





相关的假设检验

X(Score),Y(Happy)的相关系数r = 0.86 X与Y有较强的线性关系

X与Y没有线性关系的时候,是否可能观察到相关系数0.86?

- H₀: r = 0 P(当前结果或更极端结果 I H₀为真)
- H_A: r ≠ 0
- · Ho,Ha中的r是参数
- 题干中的相关系数0.86是样本的函数的一个观察值

相关的假设检验

X(Score),Y(Happy)的相关系数r = 0.86 X与Y有较强的线性关系

X与Y没有线性关系的时候,是否可能观察到相关系数0.86?

•
$$H_0$$
: $r = 0$ $P($ 当前结果或更极端结果 $\mid H_0$ 为真 $)$

• H_A:
$$r \neq 0$$

$$\frac{r}{\sqrt{1 - r^2} / \sqrt{n - 2}} \sim t(n - 2)$$

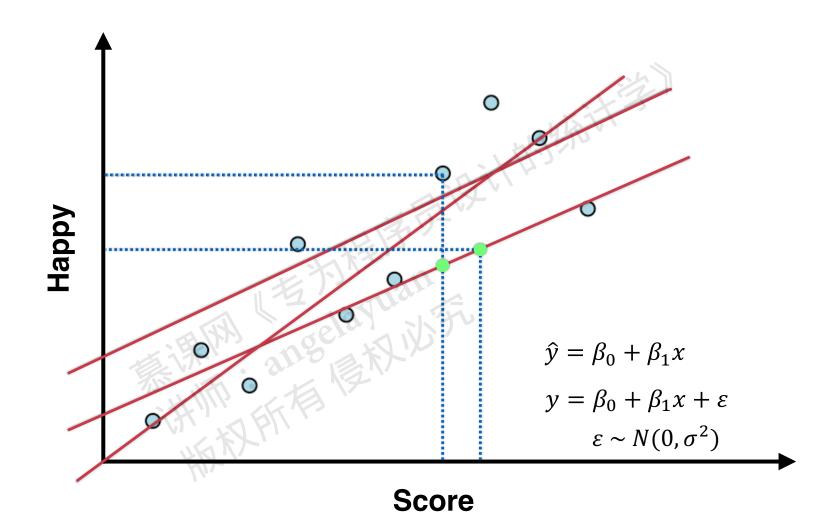
$$\frac{0.86}{\sqrt{1 - 0.86^2} / \sqrt{10 - 2}} = 4.76 \quad \longrightarrow \quad p = 0.0007 \text{ x } 2 \approx 0.001$$

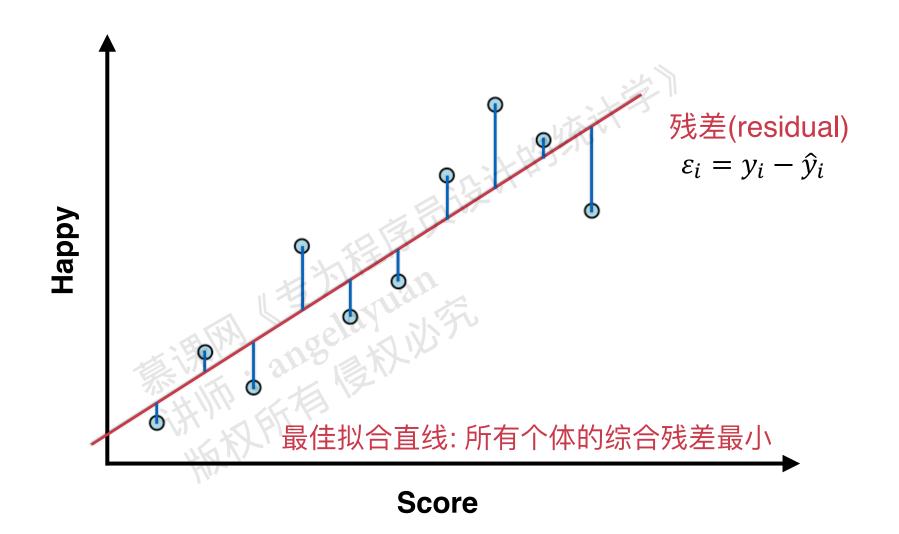
编程理解协方差和相关

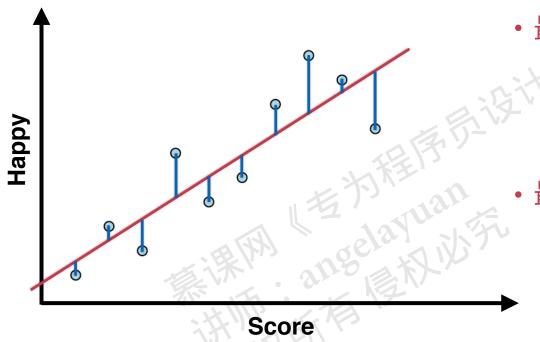
一元线性回归 Simple Linear Regression

一元线性回归

- 相关: 考察两个数值变量之间的线性关系及其统计显著性
- 一元线性回归
 - 两个变量之间的线性关系及其统计显著性
 - 两个变量: 一个因变量, 一个自变量
 - 给定自变量的值, 预测因变量的值







• 最小化所有残差的绝对值的和

$$\sum_{i=1}^{n} |\varepsilon_i| = \sum_{i=1}^{n} |y_i - \hat{y}_i| \quad \mathbf{X}$$

• 最小化所有残差的平方的和

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

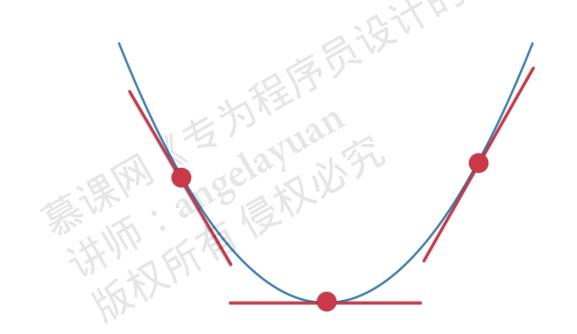
• 最小化所有残差的平方的和

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$
 典型的最小二乘法问题

目标: 求
$$\beta_0,\beta_1$$
, 使得 $J(\beta_0,\beta_1) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$ 最小

方法: 取J关于βο,β1的偏导数,并令它们等于0,求解未知数

方法: 取J关于β₀,β₁的偏导数,并令它们等于0, 求解未知数



方法: 取J关于β₀,β₁的偏导数,并令它们等于0,求解未知数

$$\frac{\partial J}{\partial \beta_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0 \qquad n\beta_0 + (\sum_{i=1}^n x_i) \beta_1 = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$\frac{\partial J}{\partial \beta_1} = -2\sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) x_i = 0$$
 (\sum_{i=1}^n x_i) \beta_0 + (\sum_{i=1}^n x_i^2) \beta_1 = \sum_{i=1}^n x_i y_i
正规方程组

方法: 取J关于β₀,β₁的偏导数,并令它们等于0,求解未知数

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

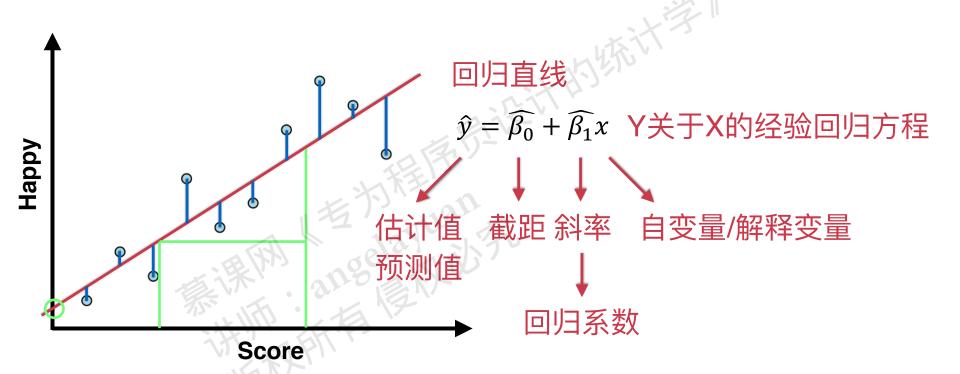
$$(\sum_{i=1}^n x_i)\beta_0 + (\sum_{i=1}^n x_i^2)\beta_1 = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

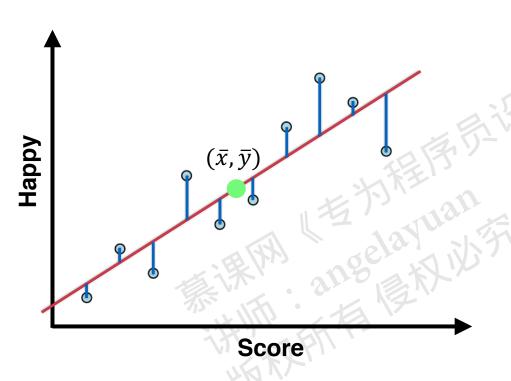
$$\widehat{\beta_0} = \overline{y} - \widehat{\beta_1} \, \overline{x}$$

$$\widehat{\beta_0} = \overline{y} - \widehat{\beta_1} \, \overline{x}$$

$$\widehat{\beta_1} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2}$$
正规方程组

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

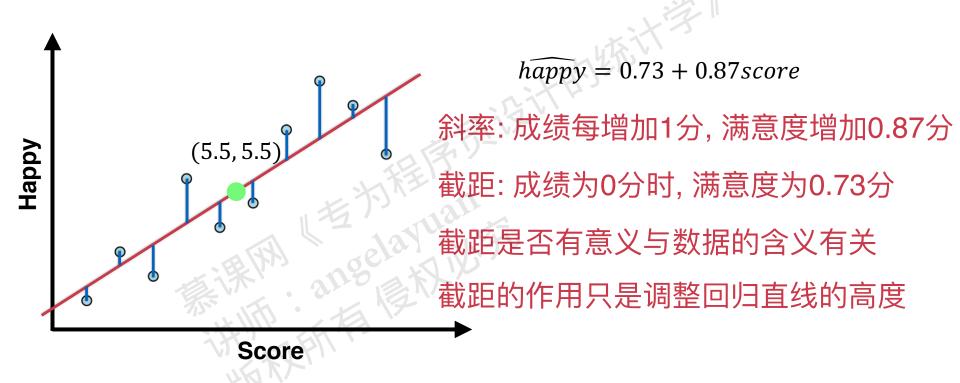




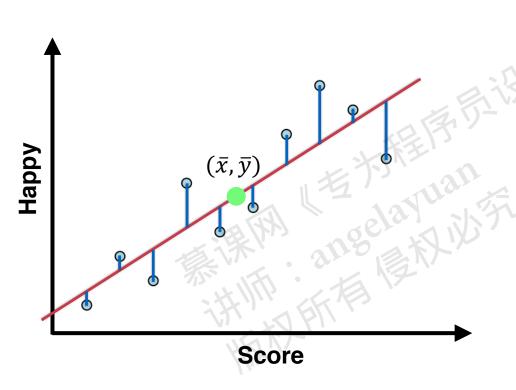
$$\widehat{y} = \widehat{\beta_0} + \widehat{\beta_1} x \longrightarrow \widehat{\beta_0} = \overline{y} - \widehat{\beta_1} \overline{x}$$

$$\widehat{y} = \overline{y} + \widehat{\beta_1} (x - \overline{x})$$

回归直线一定经过点(x均值, y均值)



相关系数与回归系数的关系



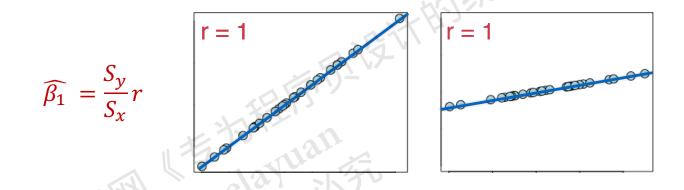
$$\widehat{\beta_1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$$

$$= \frac{(n-1)Cov(x,y)}{(n-1)Var(x)} = \frac{Cov(x,y)}{Var(x)}$$

$$r = \frac{Cov(x,y)}{S_x S_y}$$

$$\widehat{\beta_1} = \frac{Cov(x,y)}{S_x S_y} \times \frac{S_y}{S_x} = \frac{S_y}{S_x} r$$

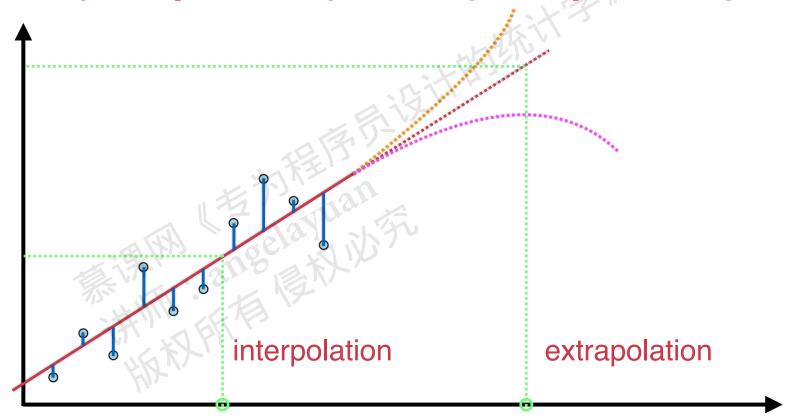
相关系数与回归系数的关系



线性关系的方向和强度一样: 回归直线拟合数据的好坏

左侧斜率大 $(S_y/S_x$ 大), 右侧斜率小 $(S_y/S_x$ 小): x变化一个单位, y变化的大小

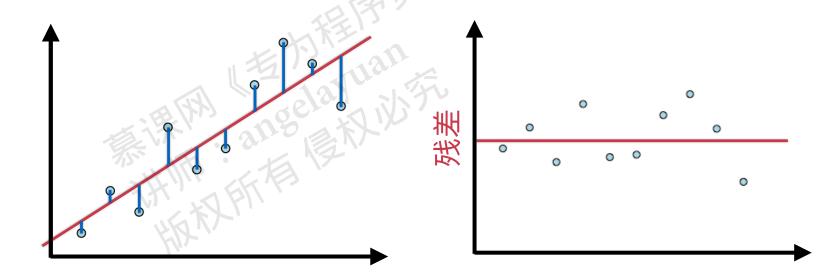
内插(interpolation)与外推(extrapolation)



一元线性回归的前提条件

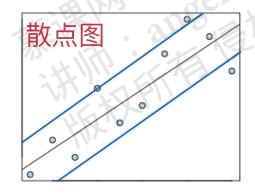
一元线性回归的前提条件

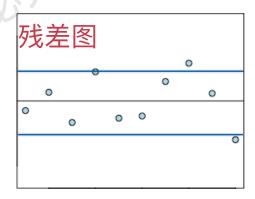
- · 线性(linearity): 自变量和因变量之间的关系是线性的
 - 使用散点图或残差图来检验



一元线性回归的前提条件

- 残差(近似)服从均值为0的正态分布
 - 使用频率直方图来检验
- ·数据点围绕回归直线的变化程度基本不变(variability constant)
 - · 残差围绕直线y=0的变化程度基本不变



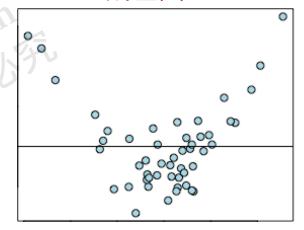


一元线性回归的前提条件

- ·数据点围绕回归直线的变化程度基本不变(variability constant)
 - · 残差围绕直线y=0的变化程度基本不变

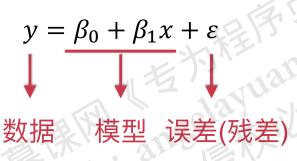
散点图

残差图



回归模型的评价指标

RMSE



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

Root Mean Squared Error

R²

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$$

$$\downarrow \qquad \qquad \downarrow$$
数据 模型 误差(残差)

因变量的变化 🤍

$$\sum (y_i - \bar{y})^2$$

以解释的变化

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

\mathbb{R}^2

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{residual}}{SS_{total}}$$

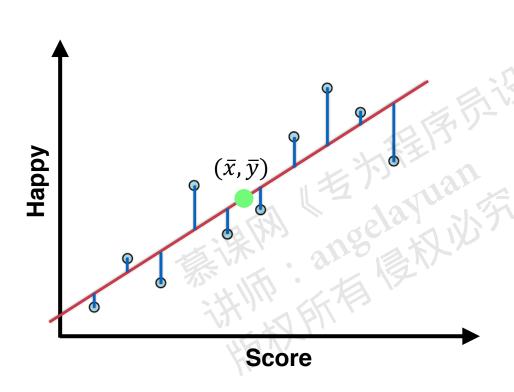
$$=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}$$
 使用 $y=\bar{y}$ 预测产生的错误 Baseline model $0 \le R^2 \le 1$

解释的变化占总变化的百分比

 $= r^{2}$



模型误差的方差的点估计



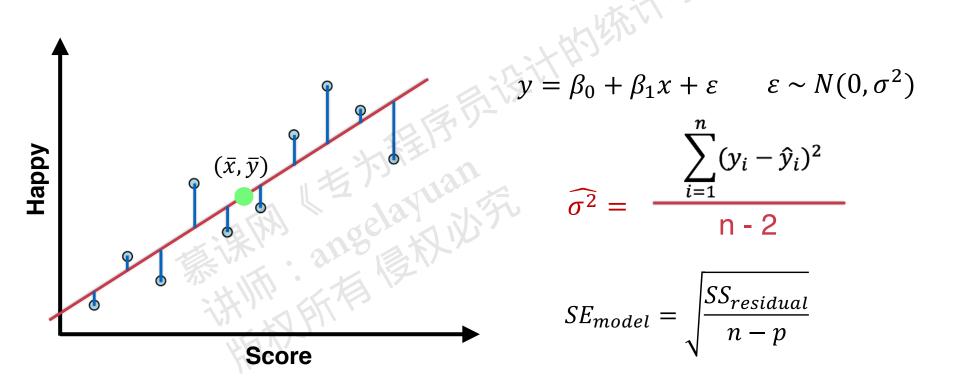
$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \qquad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}$$

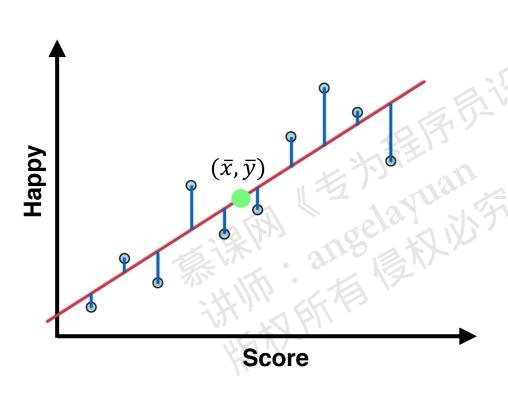
$$\widehat{\sigma^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}$$

自由度 = 样本容量 - 模型参数的个数

模型误差的方差的点估计



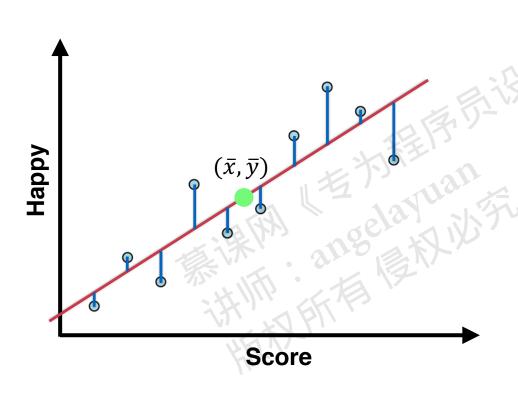
再看相关系数的检验



$$\frac{r}{\sqrt{1-r^2}/\sqrt{n-2}} \sim t(n-2)$$

$$\sqrt{\frac{1-r^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{SS_{residual}/SS_{total}}{n-2}}$$

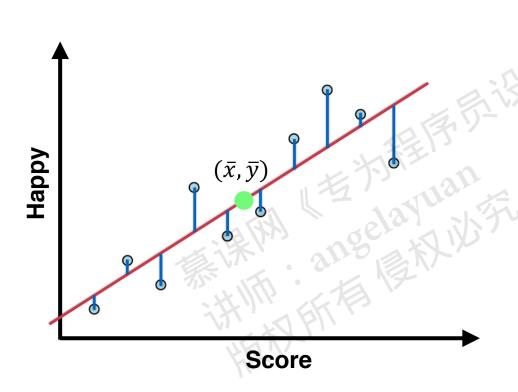
$$= \frac{SE_{model}}{\sqrt{SS_{total}}} = \frac{SE_{model}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}}$$



$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x$$
 两个参数

$$\hat{y} = \widehat{\beta_0} + \widehat{\beta_1}x$$
 两个点估计

通过假设检验来判断参数β₁是否为0,从而得到线性回归方程是否具有实用价值

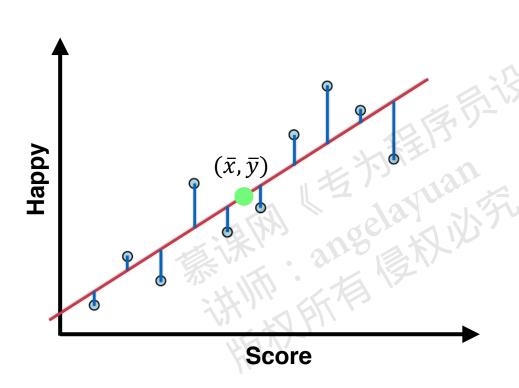


 $H_0: \beta_1 = 0; H_A: \beta_1 \neq 0$

$$\widehat{\beta_1} \sim N(\beta_1, \frac{\sigma^2}{(n-1)Var(x)})$$

$$\widehat{\beta_1} \sim N(\beta_1, (\frac{SE_{model}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}})^2)$$

$$SE_{\widehat{\beta_1}}$$



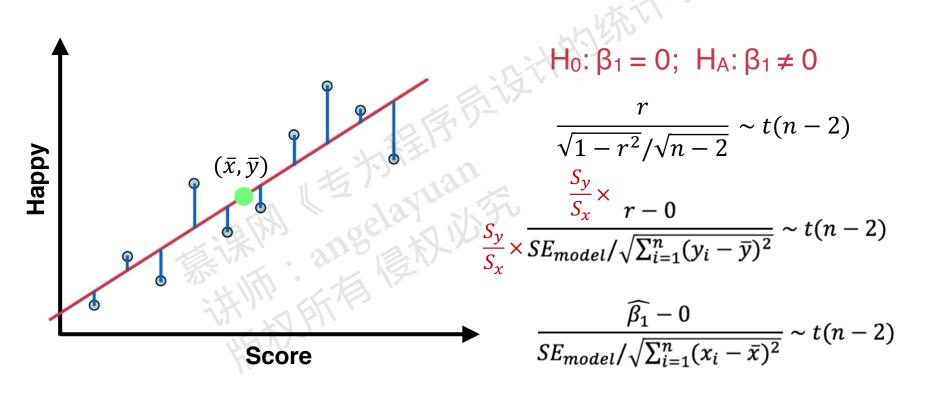
$$H_0: \beta_1 = 0; H_A: \beta_1 \neq 0$$

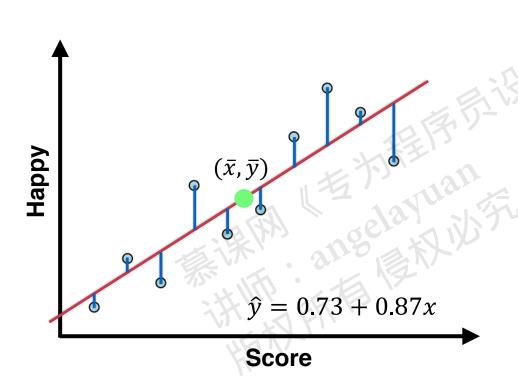
$$\frac{\widehat{\beta_1}-0}{SE_{\widehat{\beta_1}}}\sim t(n-2)$$

$$SE_{\hat{r}} = \frac{SE_{model}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}}$$

$$SE_{\widehat{\beta_1}} = \frac{SE_{model}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}}$$

$$\widehat{\beta_1} = \frac{S_y}{S_x} r$$



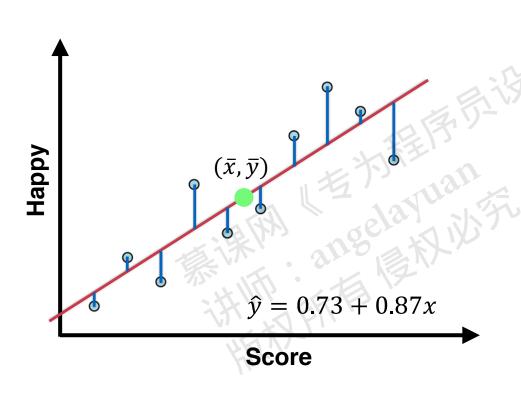


$$H_0: \beta_1 = 0; H_A: \beta_1 \neq 0$$

$$\frac{\widehat{\beta_1} - 0}{SE_{model}/\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \sim t(n-2)$$

$$T = 4.76$$

$$p = 0.0007 \times 2 \approx 0.001$$



 $H_0: \beta_1 = 0; H_A: \beta_1 \neq 0$

等价于

 $H_0: r = 0; H_A: r \neq 0$

另一种视角: ANOVA

$$SS_{model} = SS_{total} - SS_{residual}$$
 df = 自变量个数

因变量的变化

$$\sum_{i=1}^{n}(y_{i}-\bar{y})^{2}$$

模型可以解释的变化

莫型无法解释的变化

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \qquad \mathsf{df} = \mathsf{n} -$$
 参数个数

另一种视角: ANOVA

$$\frac{SS_{model}/1}{SS_{residual}/(n-2)} \sim F(1, n-2)$$

$$\frac{61.96/1}{20.53/(10-2)} = 24.14$$

p = 0.001

编程实现一元线性回归

$$\widehat{\beta_0} = \overline{y} - \widehat{\beta_1} \, \overline{x} \qquad \qquad \widehat{\frac{\beta_1}{SE_{\widehat{\beta_1}}}} \sim t(n-2)$$

$$\widehat{\beta_0} = \overline{y} - \widehat{\beta_1} \, \overline{x}$$

$$\widehat{\beta_1} - 0 \atop SE_{\widehat{\beta_1}} \sim t(n-2)$$

$$\widehat{\beta_1} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2}$$

$$SE_{\widehat{\beta_1}} = \frac{SE_{model}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2}}$$

多元线性回归 Multiple Linear Regression

房价 =
$$β_0$$
 + $β_1$ 面积

房价 =
$$β_0$$
 + $β_1$ 学区房

房价 = $β_0$ + $β_1$ 面积 + $β_2$ 学区房

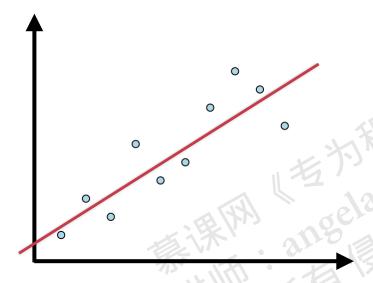
房价 =
$$β_0$$
 + $β_1$ 面积 + $β_2$ 学区房 + $β_3$ 房间数

房价 = $β_0$ + $β_1$ 面积 + $β_2$ 学区房 + $β_3$ 房间数+ $β_4$ 楼层

数值变量

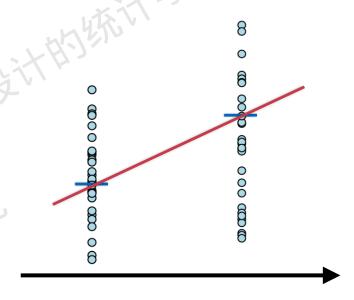
数值变量 分类变量 数值变量 数值变量

房价 = $β_0$ + $β_1$ 面积



面积增加1,房价增加β1

房价 = β_0 + β_1 学区房 1: 是



βο: 非学区房的房价均值

β0+β1: 学区房的房价均值

多元线性回归的系数

房价 = $β_0$ + $β_1$ 面积 + $β_2$ 学区房

目标: 求
$$\beta_0, \beta_1, \beta_2$$
, 使得 $\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ 最小

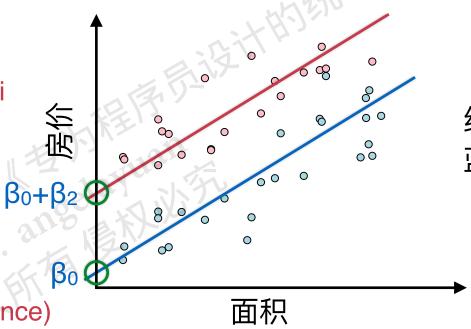
方法: 取J关于β0,β1,β2的偏导数,并令它们等于0, 求解未知数

房价 =
$$β_0$$
 + $β_1$ 面积 + $β_2$ 学区房 $\frac{0: α}{1: £}$

在其他自变量的影响 不变的情况下, 自变量i 增加1, 因变量增加β_i

βί: 偏回归系数

One-way ANCOVA (ANalysis of COVAriance)

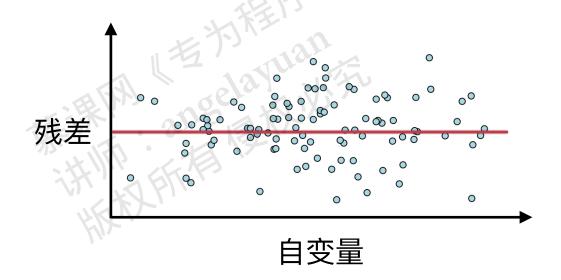


红: 学区房

蓝: 非学区房

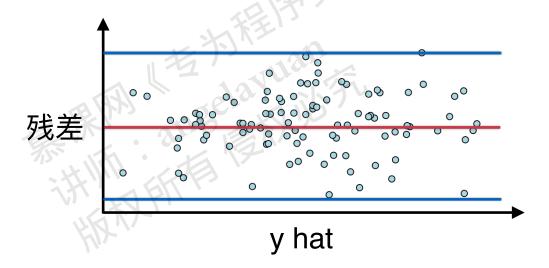
多元线性回归的前提条件

• 线性(linearity): 每个自变量(数值变量)和因变量之间的关系是 线性的; 使用残差图(残差 vs 自变量)来检验



多元线性回归的前提条件

· 残差围绕直线y=0的变化程度不随因变量估计值的变化而变化; 使用残差图(残差 vs y hat)来检验



多元线性回归的前提条件

- 残差(近似)服从均值为0的正态分布; 使用频率直方图来检验
- 残差独立
 - 观测独立
 - · 如果怀疑有时序结构, 可以检查残差图(残差 vs 数据收集顺序)

共线性 (collinearity)

- 如果两个自变量相关,则称这两个自变量共线
- · 自变量(independent variables)之间应该彼此独立
- 模型中存在高度共线的自变量会使得模型难以估计准确
- · 避免加入与模型中已有的自变量高度共线的自变量, 因为该自变量的加入并不能提供有效的新信息, 并且会影响模型的估计

简约性 (parsimony)

- 最简单且有效的模型是最好的
- 奥卡姆剃刀(Occam's Razor)
 - 由哲学家奥卡姆提出的一个解决问题的法则
 - 对于同一个问题有多种理论可以做出同样准确的预测, 那么应该挑选其中使用假设最少的理论

评价多元线性回归模型

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

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{residual}}{SS_{total}}$$

往模型中添加任意自变量都会使R²增加

评价多元线性回归模型

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{residual}}{SS_{total}}$$

往模型中添加任意自变量都会使R²增加

$$R_{adjusted}^2 = 1 - \frac{SS_{residual}}{SS_{total}} \times \frac{n-1}{n-k-1}$$
 k = 自变量个数

R² > adjusted R²

如果往模型中添加的自变量没有提供有效信息, 则adjusted R²不会增加

假设检验

• 对模型的假设检验

$$H_0$$
: $\beta_1 = \beta_2 = ... = \beta_k = 0$

H_A: 至少有一个β不等于0

$$\frac{SS_{model}/k}{SS_{residual}/(n-k-1)} \sim F(k, n-k-1)$$

- F检验的结果显著: 不代表模型对数据的拟合好, 只代表至少有一个自变量的系数不为0
- F检验的结果不显著: 不代表模型中的自变量不能预测因变量, 只代表这些自变量的组合不是一个好模型

假设检验

•对(偏)回归系数的假设检验

 H_0 : β_i = 0, 当其他自变量被包括在模型中时

 H_A : $β_i \neq 0$, 当其他自变量被包括在模型中时

$$\frac{\widehat{\beta_i}}{SE_{\widehat{\beta_i}}} \sim t(n-k-1)$$

单个自变量的贡献

还可以考察自变量的组合的贡献

常用的检验都是回归的一种特殊形式

One sample t-test

Regression model with intercept only

Regression with a categorical explanatory variable

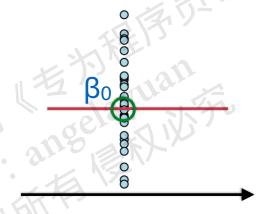
Correlation test explanatory variable

One-way ANOVA Regression with categorical explanatory variables

One sample t-test



Regression model with intercept only

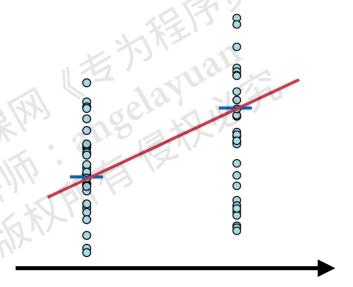


Two sample t-test



Regression with a categorical explanatory variable

房价 =
$$β_0$$
 + $β_1$ 学区房 1: 是

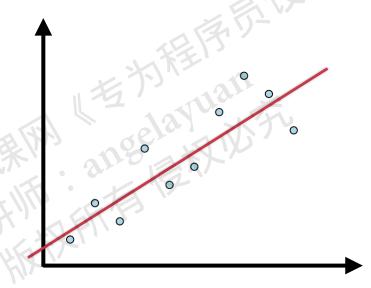


Correlation test



Regression with a numerical explanatory variable

房价 =
$$β_0$$
 + $β_1$ 面积



One-way ANOVA

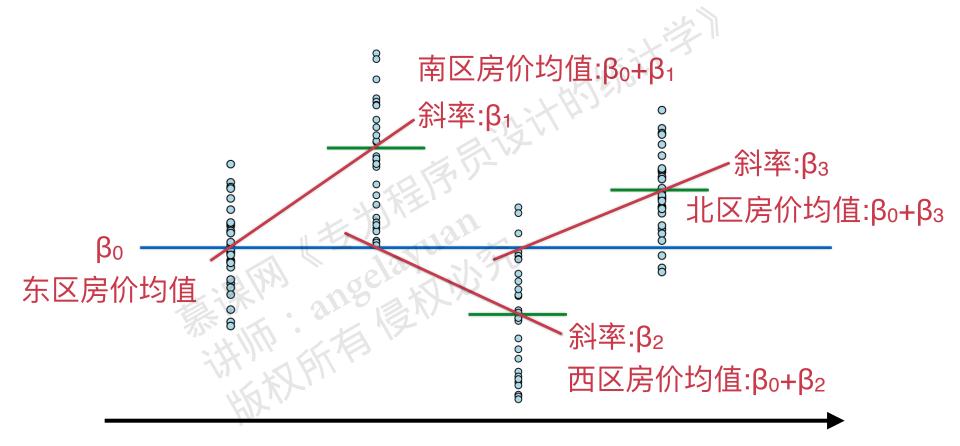


Regression with categorical explanatory variables

- 考察房价与区域(东,南,西,北)的关系
- · 把分类变量"区域"转化成三个哑变量(dummy variables)
 - x₁: 0 = 非南, 1 = 南
 x₂: 0 = 非西, 1 = 西

 - x₃: 0 = 非北, 1 = 北

房价 =
$$\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$



统计中的回归与机器学习中的回归

相同点

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x$$

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k$$

最小化
$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 求偏导数

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

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{residua}}{SS_{total}}$$

$$R_{adjusted}^2 = 1 - \frac{SS_{residual}}{SS_{total}} \times \frac{n-1}{n-k-1}$$

不同点

统计学中的线性回归

- 注重可解释性(hypothesis driven)
- 聚焦当前数据, 从数据中挖掘本质和机制
- 前提条件; 假设检验
- 考虑影响模型估计准确性的因素

机器学习中的线性回归

- ·注重可应用性(data driven)
- 预测; cross-validation

特征工程





线性回归

・相关及假设检验

一元线性回归

- ・回归方程・前提条件
- ·最小二乘法 · 评价指标
 - 偏导数 ·假设检验
- 系数的含义 · 编程实现

多元线性回归

回归统一各种检验

·统计学vs机器学习

- ・回归方程・前提条件
- ・最小二乘法・共线性
- ・偏导数・评价指标
- · 系数的含义 · 假设检验