Modello di Regressione Lineare Multiplo

Analisi dei Dati

Corso di Laurea in Scienze Statistiche e Attuariali Dipartimento di Diritto, Economia, Management e Metodi Quantitativi (DEMM) Università degli Studi del Sannio

Prof. Pietro Amenta

Fonte: Lebart, Morineau, Fénelon, Traitement des données statistiques. Dunod

Problema: Un imprenditore compra un negozio di alimentari che ha una superficie S in un quartiere la cui popolazione residente circostante è P. Si ipotizza che l'incasso giornaliero per questo tipo di negozio dipenda linearmente dalla superficie e dal numero di residenti. Vengono raccolti gli incassi di 13 negozi che insistono nel quartiere. Quale incasso può sperare l'acquirente nell'avviare l'attività ?

Popolazione	Superficie	Incasso
70	21	198
35	26	209
55	14	197
25	10	156
28	12	85
43	20	187
15	5	43
33	28	211
23	9	120
4	6	62
45	10	176
20	8	117
56	36	273

Possiamo scrivere

198 =
$$\alpha_1$$
70 + α_2 21 + α_3 + residuo₁
:
273 = α_1 56 + α_2 36 + α_3 + residuo₁₃

quindi, con $i = 1, \ldots, 13$

$$y_i = \alpha_1 x_{i1} + \alpha_2 x_{i2} + \alpha_3 + \epsilon_i$$

dove

- y_i è il valore della variabile endogena o da spiegare sull'i-esima u.s.;
- x_{i1} e x_{i2} sono i valori delle variabili esogene o esplicative (predittrici) sull'i-esima u.s.;
- α_1 e α_2 sono i coefficienti incogniti della combinazione lineare delle variabili esogene o esplicative (predittrici);
- α_3 è il termine costante del modello.

Vi sono quindi 13 equazioni per stimare 3 coefficienti α_i incogniti più altri 13 valori (incogniti) dati dai residui ϵ_i che rappresentano lo scarto fra il valore y_i e la parte lineare $(\alpha_1 x_{i1} + \alpha_2 x_{i2} + \alpha_3)$ dell'osservazione i-esima.

Abbiamo un sistema di 13 equazioni in 16 incognite: il sistema ammette quindi una infinità di soluzioni e siano a_1 , a_2 e a_3 una di queste.

Si cercherà allora una soluzione a_1 , a_2 e a_3 che minimizza "globalmente" l'insieme degli scarti dalla linearità e_i

$$e_i = y_i - (a_1x_{i1} + a_2x_{i2} + a_3)$$

Abbiamo diversi criteri di minimizzazione: $\min\{\sum_{i=1}^{n} e_i^2\}$ (**minimi quadrati**), $\min\{\sum_{i=1}^{n} |e_i|\}$, $\min\{\max e_i\}$, ecc..

Generalizziamo a p variabili e utilizziamo il criterio dei minimi quadrati per la stima dei coefficienti $a_1, a_2, ..., a_p$. Il modello per le n u.s. può essere scritto

$$\mathbf{y} = \alpha_1 \ \mathbf{x}_1 + \alpha_2 \ \mathbf{x}_2 + \ldots + \alpha_p \ \mathbf{x}_p + \epsilon_{(n,1)}$$

o ancora, in termini matriciali

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} \alpha + \epsilon (n,1) + (n,1)$$

$$\mathsf{dove}\, \underset{(n,\rho)}{\mathbf{X}} = \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_2 & \dots & \mathbf{X}_\rho \\ (n,1) & (n,1) & & (n,1) \end{array}\right] \mathbf{e}\, \underset{(\rho,1)}{\boldsymbol{\alpha}} = \left[\begin{array}{c} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_\rho \end{array}\right].$$

L'adattamento del modello sarà quindi

$$\mathbf{y} = a_1 \mathbf{x}_1 + a_2 \mathbf{x}_2 + \ldots + a_p \mathbf{x}_p + \mathbf{e}_{(n,1)}$$

oppure

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} \mathbf{a} + \mathbf{e}_{(n,1)} (p,1) + (n,1)$$

dove
$$\mathbf{X}_{(n,p)} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_2 & \dots & \mathbf{X}_p \\ (n,1) & (n,1) & & (n,1) \end{bmatrix}$$
, $\mathbf{a}_{(p,1)} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix}$, $\mathbf{e}_{(n,1)} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}$.

L'adattamento del modello ai minimi quadrati quindi corrisponde alla soluzione che minimizza il prodotto scalare

$$\sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}\mathbf{a}$$

e risulta essere funzione del vettore incognito **a**. Una condizione necessaria per il minimo è che sia nulla la derivata prima parziale

$$\frac{\partial (\mathbf{e}^T \mathbf{e})}{\partial \mathbf{a}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = 0$$

da cui si ottiene la condizione per l'estremo

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

che risulta essere un sistema di p equazioni in p incognite.

Se n > p e se **X** è di rango massimo (cioè p), allora **X**^T**X** è una matrice di ordine p e di rango p, dunque è invertibile, e quindi avremo

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

Verifichiamo se la soluzione è anche un minimo. Sia $\tilde{\mathbf{a}}$ un'altra soluzione ed $\tilde{\mathbf{e}}$ il vettore degli scarti corrispondente

$$\begin{split} \tilde{\mathbf{e}} &= \mathbf{y} - \mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}) + (\mathbf{X}\mathbf{a} - \mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}}) = \mathbf{e} + \mathbf{X}(\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{a}}) \\ \tilde{\mathbf{e}}^T \tilde{\mathbf{e}} &= \mathbf{e}^T \mathbf{e} + 2(\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{a}})^T \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}) + (\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{a}})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{a}}) \\ &= \mathbf{e}^T \mathbf{e} + (\mathbf{X}(\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{a}}))^T (\mathbf{X}(\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{a}})) \end{split}$$

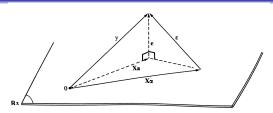
dalla quale si evince che $\mathbf{e}^T \mathbf{e}$ è la somma di quadrati più piccola ottenibile (minimo assoluto), essendo tutte le quantità maggiori o uguali a zero.

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 198 \\ 209 \\ 197 \\ 156 \\ 85 \\ 187 \\ 43 \\ 211 \\ 120 \\ 62 \\ 176 \\ 117 \\ 273 \end{bmatrix} (13,3) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & 1 \\ 70 & 21 & 1 \\ 35 & 26 & 1 \\ 55 & 14 & 1 \\ 25 & 10 & 1 \\ 28 & 12 & 1 \\ 43 & 20 & 1 \\ 155 & 5 & 1 \\ 33 & 28 & 1 \\ 23 & 9 & 1 \\ 46 & 1 \\ 45 & 10 & 1 \\ 20 & 8 & 1 \\ 56 & 36 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 19828 & 8452 & 452 \\ 8452 & 4343 & 205 \\ 452 & 205 & 13 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{y} = \frac{\mathbf{a}_{2495}}{\mathbf{a}_{38769}}$$
 $\mathbf{a}_{(3,1)} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = (\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1.50 \\ 4.24 \\ 37.50 \end{bmatrix}$

$$\hat{\boldsymbol{y}} = 1.50 \, \boldsymbol{x}_1 + 4.24 \, \boldsymbol{x}_2 + 37.50$$



- Moltiplicando a sinistra y = Xa + e per X^T otteniamo
 X^Ty = X^TXa + X^Te. Ciò implica che X^Te = 0 e quindi il vettore e risulta essere ortogonale allo spazio R_X.
- Il modello $\mathbf{y} = \mathbf{X}\alpha + \epsilon$ definisce una decomposizione di \mathbf{y} in due parti sconosciute: $\mathbf{X}\alpha \in \Re_{\mathbf{X}}$ ed $\epsilon \in \Re^n$.
- La tecnica dei minimi quadrati fornisce come soluzione la decomposizione y = Xa + e che minimizza la lunghezza (norma) di e proiettando ortogonalmente y su \(\pa_X\): i due vettori Xa ed e sono ortogonali.

La proiezione ortogonale di y su \Re_X è una trasformazione lineare caratterizzata da una matrice P_X denominata Operatore di Proiezione Ortogonale

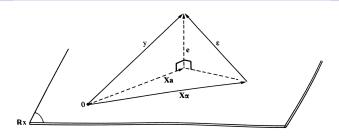
$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \mathbf{P}_{\mathbf{X}}\mathbf{y}$$

dove $\mathbf{P}_{\mathbf{X}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$ e con $\mathbf{Q}_{\mathbf{X}} = \mathbf{I} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}} = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$ operatore di proiezione orto-complementare rispetto allo spazio $\Re_{\mathbf{X}}$. Si verifica con facilità che $\mathbf{e} = \mathbf{Q}_{\mathbf{X}}\mathbf{y}$ e $\mathbf{Q}_{\mathbf{X}}\mathbf{X} = \mathbf{0}$, ed è vero inoltre

$$\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{y})^T\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{X}}^2\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{y}$$

Ma dato che $\mathbf{e} = \mathbf{Q}_{\mathbf{X}}(\mathbf{X}\alpha + \epsilon) = \mathbf{Q}_{\mathbf{X}}\epsilon$, allora possiamo scrivere

$$\mathbf{e}^T \mathbf{e} = \epsilon^T \mathbf{Q}_{\mathbf{X}} \epsilon$$



La tecnica dei minimi quadrati fornisce come soluzione la decomposizione y = Xa + e che minimizza la lunghezza (norma) di e proiettando ortogonalmente y su \(\pa_X\): i due vettori Xa ed e sono ortogonali.

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \mathbf{P}_{\mathbf{X}}\mathbf{y}$$

$$ullet$$
 e = $Q_X y = Q_X \epsilon$

$$\hat{\epsilon} = \mathbf{P}_{\mathbf{X}} \epsilon$$

Il modello lineare precedente si può anche scrivere

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_0 \boldsymbol{\alpha}_0 + \mathbf{1} \boldsymbol{\alpha}_p + \boldsymbol{\epsilon}$$

con α_p termine costante del modello e \mathbf{X}_0 matrice delle p-1 variabili esogene. Risulta essere allora un caso particolare di $\mathbf{y} = \mathbf{X}\alpha + \epsilon$ dove $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_0|\mathbf{1}]$ e $\alpha^T = [\alpha_0|\alpha_p]$.

- $\mathbf{Q_1} = \mathbf{I} \mathbf{1}(\mathbf{1}^T\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}^T = \mathbf{I} (1/n)\mathbf{1}\mathbf{1}^T$ proiettore ortocomplementare allo spazio genenato da 1.
- Se z è un punto di \Re^n allora $\mathbf{Q_1}\mathbf{z} = (\mathbf{I} \mathbf{1}\mathbf{1}^T/n)\mathbf{z} = \mathbf{z} (1/n)\mathbf{1}\mathbf{1}^T\mathbf{z} = \mathbf{z} \mathbf{1}\bar{z} = \mathbf{\hat{z}}$ (dove $\mathbf{\hat{z}}$ è il vettore \mathbf{z} centrato rispetto alla media \bar{z}).
- $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{Q_1X}$ matrice centrata rispetto alle medie di colonna

Se cerchiamo nuovamente la stima OLS dei parametri $\mathbf{a} = [\mathbf{a}_0|a_p]$ del modello utilizzando la matrice $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_0|\mathbf{1}]$ otteniamo

$$\begin{cases} \mathbf{a}_0 = (\hat{\mathbf{X}}_0^T \hat{\mathbf{X}}_0)^{-1} \hat{\mathbf{X}}_0^T \hat{\mathbf{y}} & \text{per i } p-1 \text{ coefficienti } a_1, a_2, \dots, a_{p-1} \\ a_p = \bar{y} - \sum_{k=1}^{p-1} a_k \bar{x}_k & \text{per il termine costante} \end{cases}$$

Se indichiamo con

- $\mathbf{V}_{\mathbf{XX}} = \frac{1}{n} \hat{\mathbf{X}}_0^T \hat{\mathbf{X}}_0$ la matrice delle varianze e covarianze empiriche fra le variabili esogene
- $\mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{y}} = \frac{1}{n}\hat{\mathbf{X}}_0^T\hat{\mathbf{y}}$ il vettore delle p-1 covarianze fra le \mathbf{x}_k e \mathbf{y} allora possiamo scrivere

$$\begin{cases} \mathbf{a}_0 = \mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}^{-1}\mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{y}} & \text{per i } p-1 \text{ coefficienti } a_1, a_2, \dots, a_{p-1} \\ a_p = \bar{y} - \mathbf{a}_0^T \bar{\mathbf{x}} & \text{per il termine costante} \end{cases}$$

Sia $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{X}_0\mathbf{a}_0 + \mathbf{1}a_p$, allora possiamo scrivere

$$var(\tilde{\mathbf{y}}) = \frac{1}{n} \mathbf{a}_0^T \mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0 \mathbf{a}_0 = var(\mathbf{X}_0 \mathbf{a}_0) = cov(\mathbf{y}, \mathbf{X}_0 \mathbf{a}_0) = cov(\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{y}}) = R$$

dove R è il coefficiente di correlazione multiplo. Il suo quadrato si può esprimere in diversi modi

$$R^{2} = \frac{cov(\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{y}})}{var(\mathbf{y})var(\tilde{\mathbf{y}})} = \frac{var(\tilde{\mathbf{y}})}{var(\mathbf{y})} = \frac{cov(\mathbf{y}, \mathbf{X}_{0}\mathbf{a}_{0})}{var(\mathbf{y})}$$
$$R^{2} = \frac{\mathbf{a}_{0}^{T}\mathbf{X}_{0}^{T}\mathbf{X}_{0}\mathbf{a}_{0}}{\hat{\mathbf{y}}^{T}\hat{\mathbf{y}}} = \frac{\mathbf{a}_{0}^{T}\mathbf{X}_{0}^{T}\hat{\mathbf{y}}}{\hat{\mathbf{y}}^{T}\hat{\mathbf{y}}} = \frac{\sum_{k} a_{k}cov(\mathbf{y}, \mathbf{x}_{k})}{\hat{\mathbf{y}}^{T}\hat{\mathbf{y}}}$$

Il termine R^2 assume quindi un significato in termini di varianza totale divisa in varianza spiegata e in quella residuale

$$var(\mathbf{y}) = var(\tilde{\mathbf{y}}) + var(\mathbf{e})$$

Possiamo scrivere quindi

$$\begin{cases} \text{ varianza spiegata} & R^2 var(\mathbf{y}) = var(\tilde{\mathbf{y}}) \\ \text{ varianza residuale} & \underbrace{(1-R^2)var(\mathbf{y}) = var(\mathbf{e})}_{var(\mathbf{y}) = var(\tilde{\mathbf{y}}) + var(\mathbf{e})} \end{cases}$$

L'R² è anche pari a

$$R^2 = 1 - \frac{var(\mathbf{e})}{var(\mathbf{y})} = 1 - \frac{\sum e_i^2}{n \times var(\mathbf{y})}$$

Minimizzare $\sum e_i^2$ equivale allora a massimizzare R^2 e quindi l'adattamento OLS determina la combinazione lineare delle variabili esogene di correlazione massima con la variabile endogena \mathbf{y}

- Si evidenzia che l'introduzione nel modello di una nuova variabile esogena fa diminuire la somma degli scarti al quadrato e di conseguenza fa aumentare l'R².
- Il queste condizioni, allora, il valore assunto dall'R² non può essere un riterio assoluto per apprezzare la qualità dell'adattamento.

Tornando ai dati dell'esempio, abbiamo i seguenti risultati

•
$$\mathbf{a}_0 = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}^{-1} \mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{y}} = \mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}^{-1} \begin{bmatrix} 905.7 \\ 515.0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.50 \\ 4.24 \end{bmatrix}$$

•
$$a_3 = \bar{y} - (a_1\bar{x}_1 + a_2\bar{x}_2) = 37.50$$

•
$$\sum e_i^2 = 13 \times [4137.6 - (1.50 \times 905.7 + 4.24 \times 515.01)] = 7756$$

•
$$R = 0.93$$

•
$$R^2 = 0.86 = 1 - \frac{7756}{13 \times 4137.6}$$