Klasyczny model regresji liniowej

$$X = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,m} \\ x_{2,1} & & x_{2,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,m} \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \qquad \mathrm{B} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_m \end{bmatrix}$$

$$Y = XB + \varepsilon$$

$$\hat{Y} = X\hat{B}$$

$$e = Y - \hat{Y} = Y - X\hat{B}$$ *(błąd/reszty)*

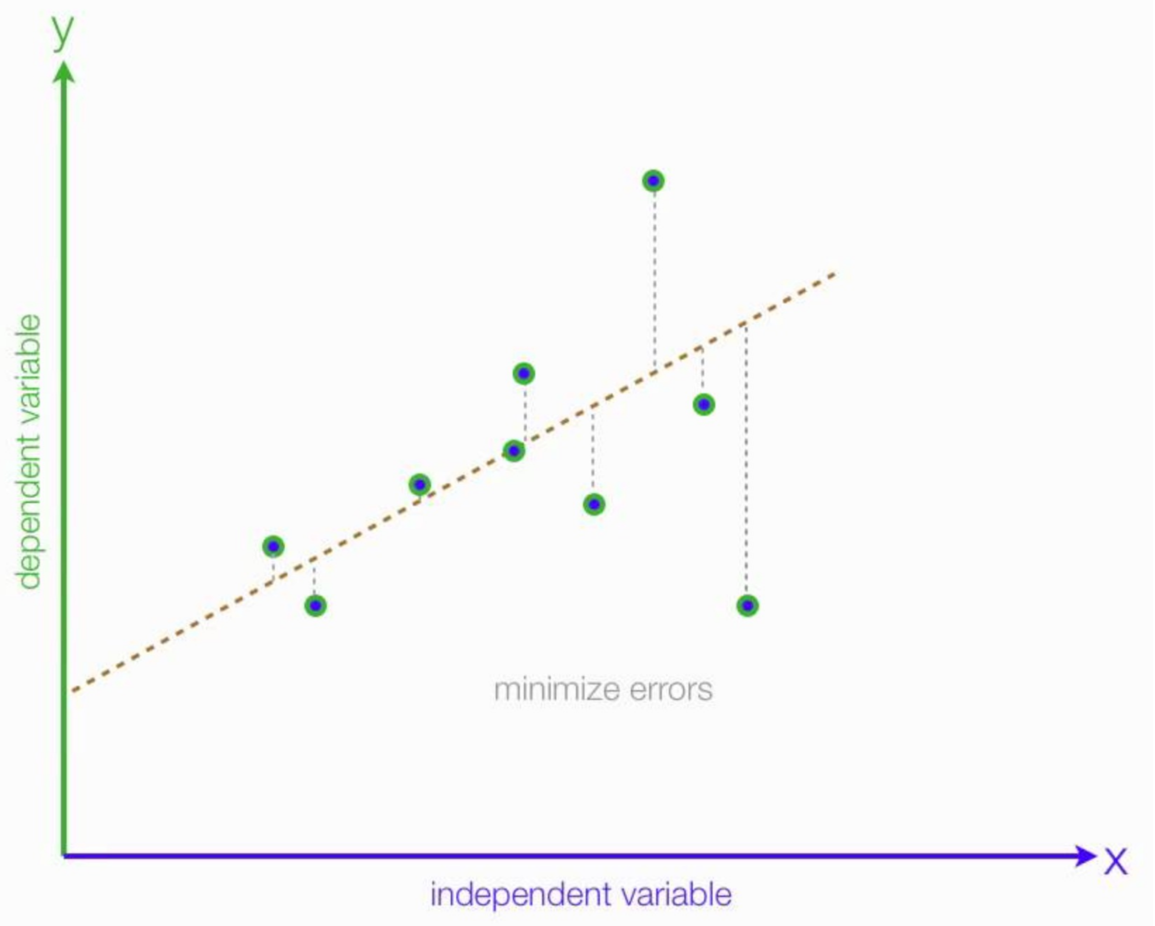
Metoda najmniejszych kwadratów (*ordinary least square/OLS*):

$$RSS = e^T e = (Y - X\hat{B})^T (Y - X\hat{B}) = (Y^T - \hat{B}^T Y^T)(Y - X\hat{B})$$

$$RSS = Y^T Y - 2\hat{B}^T X^T Y + \hat{B}^T X^T X\hat{B} \underset{B}{\rightarrow} \quad min$$

Równanie normalne:

$$\boldsymbol{\hat{B} = (X^T X)^{-1} X^T Y}$$



Klasyczny model regresji liniowej

$$\hat{Y} = X\hat{B}$$

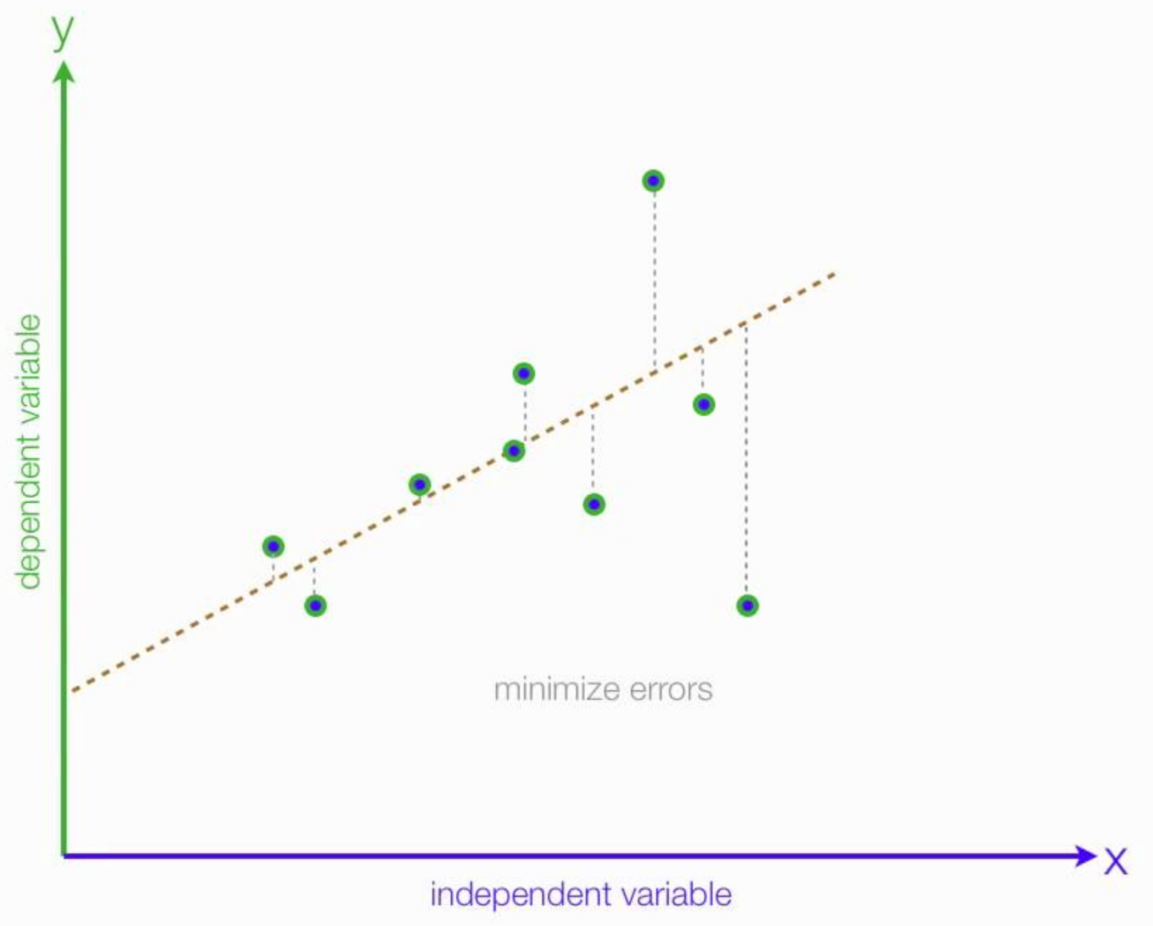
$$e = Y - \hat{Y} = Y - X\hat{B}$$

$$RSS = e^T e = \left(Y - X\hat{B}\right)^T \left(Y - X\hat{B}\right) = \left(Y^T - \hat{B}^T Y^T\right)\left(Y - X\hat{B}\right)$$

$$RSS = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & \dots & e_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix} = e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 + \cdots + e_n^2$$

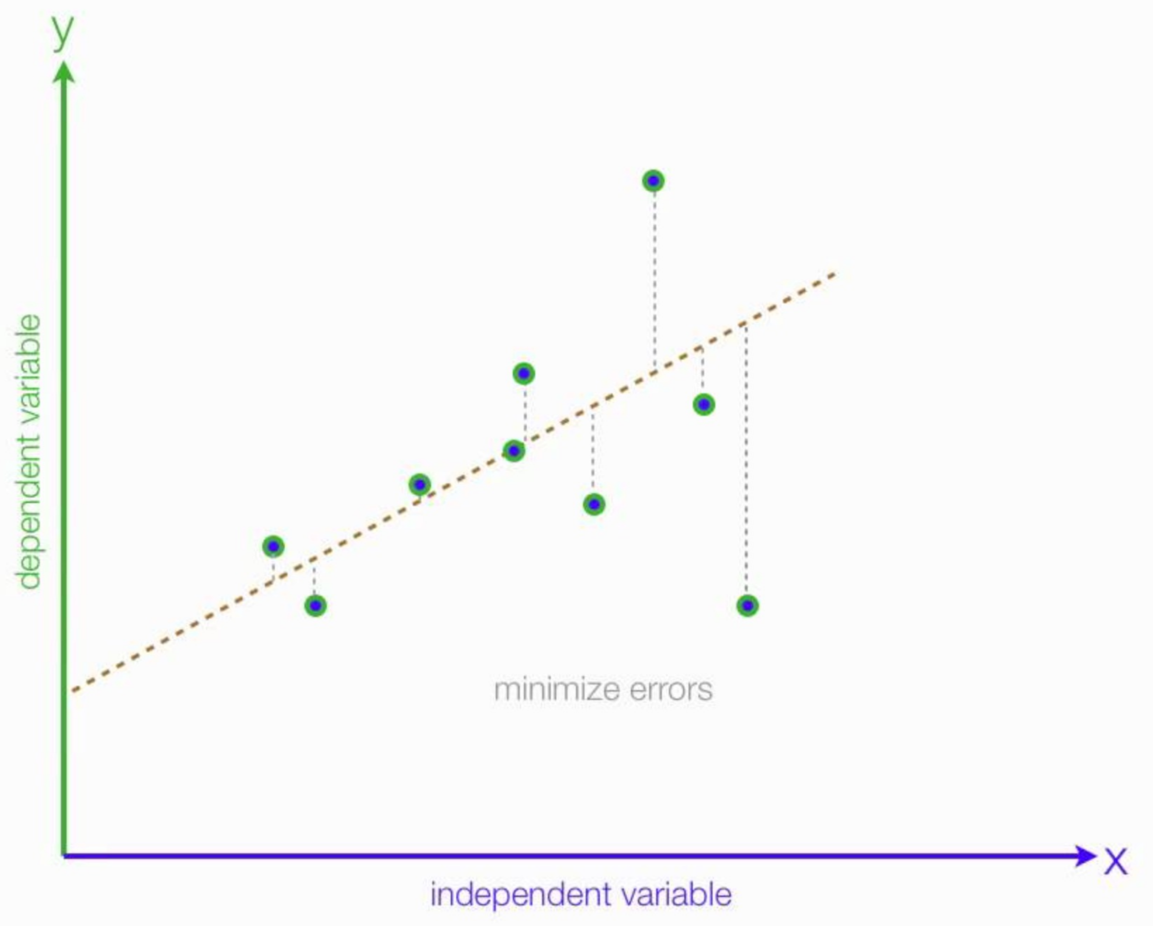
$$RSS = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \boldsymbol{x_i}\hat{\boldsymbol{b}}\right)^2$$

$$e = \begin{bmatrix} y_1 - \widehat{y_1} \\ y_2 - \widehat{y_2} \\ \vdots \\ y_n - \widehat{y_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 - \widehat{b_1}x_1 + b_0 \\ y_2 - \widehat{b_1}x_2 + b_0 \\ \vdots \\ y_n - \widehat{b_1}x_n + b_0 \end{bmatrix}$$



Klasyczny model regresji liniowej

1. Liniowość - zmienne losowe Y_i, $X_{i,k}$ należą do L^2 i spełniają:
$$Y = XB + \varepsilon$$
2. Ścisła egzogeniczność:
$$\mathbb{E}(\varepsilon|X) = 0$$
3. Liniowa niezależność obserwacji.
4. Sferyczność błędu, czyli:
    1. Homoskedastyczność (stałość wariancji):
    $$\mathbb{E}(\varepsilon^2|X) = \sigma^2$$
    2. Brak korelacji reszt
    $$\mathbb{E}(\varepsilon_i \varepsilon_j | X) = 0$$
5. Gaussowskość błędu:
$$\varepsilon | X \sim \mathcal{N}$$



Twierdzenie Gaussa-Markova:
Jeśli zachodzą 1 – 4 to estymator najmniejszych kwadratów:

$$\boldsymbol{B} = \left(\boldsymbol{X^T X}\right)^{-\boldsymbol{1}} \boldsymbol{X^T Y}$$

jest:
najlepszym nieobciążonym liniowym estymatorem.
(BLUE*: best linear unbiased estimator *)

https://mst.mimuw.edu.pl/wyklady/ekn/wyklad.pdf
http://coin.wne.uw.edu.pl/pstrawinski/notatki/kmrl.pdf

Klasyczny model regresji liniowej

Ocena jakości modelu R^2; $adjusted\ R^2$

$$R^2 := \frac{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2}$$

Współczynnik determinacji, inaczej zwany współczynnikiem określoności lub R-kwadrat jest miarą tego, jaki procent zmienności zmiennej zależnej (objaśnianej) jest wyjaśniany za pomocą zmiennej niezależnej (czynnik zmienna objaśniająca, predyktor) bądź modelu statystycznego. Innymi słowy, współczynnik determinacji informuje nas, ile nasz model, nasz badany czynnik wyjaśnia zgromadzone dane pomiarowe (zmienną zależną).

Z R^2 (R-kwadrat) wiąże się z nieodłącznym problemem – dodatkowe zmienne wejściowe sprawią, że R-kwadrat pozostanie taki sam lub wzrośnie (jest to spowodowane tym, jak R-kwadrat jest obliczany matematycznie). Dlatego nawet jeśli dodatkowe zmienne wejściowe nie wykazują związku ze zmiennymi wyjściowymi, R-kwadrat wzrośnie.

$$R^2_{adj} = 1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-k-1}$$

n – ilość obserwacji
k – ilość zmiennych objaśniających (bez wyrazu wolnego)

Klasyczny model regresji liniowej

Złożoność obliczeniowa

Równanie normalne:

$$\widehat{\boldsymbol{B}} = \left(\boldsymbol{X}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-\boldsymbol{1}}\boldsymbol{X}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{Y}$$

Najbardziej złożone obliczeniowo jest znalezienie macierzy odwrotnej:

$$\boldsymbol{W}^{-\boldsymbol{1}} = \left(\boldsymbol{X}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-\boldsymbol{1}}$$

Wyznaczanie:

Metoda dopełnień algebraicznych

$$W^1 = \frac{1}{detW}(W^D)^T$$

Metoda eliminacji Gaussa-Jordana

$$[W|I] \longmapsto [I|W^{-1}]$$

W zależności od implementacji algorytmu złożoność obliczeniowa odwrócenia macierzy wynosi zazwyczaj od około $\boldsymbol{O}(\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{2.4}})$ do $\boldsymbol{O}(\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{3}})$.

Podwojenie liczby kolumn wydłuża czas obliczeń o około od $\boldsymbol{2}^{\boldsymbol{2.4}} = \boldsymbol{5.3}$ do $\boldsymbol{2}^{\boldsymbol{3}} = \boldsymbol{8}$.

Zmienne kategoryczne/dyskretne *Dummy Variable*

One-Hot Encode (OHE)

	R&D Spend	Administration	Marketing Spend	State	Profit
0	165349.20	136897.80	471784.10	New York	192261.83
1	162597.70	151377.59	443898.53	California	191792.06
2	153441.51	101145.55	407934.54	Florida	191050.39
3	144372.41	118671.85	383199.62	New York	182901.99
4	142107.34	91391.77	366168.42	Florida	166187.94

.unique()

New York
California
Florida

State_California	State_Florida	State_New York
0	0	1
1	0	0
0	1	0

One-Hot Encode (OHE)

	R&D Spend	Administration	Marketing Spend	Profit	State_California	State_Florida	State_New York
0	165349.20	136897.80	471784.10	192261.83	0	0	1
1	162597.70	151377.59	443898.53	191792.06	1	0	0
2	153441.51	101145.55	407934.54	191050.39	0	1	0
3	144372.41	118671.85	383199.62	182901.99	0	0	1
4	142107.34	91391.77	366168.42	166187.94	0	1	0

Pułapka zmiennych kategorycznych *Dummy Variable Trap*

Dla modelu regresji

	R&D Spend	Administration	Marketing Spend	State	Profit
0	165349.20	136897.80	471784.10	New York	192261.83
1	162597.70	151377.59	443898.53	California	191792.06
2	153441.51	101145.55	407934.54	Florida	191050.39
3	144372.41	118671.85	383199.62	New York	182901.99
4	142107.34	91391.77	366168.42	Florida	166187.94

	R&D Spend	Administration	Marketing Spend	Profit	State_California	State_Florida	State_New York
0	165349.20	136897.80	471784.10	192261.83	0	0	1
1	162597.70	151377.59	443898.53	191792.06	1	0	0
2	153441.51	101145.55	407934.54	191050.39	0	1	0
3	144372.41	118671.85	383199.62	182901.99	0	0	1
4	142107.34	91391.77	366168.42	166187.94	0	1	0

R&D Spend	Administration	Marketing Spend	Profit	State_California	State_Florida	State_New York	intercept
165349.20	136897.80	471784.10	192261.83	0	0	1	1
162597.70	151377.59	443898.53	191792.06	1	0	0	1
153441.51	101145.55	407934.54	191050.39	0	1	0	1
144372.41	118671.85	383199.62	182901.99	0	0	1	1
142107.34	91391.77	366168.42	166187.94	0	1	0	1

$$B = \left(X^T X\right)^{-1} X^T Y$$

$$det\left(X^T X\right) = 0$$

$$\left(X^T X\right)^{-1} - nie\ istnieje$$

Zmienne kategoryczne/dyskretne

Inne metody

https://contrib.scikit-learn.org/category_encoders/

```
pip install category_encoders
```

```
import category_encoders as ce

encoder = ce.BackwardDifferenceEncoder(cols=[...])
encoder = ce.BaseNEncoder(cols=[...])
encoder = ce.BinaryEncoder(cols=[...])
encoder = ce.CatBoostEncoder(cols=[...])
encoder = ce.CountEncoder(cols=[...])
encoder = ce.GLMMEncoder(cols=[...])
encoder = ce.HashingEncoder(cols=[...])
encoder = ce.HelmertEncoder(cols=[...])
encoder = ce.JamesSteinEncoder(cols=[...])
encoder = ce.LeaveOneOutEncoder(cols=[...])
encoder = ce.MEstimateEncoder(cols=[...])
encoder = ce.OneHotEncoder(cols=[...])
encoder = ce.OrdinalEncoder(cols=[...])
encoder = ce.SumEncoder(cols=[...])
encoder = ce.PolynomialEncoder(cols=[...])
encoder = ce.TargetEncoder(cols=[...])
encoder = ce.WOEEncoder(cols=[...])
encoder = ce.QuantileEncoder(cols=[...])

encoder.fit(X, y)
X_cleaned = encoder.transform(X_dirty)
```