Inferență statistică în ML

Cap 7. Modelul regresiei liniare. Reziduuri. Inferența cu regresie.

May 7, 2019

1. Coeficienții regresiei liniare
2. Residuals
3. Inferența în regresie
4. Regresia de mai multe variabile

1 Coeficienții regresiei liniare

2 Residuals

3 Inferența în regresie

4 Regresia de mai multe variabile

Modelul regresiei: zgomot Gaussian adăugat

- metoda celor mai mici pătrate realizează o estimare
- ne interesează să tragem concluzii privitoare la întreaga populație (inferență)
- considerăm dezvoltarea unui model probabilist pentru regresie:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i, \qquad i = 1 \dots N$$

- presupunem $\epsilon_i \in N(0, \sigma^2)$, pentru care:
  - $E[Y_i | X_i = x_i] = \mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_i$
  - $Var[Y_i | X_i = x_i] = \sigma^2$
- ϵ_i sunt considerate a fi erori independente, răspunsul unor variabile care nu au fost incluse în model, și al căror comportament poate fi modelat ca erori gaussiene independente
- $Var[Y_i | X_i = x_i]$ este dispersia în jurul liniei de regresie, nu este dispersia răspunsului Y_i; va fi mai mică decât dispersia răspunsului Y_i, pentru că o parte din variabilitatea lui Y este explicată de regresia liniară

Interpretarea coeficienților regresiei: intercept

- β_0 este valoarea așteptată a răspunsului dacă predictorul (X) este zero:

$$E[Y|X=0] = \beta_0 + \beta_1 * 0 = \beta_0$$

- nu e interesant întotdeauna, de exemplu când $X = 0$ este mult în afara setului de date (X este înălțimea sau tensiunea sangvină)
- intercept-ul poate varia:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i = \underbrace{\beta_0 + a\beta_1}_{\tilde{\beta}_1} + \beta_1(X_i - a) + \epsilon_i$$

$$= \tilde{\beta}_1 + \beta_1(X_i - a) + \epsilon_i$$

- translatarea valorilor X_i cu o valoare a nu modifică panta (slope), doar intercept-ul
- de regulă a se alege ca fiind $\bar{X}$, astfel că în acest caz intercept-ul este interpretat ca fiind valoarea așteptată când predictorul X este egal cu media $\bar{X}$

Interpretarea coeficienților regresiei: slope

- β_1 este modificarea răspunsului cauzată de modificarea cu o unitate a predictorului:

$$E[Y|X = x + 1] - E[Y|X = x] = \beta_0 + \beta_1(x + 1) - \beta_0 - \beta_1 x = \beta_1$$

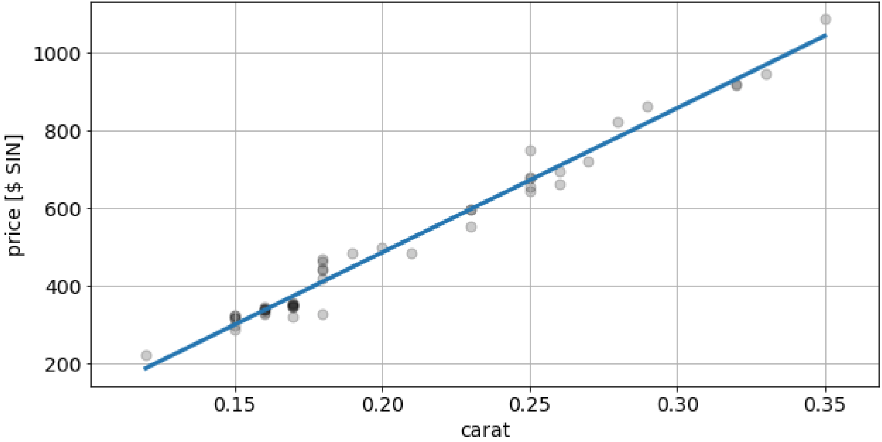
- modificarea pantei înseamnă scalarea lui X cu un factor constant a:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i = \beta_0 + \frac{\beta_1}{a}(X_i a) + \epsilon_i = \beta_0 + \tilde{\beta}_1(X_i a) + \epsilon_i$$

- multiplicarea lui X cu un factor constant determină un coeficient slope obținut prin împărțirea vechiului slope la a

Regresia prețului diamantelor în funcție de masă: diamond dataset

```
intercept: -259.6259071915547 coefficient: 3721.024851550472
```



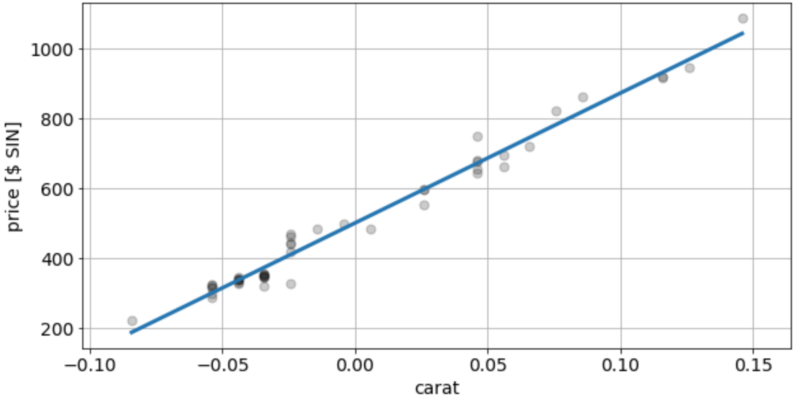
Regresia prețului diamantelor în funcție de masă: diamond dataset (2)

```
x, y = np.array(diamond['carat'].values), np.array(diamond['price'].values)

xext = sm.add_constant(x)

lm = sm.OLS(y, xext).fit()
beta0, beta1 = lm.params[0], lm.params[1]
print('intercept:', beta0, 'coefficient:', beta1)

x1 = np.linspace(np.min(x), np.max(x), 100)
y1 = beta0 + beta1 * x1

fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(10, 5))
ax.scatter(x, y, c='k', alpha = .2, s=50)
ax.plot(x1, y1, lw=3)
ax.set(xlabel="carat", ylabel="price [$ SIN]")
ax.grid(True)
plt.show()
```

Regresia prețului diamantelor în funcție de masă: diamond dataset (3)

```
x -= np.mean(x)
```

```
mean(X): 0.2041666666666667
intercept: 500.0833333333334 coefficient: 3721.024851550472
```



1 Coeficienții regresiei liniare

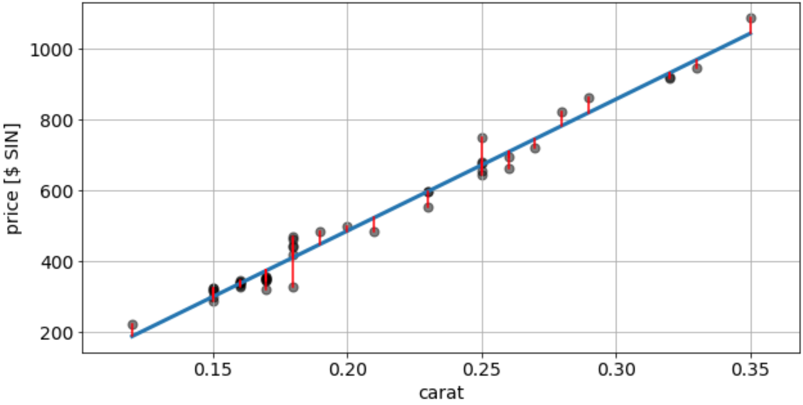
2 Residuals

3 Inferența în regresie

4 Regresia de mai multe variabile

Residuals

- dacă am observa doar prețurile, fără masa asociată, variabilitatea variabilei preț ar fi foarte mare
- dacă observăm prețul în contextul masei, variabilitatea este redusă și se manifestă în jurul dreptei de regresie



Residuals (2)

- modelul este $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i$, unde $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
- valoarea observată este Y_i pentru valoarea predictorului X_i
- predicția calculată este $\hat{Y}_i$ pentru valoarea predictorului X_i:

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i$$

- reziduul ϵ_i este diferența dintre valoarea observată și valoarea prezisă de regresie:

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

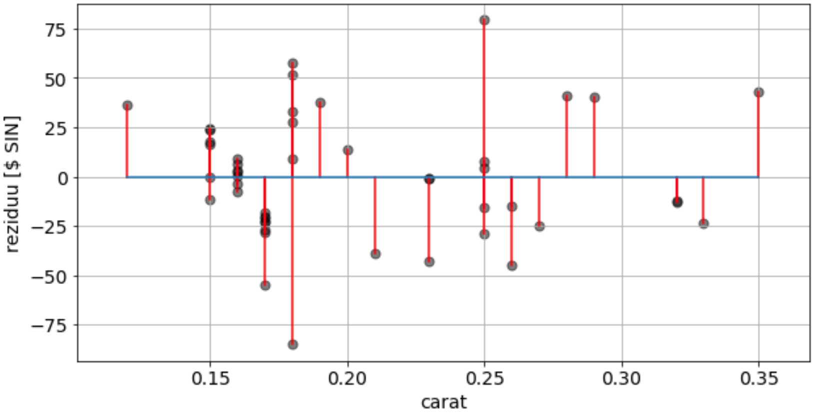
- este distanța pe verticală dintre punctul observat și dreapta de regresie
- metoda celor mai mici pătrate (LMS) minimizează $\sum_{i=1}^{N} e_i^2$ (v. desen)
- e_i poate fi privit ca un estimator al lui ϵ_i

Proprietățile reziduurilor

- $E[e_i] = 0$
- $\sum_{i=1}^{N} e_i = 0$
- $\sum_{i=1}^{N} e_i X_i = 0$

- reziduurile sunt utile pentru a investiga potriviri slabe ale modelului cu regresia calculată (liniile roșii devin mai lungi)
- reziduurile pozitive sunt situate deasupra liniei de regresie, cele negative - dedesubt
- reziduul poate fi interpretat ca ieșirea Y din care se scade asocierea liniară a predictorului X
- variația reziduală (din care s-a scăzut variabilitatea datorată regresorului X) nu trebuie confundată cu variația explicată de model, $\hat{Y}$

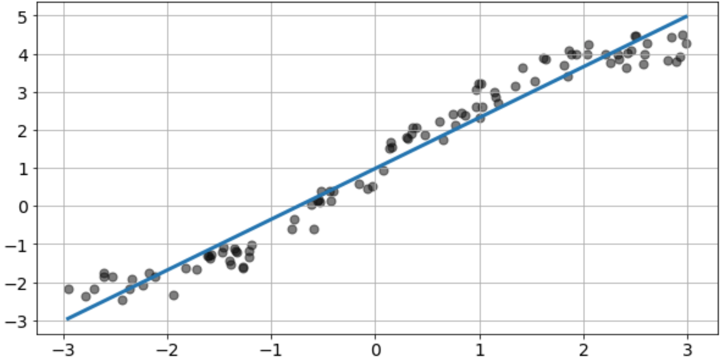
Variația reziduală



- variația reziduală nu trebuie să urmeze vreun pattern
- suma reziduurilor este zero, ele vor fi situate oarecum echilibrat, și în partea superioară și în cea inferioară, 'aranjate' aleator

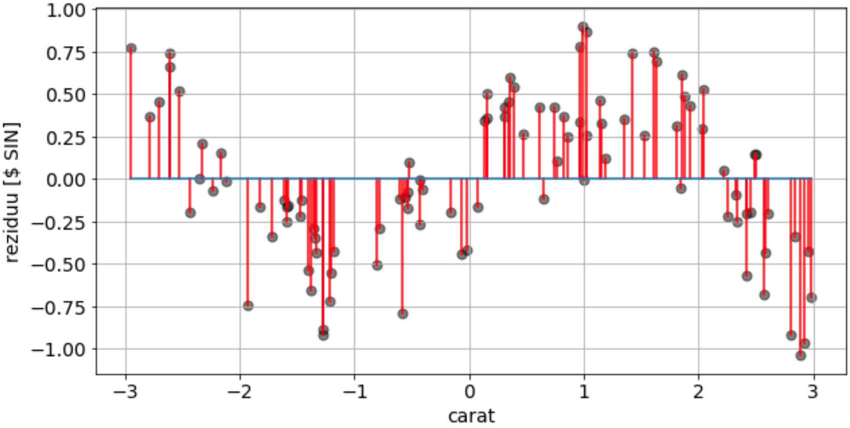
Variația reziduală (1)

```
x = np.random.rand(100) * 6 - 3
y = x + np.sin(x) + np.random.rand(100) + np.sqrt(0.2)
```



- există o componentă liniară care explică mult din variație
- modelul nu este perfect; variația sinusoidală rămâne neexplicată

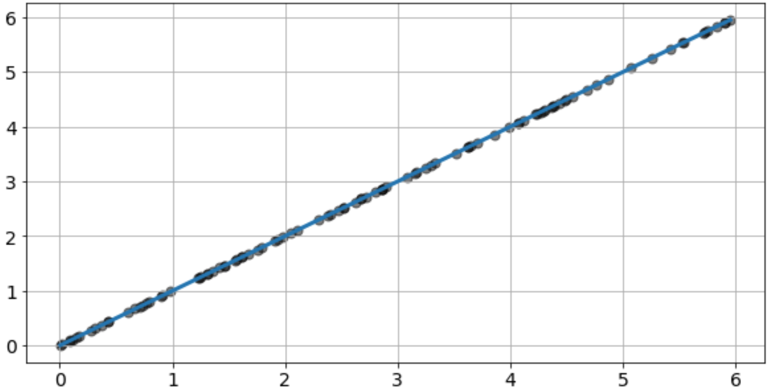
Variația reziduală (2)



- variația sinusoidală apare în reziduu (nu e random ⇒ modelul nu explică toată variația)

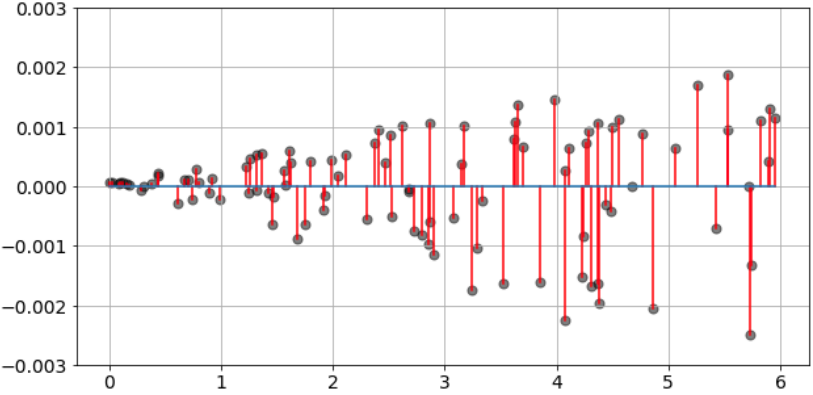
Variația reziduală (3)

```
x = np.random.rand(100) * 6
y = x + (np.random.rand(100) - 0.5) * .001 * x
```



- scatter plot: pare că modelul de regresie explică integral variabilitatea

Variația reziduală (4)



- variabilitatea reziduului devine evidentă; de fapt e vorba de dispersie diferită[1]

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Heteroscedasticity

Variabilitatea reziduală

- modelul este $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i$, unde $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
- estimarea pentru σ^2 este $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} e_i^2$, reziduul pătrat mediu
- de fapt se folosește:

$$\hat{\sigma^2} = \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n} e_i^2$$

- sunt $n - 2$ grade de libertate deoarece sunt două constrângeri:
  - suma reziduurilor este zero
  - reziduul este calculat folosind dreapta de regresie
- impactul e semnificativ pentru valori mici, $n < 20$, pentru valori mari ale lui n, nu contează

Variabilitatea explicată de regresie și reziduul

- variablilitatea totală a datelor este dată de dispersie, $\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2$
- variabilitatea explicată de regresie este diferența dintre valoarea estimată și medie, $\sum_{i=1}^{n}(\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$
- variabilitatea reziduală este ceea ce a rămas neexplicat de regresie, adică $\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2$

- se poate arăta că:

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

- variabilitatea totală = variabilitatea reziduală + variabilitatea regresiei

R squared

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

- R squared este procentul de variabilitate totală care este explicat de regresie:

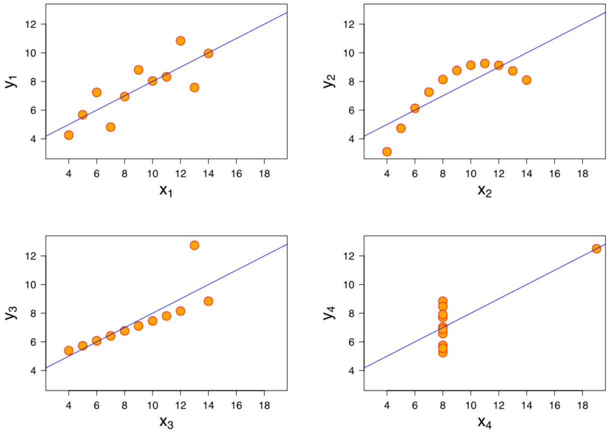
$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\hat{Y}_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2}$$

Proprietăți ale R^2

- R^2 este procentul de variație explicat de model
- $0 \leq R^2 \leq 1$
- R^2 este înșelător:
  - ștergerea de puncte (date) poate crește R^2
  - adăugarea de termeni la regresie (polinomială, crește gradul) întotdeauna crește R^2

Cvartetul lui Anscombe: importanța vizualizării datelor

- https://en.wikipedia.org/wiki/Anscombe%27s_quartet
- dataseturi cu statistici descriptive aproape identice (medii x și y, dispersii x și y, corelație x vs. y, R^2)



1 Coeficienții regresiei liniare

2 Residuals

3 Inferența în regresie

4 Regresia de mai multe variabile

Recapitularea modelului

- modelul regresiei:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i$$

- $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
- intercept: $\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}$
- coeficientul: $\hat{\beta}_1 = Cor(Y, X)\frac{Sd(Y)}{Sd(X)}$
- ne interesează cum realizăm un test statistic bazat pe cele două ipoteze, H_0 și H_a

Testarea ipotezei

- statistica de tipul $\frac{\hat{\theta}-\theta}{\hat{\sigma}_i}$ are de regulă următoarele proprietăți:
    - este distribuită normal și are o distribuție de tip Student T, dacă dispersia estimată este înlocuită cu sample estimate;
    - poate fi folosită pentru testarea $H_0 : \theta = \theta_0$ vs. $H_a : \theta >, <, \neq \theta_0$;
    - poate fi folosită pentru a crea un interval de confidență pentru θ de forma $\hat{\theta} \pm Q_{1-\alpha/2}\hat{\sigma}_{\hat{\theta}}$, unde $Q_{1-\alpha/2}$ este quantila relevantă dintr-o distribuție normală sau una Student T, iar $\hat{\sigma}_{\hat{\theta}}$ este eroarea standard asociată eșantionului.

Dispersia coeficienților regresiei (1)

- vom considera dispersia reziduurilor ca fiind σ^2, mai precis: $\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2/(n-2)$
- următoarele rezultate le dăm fără demonstrație[2]:

$$\sigma^2_{\hat{\beta}_1} = Var(\hat{\beta}_1) = \sigma^2 / \sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2$$

- cu cât variabilitatea față de dreapta de regresie este mai mică, cu atât dispersia β_1 este mai mică
- însă cu cât punctele sunt mai 'adunate' spre media $\bar{X}$, cu atât panta dreptei este mai imprecisă

$$\sigma^2_{\hat{\beta}_0} = Var(\hat{\beta}_0) = \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{X}^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2}\right)\sigma^2$$

[2] vezi `https://newonlinecourses.science.psu.edu/stat414/node/280/`

Dispersia coeficienților regresiei (2)

- în practică, σ este înlocuit de estimandul său, $\hat{\sigma}$
- în cazul unor erori Gaussiene iid, statistica:

$$\frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j}}$$

  urmărește o distribuție Student T cu $n - 2$ grade de libertate, și o distribuție normală pentru n mare
- aceasta poate fi folosită pentru a crea intervale de confidență și de a realiza testarea ipotezei

Construcția statisticilor

```
x, y = np.array(diamond['carat'].values), np.array(diamond['price'].values)

xext = sm.add_constant(x)

lm = sm.OLS(y, xext).fit()
beta0, beta1 = lm.params[0], lm.params[1]
print('intercept:', beta0, 'coefficient:', beta1)

n = len(lm.resid)
sigma = np.sqrt(np.sum(lm.resid**2)/(n - 2))
print('sigma:', sigma)

sx = np.sum((x - np.mean(x))**2)
se_beta0 = np.sqrt(1/n + np.mean(x)**2 / sx) * sigma
se_beta1 = sigma / np.sqrt(sx)

stat_beta0, stat_beta1 = beta0 / se_beta0, beta1 / se_beta1
p_beta0 = 2 * stats.t.sf(np.abs(stat_beta0), df=n-2)
p_beta1 = 2 * stats.t.sf(np.abs(stat_beta1), df=n-2)
i_beta0 = beta0 + np.array([-1, 1]) * stats.t.ppf(0.975, df=n-2) * se_beta0
i_beta1 = beta1 + np.array([-1, 1]) * stats.t.ppf(0.975, df=n-2) * se_beta1
```

```
intercept: -259.6259071915547 coefficient: 3721.024851550472
sigma: 31.84052226503175
```

Construcția statisticilor: dual

```
df1 = pd.DataFrame([['beta0', beta0, se_beta0, stat_beta0, p_beta0, i_beta0[0], i_beta0[1]],
                   ['beta1', beta1, se_beta1, stat_beta1, p_beta1, i_beta1[0], i_beta1[1]]],
                  columns=['Parameter', 'Estimate', 'Std. Error', 't Value', 'P(>|t|)', '[0.025', '0.975]'])
df2 = pd.DataFrame([['beta0', lm.params[0], lm.bse[0], lm.tvalues[0], lm.pvalues[0], lm.conf_int()[0][0],
                    lm.conf_int()[0][1]],
                   ['beta1', lm.params[1], lm.bse[1], lm.tvalues[1], lm.pvalues[1], lm.conf_int()[1][0],
                    lm.conf_int()[1][1]]],
                  columns=['Parameter', 'Estimate', 'Std. Error', 't Value', 'P(>|t|)', '[0.025', '0.975]'])
print(df1)
print(df2)
```

```
  Parameter     Estimate  Std. Error    t Value       P(>|t|)       [0.025  \
0     beta0  -259.625907   17.318856 -14.990938  2.523271e-19  -294.486957
1     beta1  3721.024852   81.785880  45.497155  6.751260e-40  3556.398413

        0.975]
0  -224.764858
1  3885.651290
  Parameter     Estimate  Std. Error    t Value       P(>|t|)       [0.025  \
0     beta0  -259.625907   17.318856 -14.990938  2.523271e-19  -294.486957
1     beta1  3721.024852   81.785880  45.497155  6.751260e-40  3556.398413

        0.975]
0  -224.764858
1  3885.651290
```

Construcția statisticilor: sumar

```
print(lm.summary())
```

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                      y   R-squared:                       0.978
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.978
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     2070.
Date:                Fri, 03 May 2019   Prob (F-statistic):           6.75e-40
Time:                        20:16:37   Log-Likelihood:                -233.20
No. Observations:                  48   AIC:                             470.4
Df Residuals:                      46   BIC:                             474.1
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
const       -259.6259     17.319    -14.991      0.000    -294.487    -224.765
x1          3721.0249     81.786     45.497      0.000    3556.398    3885.651
==============================================================================
Omnibus:                        0.739   Durbin-Watson:                   1.994
Prob(Omnibus):                  0.691   Jarque-Bera (JB):                0.181
Skew:                           0.056   Prob(JB):                        0.913
Kurtosis:                       3.280   Cond. No.                         18.5
==============================================================================
```

- interpretare conf. int. β_1: 95% încredere că o creștere cu 1 a masei (carat), duce la o creștere de preț între 3556 și 3886

Regresia: intervale de confidență

- considerăm predicția lui Y pentru o valoare a lui X
- de exemplu, predicția prețului diamantului în funcție de masa sa, sau predicția înălțimii copilului dată fiind înălțimea părintelui
- predicția evidentă pentru punctul x_0 este $\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$
- avem nevoie de standard error pentru a crea un interval de confidență
- facem distincție între:
  a. intervalul de confidență pentru dreapta de regresie în punctul x_0 și
  b. care ar fi valoarea prezisă pentru y în punctul x_0

  a. dreapta de regresie în x_0: stderr $= \hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{X})^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2}}$

  b. intervalul de predicție în x_0: stderr $= \hat{\sigma}\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{X})^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2}}$

Regresia: intervale de confidență (2)

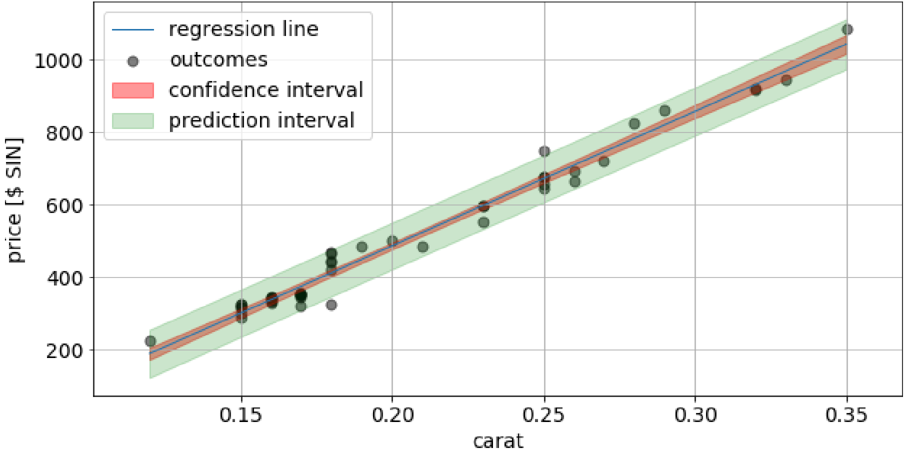
$$\text{stderr} = \hat{\sigma}\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{X})^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2}}$$

- termenul $\hat{\sigma}$: cu cât reziduurile au o dispersie mai mare, cu atât mai larg e intervalul de confidență
- cu creșterea lui n, standard error și deci intervalul de confidență, se restrâng
- termenul '1' arată că intervalul pentru predicție e mai larg ca intervalul pentru dreapta de regresie
- cu cât suntem mai aproape de media $\bar{X}$, cu atât mai bine, eroarea standard e mai mică
- cu cât variabilitatea lui X este mai mare, cu atât mai bine, intervalul de confidență e mai restrâns

Regresia: intervale de confidență (3)

```
def f(x):
    return beta0 + beta1 * x

x1 = np.linspace(np.min(x), np.max(x), 100)
y1 = f(x1)

# t quantile
t = stats.t.ppf(0.975, df=n-2)

# dispersia reziduurilor
sigma = np.sqrt(np.sum(lm.resid**2)/(n-2))

# confidence interval pentru dreapta
ci = t * sigma * np.sqrt(1/n + (x1-np.mean(x))**2 / np.sum((x-np.mean(x))**2))

# confidence interval pentru predictie (prediction interval)
pi = t * sigma * np.sqrt(1 + 1/n + (x1-np.mean(x))**2 / np.sum((x-np.mean(x))**2))

fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(10, 5))
ax.scatter(x, y, c='k', alpha = .5, s=50)
ax.plot(x1, y1, lw=1)
ax.fill_between(x1, y1-ci, y1+ci, color='red', alpha=0.4)
ax.fill_between(x1, y1-pi, y1+pi, color='green', alpha=0.2)
ax.set(xlabel="carat", ylabel="price [$ SIN]")
ax.grid(True)
ax.legend(['regression line', 'outcomes', 'confidence interval', 'prediction interval'])
plt.show()
```

Confidence Interval și Prediction Interval



1 Coeficienții regresiei liniare

2 Residuals

3 Inferența în regresie

4 Regresia de mai multe variabile

Analiza regresiei de mai multe variabile (predictors)

- când vrem să prezicem Y pe baza unui X_1, poate exista suspiciunea că de fapt, există un alt predictor X_2 care îl influențează de fapt pe X_1, deci X_2 este 'adevăratul predictor' pentru Y
- exemplu: legătura dintre bomboanele cu mentă și funcția pulmonară (măsurată ca și capacitate)
  - un posibil argument ar putea fi cum că fumătorii folosesc mai mult bomboanele mentolate, iar fumatul este legat de scăderea capacității pulmonare
  - pentru a putea convinge, ar trebui să vedem dacă fumătorii ce folosesc bomboane mentolate au capacitate pulmonară redusă, precum și ne-fumătorii ce folosesc bomboane mentolate au de asemenea capacitate pulmonară redusă - în acest context am putea verifica ipoteza că doar bomboanele în sine au efect asupra capacității
  - ar trebui să găsim aceeași corelație indiferent de status-ul fumător/nefumător
  - prin regresie, menținem constant acest status și investigăm cealaltă variabilă

Regresia multi-variabilă: exemplu

- multivariable regression este un instrument puternic pentru predicție
- presupunem o companie de asigurări vrea să prezică, pe baza cererilor de despăgubire din anii precedenți, câte zile de spitalizare va necesita o persoană pentru anul curent
- există mulți predictori (features) conținute în aceste cereri; regresia liniară simplă nu e potrivită
- cum se încorporează mai mulți predictori în regresie?
- care e consecința adăugării mai multor variabile de regresie? overfitting?
- dar dacă omitem predictori?

Modelul liniar

- general linear model (GLM) extinde o regresie simplă prin adăugarea de termeni:

$$Y_i = \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \ldots + \beta_p X_{pi} + \epsilon_i = \sum_{k=1}^{p} \beta_k X_{ki} + \epsilon_i$$

- în mod tipic, $X_{1i} = 1$, astfel încât β_1 este intercept-ul[3]
- metoda celor mai mici pătrate (adică estimarea maximum likelihood[4] sub ipoteza Gaussiană iid a erorilor) minimizează:

$$\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \sum_{k=1}^{p} \beta_k X_{ki} \right)^2$$

[3] v. add_constant în modelul OLS din statmodels

[4] maximum likelihood estimator se aplică la căutarea parametrilor care se potrivesc cel mai bine datelor

Modelul liniar

- de observat că modelul liniar presupune liniaritate în coeficienți; astfel:

$$Y_i = \beta_1 X_{1i}^2 + \beta_2 X_{2i}^2 + \ldots + \beta_p X_{pi}^2 + \epsilon_i$$

este tot un model liniar, deși am ridicat la pătrat predictorii

Coeficienții regresiei multi-variabilă

- considerăm modelul regresiei prin origine - Y_i și X_i sunt shiftate în origine (medie zero)
- din cursul anterior:

$$\beta_1 = Cor(Y, X)\frac{Sd(Y)}{Sd(X)} = \frac{Cov(Y, X)}{Sd(X)Sd(Y)}\frac{Sd(Y)}{Sd(X)} = \frac{Cov(Y, X)}{Var(X)}$$
$$= \frac{\sum_i (Y_i - \bar{Y})(X_i - \bar{X})}{\sum_i (X_i - \bar{X})^2}$$
$$= \frac{\sum_i Y_i X_i}{\sum_i X_i^2}$$

- considerăm două variabile regressor, $Y_i = \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \epsilon_i$, pentru care minimizăm:

$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_1 X_{1i} - \beta_2 X_{2i})^2$$

Coeficienții regresiei multi-variabilă (2)

- facem notația:

$$\sum_{i=1}^{n}(\underbrace{Y_i - \beta_1 X_{1i}}_{\tilde{Y}_i} - \beta_2 X_{2i})^2$$

- atunci:

$$\beta_2 = \frac{\sum_i \tilde{Y}_i X_{2i}}{\sum_i X_{2i}^2}$$

- introducem în prima relație:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[Y_i - \beta_1 X_{1i} - \frac{\sum_j (Y_j - \beta_1 X_{1j}) X_{2j}}{\sum_i X_{2j}^2} X_{2i}\right]^2$$

Coeficienții regresiei multi-variabilă (3)

- după mai multe prelucrări:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[Y_i - \underbrace{\frac{\sum_j Y_j X_{2j}}{\sum_j X_{2j}^2}}_{b} X_{2i} - \beta_1\left(X_{1i} - \underbrace{\frac{\sum_j X_{1j} X_{2j}}{\sum_j X_{2j}^2}}_{a} X_{2i}\right)\right]^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left[Y_i - bX_{2i} - \beta_1\left(X_{1i} - aX_{2i}\right)\right]^2$$

- coeficientul b are dimensiunea unui β dacă se face regresia lui Y_i funcție de X_{2i}
- idem pentru a, pentru regresia lui X_{1i} funcție de X_{2i}

Coeficienții regresiei multi-variabilă (4)

- după mai multe prelucrări:

$$\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - bX_{2i})(X_{1i} - aX_{2i})}{\sum_{i=1}^{n}(X_{1i} - aX_{2i})^2}$$

- coeficientul β_1 este calculat ca și cum am scoate contribuția (reziduul) lui X_2 din X_1 respectiv reziduul lui X_2 din Y și apoi am face regresia prin origine
- regresia multi-variabilă calculează coeficientul β_1 ca pentru efectul lui X_2 (celălalt), eliminat atât din răspunsul Y cât și din predictorul X_1
- pentru β_2 se obține o formulă similară
- β_2 este coeficientul obținut dacă eliminăm X_1 atât din răspunsul Y cât și predictorul X_1
- **coeficientul regresiei multi-variabilă se calculează prin eliminarea efectului celorlalți predictori atât din răspuns cât și din predictorul vizat**

Cazul general

- metoda celor mai mici pătrate va trebui să minimizeze:

$$\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \beta_1 X_{1i} - \beta_2 X_{2i} - \ldots - \beta_p X_{pi})$$

- pentru doar doi regresori (intercept și slope), vom minimiza suma pătratelor distanțelor față de o linie
- pentru trei regresori, minimizăm suma pătratelor distanțelor dintre puncte și plan
- pentru mai mult de trei regresori (4 și mai mulți), avem de-a face cu un hiperplan

Cazul general (2)

- în calculul lui β_1, contribuția celorlalți regresori, $X_2, X_3, \dots X_p$ a fost înlăturată liniar atât din Y cât și din X_1:

$$\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \sum_{k=2}^{p} b_k X_{ki})(X_{1i} - \sum_{k=2}^{p} a_k X_{ki})}{\sum_{i=1}^{n}(X_{1i} - \sum_{k=2}^{p} a_k X_{ki})^2}$$

unde a_k și b_k sunt generalizările lui a și b anteriori, nu pentru 2, ci pentru k

- regresia liniară 'ajustează' coeficientul pentru impactul liniar al celorlalte variabile
- atenție, fiecare din acești termeni de la numitor și de la numărător au dimensiunile unor reziduuri (ce rămâne după ce dependența liniară a fost înlăturată); ca și cum am face regresia fără această componentă

Interpretarea coeficienților

- considerăm media prezisă pentru un set de valori ai regresorilor:

$$E[Y|X_1 = x_1, \dots X_p = x_p] = \sum_{k=1}^{p} \beta_k x_k$$

- dacă incrementăm doar X_1 cu 1 și restul rămân la fel:

$$E[Y|X_1 = x_1 + 1, \dots X_p = x_p] = \beta_1(x_1 + 1) + \sum_{k=2}^{p} \beta_k x_k$$

- scădem cele două ecuații:

$$E[Y|X_1 = x_1 + 1, \dots X_p = x_p] - E[Y|X_1 = x_1, \dots X_p = x_p]$$
$$= \beta_1(x_1 + 1) + \sum_{k=2}^{p} \beta_k x_k - \sum_{k=1}^{p} \beta_k x_k = \beta_1$$

- coeficientul unui regresor reprezintă schimbarea așteptată în răspunsul Y pe unitatea de regresor X dacă ceilalți regresori nu se modifică

Reziduuri și variația lor

- toate raționamentele pentru Simple Linear Regression se extind pentru regresia liniară multi-variabilă
- modelul este $Y_i = \sum_{k=1}^{p} \beta_k X_{ik} + \epsilon_i$, unde $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
- răspunsul estimat $\hat{Y}_i = \sum_{k=1}^{p} \hat{\beta}_k X_{ik}$
- reziduurile $e_i = Y_i - \hat{Y}_i$
- estimatorul dispersiei $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i-1}^{k} e_i^2$

Statistici și intervale de confidență

- coeficienții au erori standard, anume $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_k}$, iar

$$\frac{\hat{\beta}_k - \beta_k}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_k}}$$

  urmează o distribuție Student T ci $n - p$ grade de libertate
- răspunsurile prezise (estimările) au erori standard, putem calcula intervalele de confidență pentru predicție și pentru dreapta de regresie

Note

- regresia liniară (modelul liniar) este cel mai aplicat model de ML (conduce detașat)
- modelul liniar este primul model de încercat pentru un set nou de date, deoarece oferă relații ușor de explicat între predictori și răspuns
- exemplu celebru: seriile de timp precum sunetul sunt descompuse în armonici - Transformata Fourier Discretă este un model liniar
- putem aproxima satisfăcător funcții complicate
- putem folosi variabile de tip categorie ca predictori (ANOVA, ANCOVA)