In [1]:

```
options(repr.plot.width = 8, repr.plot.height = 6)
```

Регрессия: датасет Yacht Hydrodynamics ¶

http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Yacht+Hydrodynamics#
(http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Yacht+Hydrodynamics)

Для парусных яхт нужно предсказать остаточное сопротивление на единицу массы смещения от размеров яхты и ее скорости.

In [2]:

```
t <- read.table('yacht_hydrodynamics.data', sep = ',', header = TRUE)
t[1:5,]
```

A data.frame: 5 × 7

Longitudinal_position	Prismatic_coefficient	Length.displacement_ratio	Beam.draught_ratio	Leng
<dbl>	<dbl>	<dbl>	<dbl>	
-2.3	0.568	4.78	3.99	
-2.3	0.568	4.78	3.99	
-2.3	0.568	4.78	3.99	
-2.3	0.568	4.78	3.99	
-2.3	0.568	4.78	3.99	

Разделение выборки на обучающую и тестовую

In [3]:

```
# install.packages('caret')
library(caret)

a <- createDataPartition(t$Residuary_resistance, p = 0.7, list = FALSE)
train <- t[a,]
test <- t[-a,]
```

```
Loading required package: lattice

Loading required package: ggplot2
```

Обучение

```
lm(formula, data, subset, weights, na.action, ...)
```

- `formula` -- формула
- `data` -- данные
- `subset` -- указывает на подмножество наблюдений, которые нужно использоваться для обучения

- `weights` -- веса для взвешенного МНК
- `na.action` -- функция, указывающая, что делать с пропусками

Возвращает объект, у которого есть:

- `coefficients` -- вектор коэффициентов
- `residuals` -- остатки модели

Полная справка:

In [4]:

```
?lm
```

Обучаем на train модель вида $Residuary\_resistance = \theta_1 + \theta_2 \cdot Froude\_number$

In [5]:

```
model <- lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number, data = train)
model
```

```
Call:
lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number, data = train)

Coefficients:
  (Intercept)  Froude_number
       -24.22         120.89
```

Оценки параметров линейной регрессии

In [6]:

```
model$coefficients  # все коэффициенты
model$coefficients[1]  # взять первый коэффициент
```

(Intercept)
-24.2156539887165
Froude_number
120.894337147324

(Intercept): -24.2156539887165

Ковариационная матрица вектора $\widehat{\theta}$ в условиях гомоскедастичности

In [7]:

```
vcov(model)
```

A matrix: 2 × 2 of type dbl

	(Intercept)	Froude_number
(Intercept)	3.243856	-10.04964
Froude_number	-10.049644	34.99755

Свойства (в гауссовской линейной модели)

Некоторая информация о модели. Оба признака значимы, поскольку pvalue мало. То есть отвергаются гипотезы $\theta_1 = 0$ и $\theta_2 = 0$.

Печатает:

Остатки: минимум, 0.25-квантиль, медиана, 0.75-квантиль, максимум

Для каждого коэффициента: его оценка, стандартная ошибка, значение t-статистики гипотезы о незначимости коэффициента, pvalue этой гипотезы, звездочки значимости (чем больше, тем более значим коэффициент)

RSS и число степеней свободы, R^2 m его поправленная версия, значение F-статистики критерия Фишера о значимости регрессии вообще, число степеней свободы распределения Фишера, pvalue этой гипотезы.

In [8]:

```
summary(model)
```

```
Call:
lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number, data = train)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-11.237  -7.745  -1.761   6.262  32.233 

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)    -24.216      1.801  -13.45   <2e-16 ***
Froude_number  120.894      5.916   20.44   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 8.795 on 214 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6612,    Adjusted R-squared:  0.6596 
F-statistic: 417.6 on 1 and 214 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Можно вытащить отдельные числа

In [9]:

```
summary(model)$r.squared
```

0.661185066504209

Доверительные интервалы для коэффициентов

In [10]:

```
confint(model, level = 0.95)
```

A matrix: 2 × 2 of type dbl

	2.5 %	97.5 %
(Intercept)	-27.76576	-20.66554
Froude_number	109.23349	132.55518

Предсказания

Предсказания строятся с помощью универсальной функции `predict` . Для линейной регрессии она эквивалентна функции `predict.lm` . По ней можно получить справку:

In [11]:

```
?predict.lm
```

В предположениях гауссовской линейной модели можно построить два типа интервалов -- доверительный (`confidence`) и предсказательный (`prediction`). Первый является доверительными интервалом в обычном смысле для среднего значения отклика. Второй является интервалом, в котором с большой вероятностью лежит само значение отклика. Второй итервал всегда шире первого.

Предсказание значений на новых объектах вместе с доверительным интервалом

In [12]:

```
predicted <- predict(model, test, level = 0.95, interval = 'confidence')
predicted[1:3,]
```

A matrix: 3 × 3 of type dbl

	fit	lwr	upr
2	-6.081503	-8.068719	-4.094287
3	-3.059145	-4.820265	-1.298025
8	12.052647	10.863675	13.241619

Предсказание значений на новых объектах вместе с предсказательным интервалом

In [13]:

```
predicted <- predict(model, test, level = 0.95, interval = 'prediction')
predicted[1:3,]
```

A matrix: 3 × 3 of type dbl

	fit	lwr	upr
2	-6.081503	-23.530023	11.36702
3	-3.059145	-20.483362	14.36507
8	12.052647	-5.323067	29.42836

MSE посчитаем ручками

In [14]:

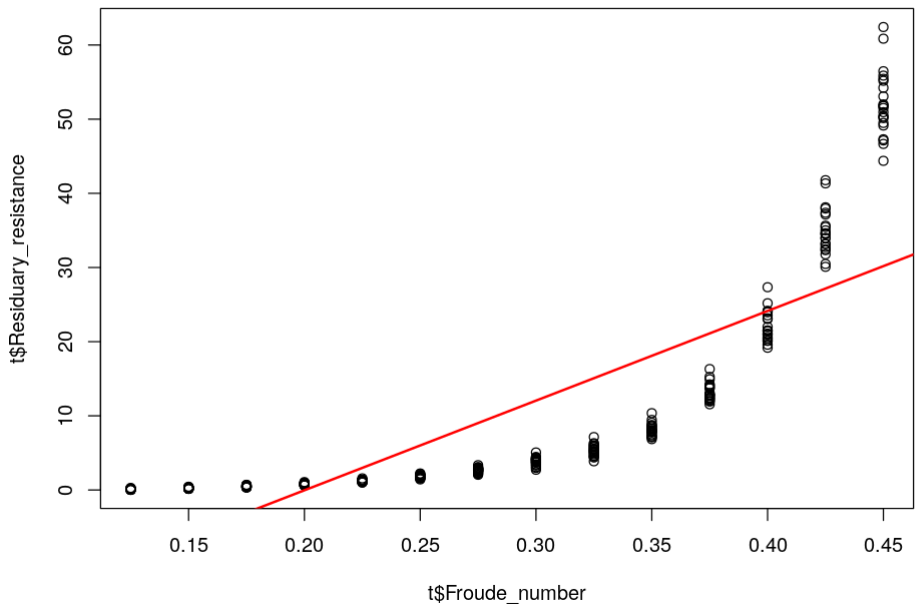
```
mean((predicted[,1] - test$Residuary_resistance) ^ 2)
```

83.7649037492296

Посмотрим на график предсказания

In [15]:

```
plot(t$Residuary_resistance ~ t$Froude_number)
x <- seq(from = 0, to = 0.5, by = 0.1)
lines(x, model$coefficients[1] + model$coefficients[2] * x, col = "red", lwd =
```



Еще примеры

Обучаем на train модель вида

$$Residuary\_resistance = \theta_1 + \theta_2 \cdot Froude\_number + \theta_3 \cdot Froude\_number^2 + \theta_4 \cdot Froude\_number^3$$

Обозначения в формуле:

`(x+y)^2` эквивалентно `x^2 + y^2 + xy` , что означает взять признаки `x^2` , `y^2` , `xy`

`I((x+y)^2)` означает взять признак `(x+y)^2` .

In [16]:

```
model_2 <- lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number + I(Froude_number^
             data = train)
model_2$coefficients
summary(model_2)
```

(Intercept)
-47.3500896285085
Froude_number
684.738189461049
I(Froude_number^2)
-3113.69365771249
I(Froude_number^3)
4611.89045639885

```
Call:
lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number + I(Froude_number^2)
+
    I(Froude_number^3), data = train)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-6.1376 -1.1891 -0.2925  1.2335 11.9024

Coefficients:
                   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)         -47.350      3.617  -13.09   <2e-16 ***
Froude_number       684.738     43.337   15.80   <2e-16 ***
I(Froude_number^2) -3113.694    160.041  -19.46   <2e-16 ***
I(Froude_number^3)  4611.890    184.852   24.95   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 2.057 on 212 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9816,    Adjusted R-squared:  0.9814
F-statistic:  3777 on 3 and 212 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Сравнить две модели можно в одной таблице

In [17]:

```r
# install.packages('memisc')
library("memisc")
print(mtable(model, model_2))
```

```
Loading required package: MASS


Attaching package: ‘memisc’


The following object is masked from ‘package:ggplot2’:

    syms


The following objects are masked from ‘package:stats’:

    contr.sum, contr.treatment, contrasts


The following object is masked from ‘package:base’:

    as.array



Calls:
model: lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number, data = trai
n)
model_2: lm(formula = Residuary_resistance ~ Froude_number + I(Froude_
number^2) +
    I(Froude_number^3), data = train)

================================================
                         model       model_2
------------------------------------------------
  (Intercept)         -24.216***    -47.350***
                       (1.801)       (3.617)
  Froude_number       120.894***    684.738***
                       (5.916)      (43.337)
  I(Froude_number^2)               -3113.694***
                                    (160.041)
  I(Froude_number^3)                4611.890***
                                    (184.852)
------------------------------------------------
  R-squared              0.661         0.982
  N                    216           216
================================================
  Significance: *** = p < 0.001;
                ** = p < 0.01; * = p < 0.05
```

Значение MSE куда лучше

In [18]:

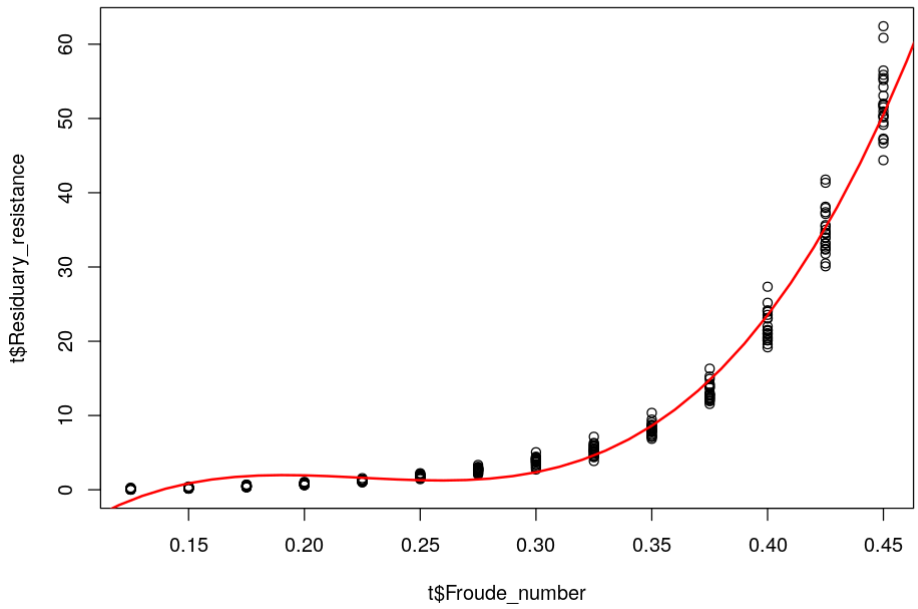
```
predicted <- predict(model_2, test)
mean((predicted - test$Residuary_resistance) ^ 2)
```

2.87253588934687

Посмотрим на график

In [19]:

```
plot(t$Residuary_resistance ~ t$Froude_number)
x <- seq(from = 0, to = 0.5, by = 0.01)
lines(x,
      model_2$coefficients[1] + model_2$coefficients[2] * x + model_2$coefficie
      col = "red", lwd = 2)
```



Обучим регрессию на всех фичах. Как видим, все остальные фичи незначимы - pvalue мало.

Чтобы взять в формулу все признаки, можно поставить просто точку

In [20]:

```
model <- lm(formula = Residuary_resistance ~ . + I(Froude_number^2) + I(Froude_
            data = train)
model$coefficients
summary(model)
```

(Intercept)
-38.1592123801995
Longitudinal_position
0.261148109075172
Prismatic_coefficient
-12.0388956894835
Length.displacement_ratio
2.95952272775717
Beam.draught_ratio
-1.23454031684979
Length.beam_ratio
-3.24403634146235
Froude_number
677.212705722252
I(Froude_number^2)
-3090.25519655445
I(Froude_number^3)
4589.50424004885

```
Call:
lm(formula = Residuary_resistance ~ . + I(Froude_number^2) +
    I(Froude_number^3), data = train)

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-5.615 -1.234 -0.120  1.155 11.216

Coefficients:
                           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)               -3.816e+01  8.114e+00  -4.703 4.68e-06 ***
Longitudinal_position      2.611e-01  8.794e-02   2.969  0.00334 **
Prismatic_coefficient     -1.204e+01  1.165e+01  -1.033  0.30272
Length.displacement_ratio  2.960e+00  3.676e+00   0.805  0.42163
Beam.draught_ratio        -1.235e+00  1.427e+00  -0.865  0.38792
Length.beam_ratio         -3.244e+00  3.703e+00  -0.876  0.38197
Froude_number              6.772e+02  4.186e+01  16.178  < 2e-16 ***
I(Froude_number^2)        -3.090e+03  1.546e+02 -19.992  < 2e-16 ***
I(Froude_number^3)         4.590e+03  1.785e+02  25.705  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 1.982 on 207 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9834,    Adjusted R-squared:  0.9827
F-statistic:  1529 on 8 and 207 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

MSE такое же

In [21]:

```
predicted <- predict(model, test)
mean((predicted - test$Residuary_resistance) ^ 2)
```

2.82817872742203

Отбор признаков

Процедура отбора фичей из библиотеки https://cran.r-project.org/web/packages/bestglm/bestglm.pdf (https://cran.r-project.org/web/packages/bestglm/bestglm.pdf)

In [22]:

```
# install.packages('bestglm')
library('bestglm')

bestglm(t, family = gaussian, IC = "BIC")
```

```
Loading required package: leaps


BIC
BICq equivalent for q in (0, 0.924068917556141)
Best Model:
               Estimate Std. Error   t value     Pr(>|t|)
(Intercept)   -24.48407   1.533574 -15.96537 3.673160e-42
Froude_number 121.66757   5.033863  24.16982 6.233076e-73
```

Прикладная статистика и анализ данных, 2019

Никита Волков

https://mipt-stats.gitlab.io/ (https://mipt-stats.gitlab.io/)