Многомерные статистические методы 2021

Формулы по курсу. Часть I

Архипова Марина Юрьевна,
профессор департамента статистики и анализа данных
Золотарев Антон Олегович, БСТ182

21 декабря 2021 г.

Содержание

1 Предварительный анализ данных

Коэффициент вариации:

$$V_s = \frac{S}{\overline{x}} \cdot 100\%$$

Относительное линейное отклонение:

$$K_d = \frac{\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})}{\overline{x}} \cdot 100\%$$

Квартильное отклонение:

$$d_k = \frac{Q_3 - Q_1}{2}$$

Относительный показатель квартильной вариации:

$$K_Q = \frac{d_k}{Me} = \frac{Q_3 - Q_1}{2 \cdot Q_2}$$

Интерквартильное отклонение:

$$IQR = Q_3 - Q_1$$

1.1 Диагностика выбросов

Правило 3σ (если $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$, то $P\{X \notin (\mu - 3\sigma; \mu + 3\sigma)\} = 0.0027$.):

$$[\overline{x} - 3 \cdot S \leq X \leq \overline{x} + 3 \cdot S]$$

Правило Чебышёва с параметрами (правило $k\sigma$):

$$[\overline{x} - k \cdot S \leq X \leq \overline{x} + k \cdot S]$$

Правило $k \cdot IQR$:

$$[Q_1 - k \cdot IQR \leq X \leq Q_3 + k \cdot IQR]$$

Если наблюдение находится вне рамок указанных интервалов, то оно считается выбросом по соответствующему правилу.

1.2 Визуализация выбросов и распределения

1.2.1 Ящичковая диаграмма

Линия на ящике - медиана;
Границы ящика - Q_1 и Q_3;
Границы усов через правило $k \cdot IQR$;
Точечки за пределами усов - выбросы
Пример графика

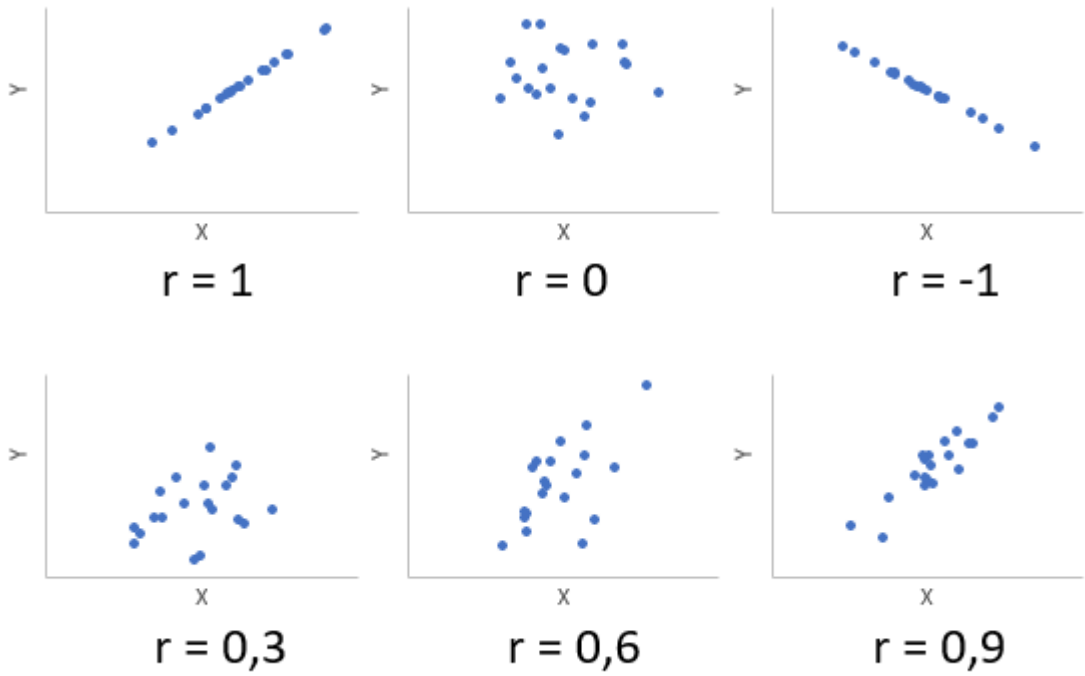
1.2.2 Stemplot/Листовая диаграмма

Корни дерева - самый левый разряд числа, количество листьев эквивалентно количеству наблюдений в стебле/разряде. Если числа приведены, например, от 1 до 25, до у первого стебля корнем вершины будет 0, у второго - 1, у третьего - 2.
Пример построения диаграммы
Подробнее о диаграмме

1.2.3 Dotplot/Точечная диаграмма

По оси X значения переменной, по оси У - их частота встречаемости. Если повторений нет, то, возможно, надо поделить на какое-то число, чтобы наблюдения "скучковались".
Пример построения диаграммы

2 Корреляционный анализ



2.1 Парные коэффициенты корреляции

$$r_{xy} = \frac{\overline{XY} - \overline{X} \cdot \overline{Y}}{S_x \cdot S_y}$$

Проверка значимости парного коэффициента корреляции (через критерий Стьюдента):

$$t = \frac{r \cdot \sqrt{n - l - 2}}{\sqrt{1 - r^2}}$$

r - оценка парного коэффициента, l - число фиксируемых переменных, n - количество наблюдений. Критическое значение находится через таблицу распределения Стьюдента (Ссылка на все таблицы от Мироникиной Ю.Н.). Если $|t| > t$, то парный коэффициент корреляции значимо отличен от нуля с вероятностью ошибки первого рода α.

Проверка значимости парного коэффициента корреляции (через критерий Фишера-Йейтса) осуществляется через сравнение найденного наблюдаемого значения коэффициента корреляции и критического значения, которое можно найти через таблицу Фишера-Йейтса

Интервальные оценки парного коэффициента корреляции:

1. Переход к статистике Фишера:

$$Z^{'} = \frac{1}{2} \cdot ln\frac{1+r}{1-r}$$

2. Находим доверительный интервал для статистики Фишера по всем знакомой и известной формуле из математической статистики:

$$P\left(Z^{'} - t_{\gamma}\sqrt{\frac{1}{n-l-3}} \leq Z \leq Z^{'} + t_{\gamma}\sqrt{\frac{1}{n-l-3}}\right) = \gamma$$

3. Осуществляем обратное преобразование Фишера по таблице и получаем ДИ для нашего коэффициента корреляции (можно воспользоваться функцией "ФИШЕРОБР"в Excel). Обращаем ваше внимание на то, что используемая нами статистика Фишера является нечётной функцией, то есть $Z^{'}(-r) = -Z^{'}(r)$.

2.2 Частные коэффициенты корреляции

$$\rho_{xy/z} = \frac{r_{xy} - r_{xz} \cdot r_{yz}}{\sqrt{(1-r_{xz}^2)(1-r_{yz}^2)}} = -\frac{A_{12}}{\sqrt{A_{11} \cdot A_{22}}}$$

Построение доверительных интервалов и проверка значимости частных коэффициентов корреляции производится через те же формулы, которые были приведены для парных коэффициентов корреляции, с одним уточнением: **для парных l=0, для частных** l **есть число фиксируемых переменных, например, в трехмерной модели** $l = 1$**, в** k**-мерной** $l = k - 2$.

2.3 Множественные коэффициенты корреляции

$$r_{1/2,3} = \sqrt{\frac{r_{12}^2 + r_{13}^2 - 2 \cdot r_{12} \cdot r_{13} \cdot r_2 3}{1 - r_{23}^2}} = \sqrt{1 - \frac{|R|}{A_{11}}}$$

|R| - определитель матрицы парных коэффициентов корреляции, A_{ij} - алгебраическое дополнение элемента r_{ij} корреляционный матрицы R.

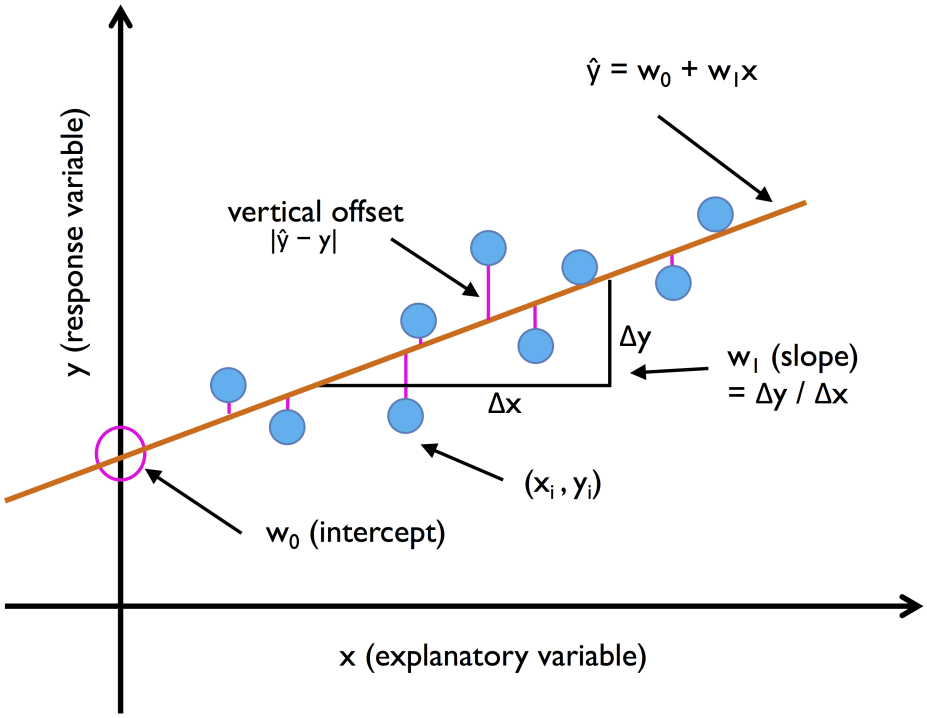
Множественный коэффициент корреляции, возведённый в квадрат, называется множественным коэффициентом детерминации и играет крайне важную роль в регрессионном анализе: он отражает, какая доля дисперсии целевой переменной может быть объяснена влиянием фиксируемых переменных (2, 3 в примере выше). То есть это своего рода верхняя граница качества регресионной модели, показывающая также качество отобранных для анализа переменных.

Проверка значимости множественного коэффициента корреляции через F-критерий Фишера-Снедекора:

$$F_{\text{набл}} = \frac{\frac{1}{k-1} r^2_{1/2,\ldots,k}}{\frac{1}{n-k}(1 - r^2_{1/2,\ldots,k})}$$

В рамках задач курса на ручной счёт вам предстоит работать лишь с трёхмерными моделями, где $k = 3$.

3 Регрессионный анализ



Рассмотрим частный случай модели двумерной регрессии (для задач на ручной счёт этого будет достаточно):

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

где y_i, x_i — значение зависимой и независимой переменной для наблюдения i (наблюдаемые величины), β_0, β_1 — коэффициенты уравнения регрессии, $\varepsilon_i \sim IID(0; \sigma^2)$ — случайная ошибка для i-го наблюдения (ненаблюдаемые величины). Параметры модели для оценивания: $\beta_0, \beta_1, \sigma^2$.

Оценки регрессионных коэффициентов b_0, b_1 могут быть получены методом наименьших квадратов (МНК):

$$L = \sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1 x_i)^2 \xrightarrow{b_0, b_1} min$$

и при выполнении условий Гаусса-Маркова оценки МНК являются эффективными в классе линейных несмещенных оценок.

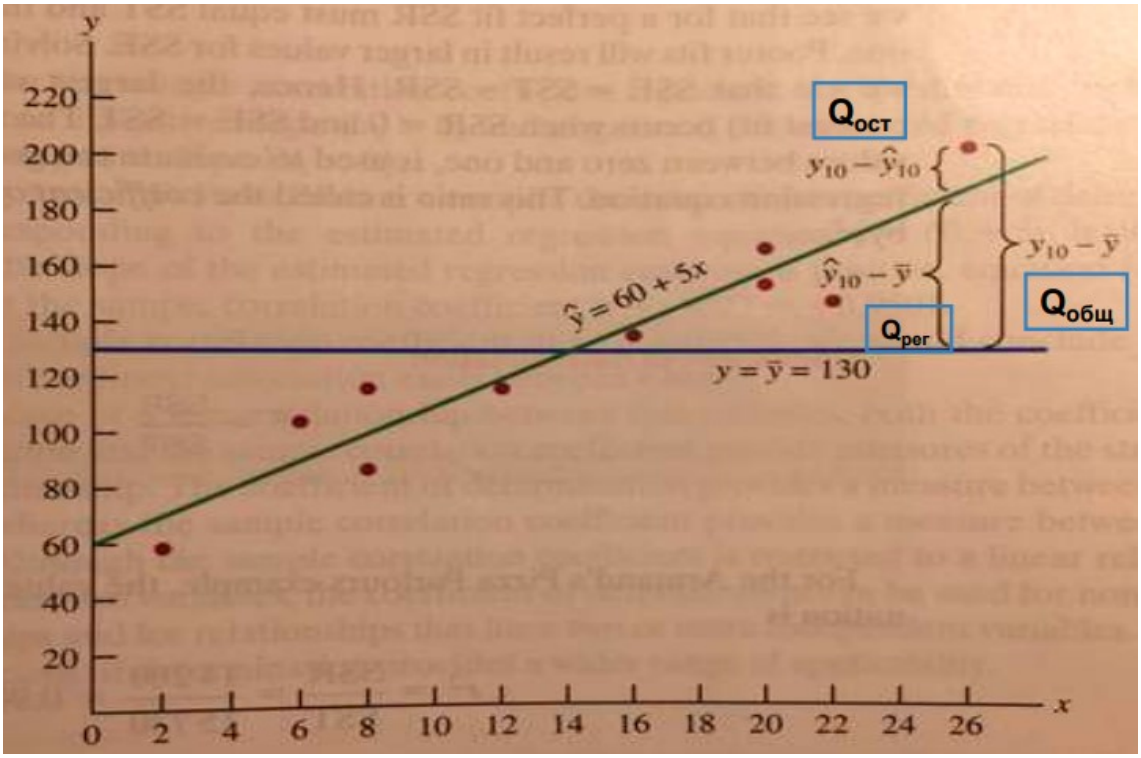
В результате решения оптимизационной задачи, мы получаем следующие формулы для нахождения оценок коэффициентов регрессии b_0, b_1:

$$b_0 = \overline{y} - b_1 \cdot \overline{x}$$

$$b_1 = \frac{\overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y}}{s_x^2}$$

s_x^2 здесь - это дисперсия объясняющей переменной. Смысловая нагрузка двух найденных коэффициентов такова: b_0 - точка пересечения линии регрессии с осью целевой переменной, необъясняемая признаками константа; b_1 - наклон линии регрессии, характеризует силу и направление влияния объясняющей перменной на целевую.

3.1 Отклонение выходов модели от реальных значений наблюдений



Квадраты отклонений целевой перменной (отсылка к МС: дисперсия, умноженная на количество наблюдений) в регресионном анализе обозначаются как $Q_{\text{общ}}$ или TSS, разбиваясь на две величины: Q_R (воздействие

объясняющей переменной, также обозначается RSS) и $Q_{\text{ост}}$ (необъяснённые в модели различия целевой переменной, также обозначается ESS). Формально:

$$TSS = RSS + ESS$$

$$TSS = Q_{\text{общ}} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2$$

$$RSS = Q_{\text{рег}} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$ESS = Q_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2$$

При этом следует заметить, что отношение $\frac{RSS}{TSS}$ представляет из себя коэффициент детерминации (в случае многомерной (хотя бы трёхмерной) регрессии уместно вспомнить про квадрат множественного коэффициента корреляции и проверить идентичность с коэффициентом детерминации):

$$r^2 = \frac{RSS}{TSS} = \frac{TSS - ESS}{TSS}$$

3.2 MSE и дисперсия коэффициентов

Остаточное среднеквадратическое отклонение:

$$s = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{ESS}{n-2}}$$

По аналогии с курсом математической статистики, мы можем оценить разброс найденных коэффициентов регрессии, посчитав их дисперсию:

$$s_{b_1} = \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}} = \frac{s}{\sqrt{(n-1)\cdot s_x^2}}$$

$$s_{b_0}^2 = s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}$$

3.3 Проверка гипотезы о значимости коэффициентов

Найденные СКО коэффициентов очень важны для проверки значимости регресионной модели (значимо ли влияют объясняющие переменные на целевую?). Проверка гипотезы о незначимости коэффициента регрессии:

$$t_{\text{набл}} = \frac{b_1}{s_{b_1}}$$

$$t_{\text{кр}}(\alpha, \nu = n - 2)$$

Если наблюдаемое значение больше критического, то гипотеза о незначимости отклоняется, то есть с вероятностью ошибки первого рода α существует статистически значимая линейная связь между объясняющей и целевой переменными.

Если у нас более одной объясняющей переменной, то необходимо применить F-test для проверки гипотезы:

$$F_{\text{набл}} = \frac{MSR}{MSE} = \frac{\frac{RSS}{k}}{\frac{ESS}{n-2}} = \frac{RSS \cdot (n-2)}{ESS \cdot k}$$

$$F_{\text{кр}}(\alpha, \nu_1 = 1, \nu_2 = n - 2)$$

где $MSR = \frac{RSS}{k}$ - среднеквадратичное отклонение, объясняемое в рамках регрессионной модели, k - количество объясняющих переменных.

3.4 Доверительные интервалы

Также значимость коэффициентов регрессии можно вычислять через построение доверительных интервалов:

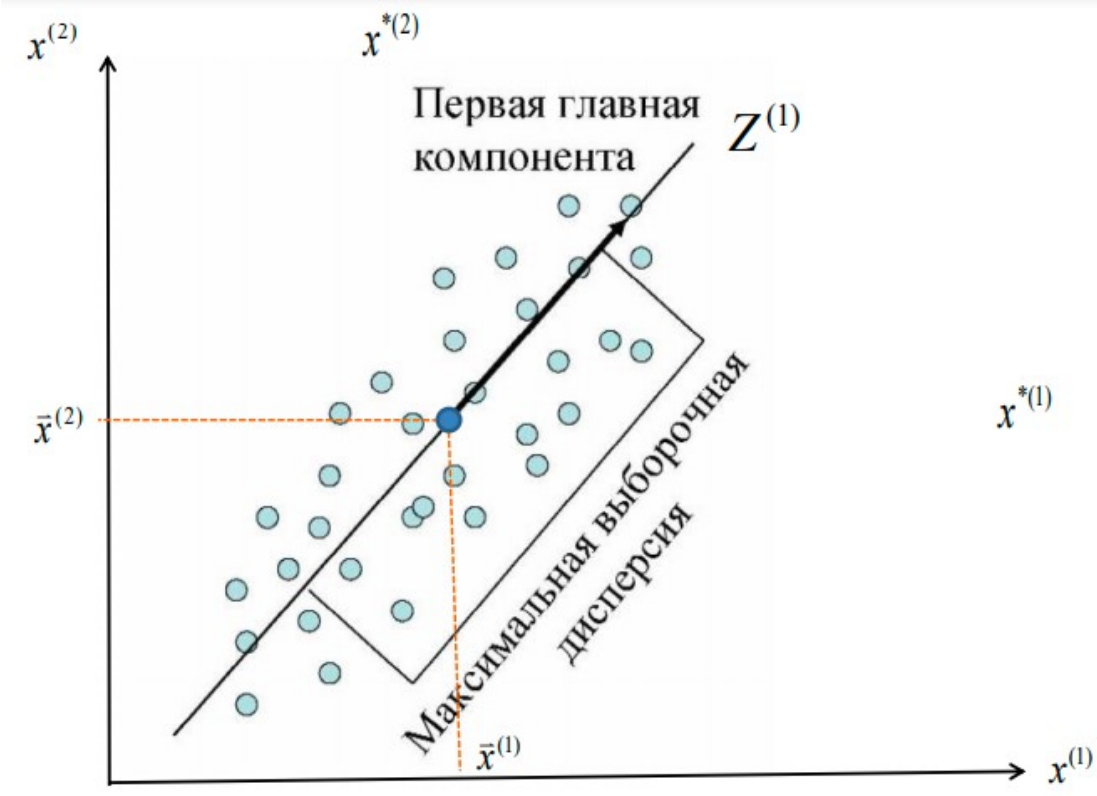
$$P(b_1 - t_\alpha s_{b_1} \leq \beta_1 \leq b_1 + t_\alpha s_{b_1}) = \gamma$$

$$P(b_0 - t_\alpha s_{b_0} \leq \beta_0 \leq b_0 + t_\alpha s_{b_0}) = \gamma$$

t_α - из таблицы распределения Стьюдента для заданного α и $\nu = n - 2$

При выполнении компьютерной работы крайне важным условием для проведения регресионного анализа через МНК является проверка модели на гомоскедастичность - мы должны удостовериться в постоянстве(одинаковости) дисперсии рассматриваемых признаков!

4 Метод главных компонент



Этапы проведения МГК:

(A) Стандартизация переменных:

$$X^* = \frac{X - \overline{X}}{S}$$

$\overline{X}$ - вектор средних для каждой объясняющей переменой
S - вектор СКО для каждой объясняющей переменной

(B) Расчет корреляционной матрицы:
$R = \frac{1}{n} X^{*T} X^*$, матрица R должна обладать размерностью $k \times k$, где k - количество объясняющих переменных.

(C) Поиск собственных значенний корреляционной матрицы (рассмотрен случай для 2 объясняющих переменных):

$$det \begin{pmatrix} 1-\lambda & r_{12} \\ r_{12} & 1-\lambda \end{pmatrix} = (1-\lambda)^2 - r_{12}^2 = 0$$

Легко вывести, что для случая двух объясняющих переменных мы имеем следующие собственные значения: $\lambda_1 = 1 + r_{12}$, $\lambda_2 = 1 - r_{12}$
Поиск собственных векторов:
$\lambda_1 = 1 + r_{12}$

$$\begin{pmatrix} 1-1-r_{12} & r_{12} \\ r_{12} & 1-1-r_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0,\ l_1' = \begin{pmatrix} ? \\ ? \end{pmatrix}$$

$\lambda_2 = 1 - r_{12}$

$$\begin{pmatrix} 1-1+r_{12} & r_{12} \\ r_{12} & 1-1+r_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0,\ l_2' = \begin{pmatrix} ? \\ ? \end{pmatrix}$$

(D) Построение ортогональной матрицы собственных векторов:
$L = (l_1\ l_2)$
$l_i = \frac{l_i'}{\sqrt{(l_i')^T l_i'}}$

(E) Построение матрицы факторных нагрузок:
$A = L\Lambda^{1/2} = (A_1\ A_2)$

(F) Построение матрицы нормированных значений главных компонент:
$Z = X^*(A^T)^{-1}$
Напомним, что обратная матрица для размерности 2*2 предполагает смену мест значений на главной диагонали и изменение знаков на побочной, при этом каждое из значений необходимо поделить на определитель исходной матрицы.

(G) Поиск коэффицентов регрессии, построенной на главные компоненты:
$\hat{\beta} = (\tilde{Z}^T\tilde{Z})^{-1}\tilde{Z}^T Y$
$\tilde{Z}$ отличается от найденной пунктом ранее матрицы Z лишь добавлением слева столбца из единичек, обозначающих константу.

Удельный вклад 1-й компоненты: $\frac{\lambda_1}{\sum\lambda_i} = \frac{1+r_{12}}{2}$, удельный вклад 2-й компоненты: $\frac{\lambda_2}{\sum\lambda_i} = \frac{1-r_{12}}{2}$.

5 Кластерный анализ

5.1 Методы вычисления расстояния между наблюдениями

Евклидово расстояние:

$$d_E(x_i,x_j) = \sqrt{\sum_{l=11}^{k}(x_{il} - x_{jl})^2}$$

Взвешенное Евклидово расстояние:

$$d_{WE}(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{l=1}^{k} w_l(x_i^{(l)} - x_j^{(l)})^2}$$

Где $\sum_{l=1}^{k} w_l = 1$ k - количество признаков, в пространстве которых находятся наблюдения

Расстояние по метрике городских кварталов (Манхэттеновское, Хемминговo):

$$d_T(x_i, x_j) = |x_{i1} - x_{j1}| + |x_{i2} - x_{j2}| = \sum_{l=1}^{k} |x_i^{(l)} - x_j^{(l)}|$$

Расстояние Махаланобиса:

$$d_M = \sqrt{(x_i - x_j)^T \Sigma^{-1}(x_i - x_j)}$$

Расстояние Минковского:

$$d_T(x_i, x_j) = \left(\sum_{l=1}^{k} |x_i^{(l)} - x_j^{(l)}|^p\right)^{1/p}$$

Большее количество методов вычисления расстояния между объектами можно посмотреть в Энциклопедическом словаре расстояний.

5.2 Методы вычисления расстояния между группами наблюдений

- “ближнего соседа”;
  $d_{min}(S_l,S_m) = min_{x_i \in S_l, x_j \in S_m} d(x_i,x_j)$

- “дальнего соседа”;
  $d_{max}(S_l,S_m) = max_{x_i \in S_l, x_j \in S_m} d(x_i,x_j)$

- средней связи;
  $d_{average}(S_l,S_m) = \frac{1}{n_l n_m} \sum_{x_i \in S_l, x_j \in S_m} d(x_i,x_j)$

- центра тяжести.
  $d_{center}(S_l,S_m) = d(\bar{x_i},\bar{x_j})$

5.3 Функционалы качества

- Сумма внутриклассовых дисперсий:

$$Q_1(S) = \sum_{l=1}^{p} \sum_{O_i \in S_i} d^2(O_i, \bar{X}(l)) \to min,$$

  p – число классов;

  S_l – l-ый класс в классификации S;

  $\bar{X}(l)$ – центр класса S_l.

- Сумма попарных внутриклассовых расстояний между объектами:

$$Q_2(S) = \sum_{l=1}^{p} \sum_{O_i O_j \in S_{il}} d^2(O_i, O_j) \to min$$

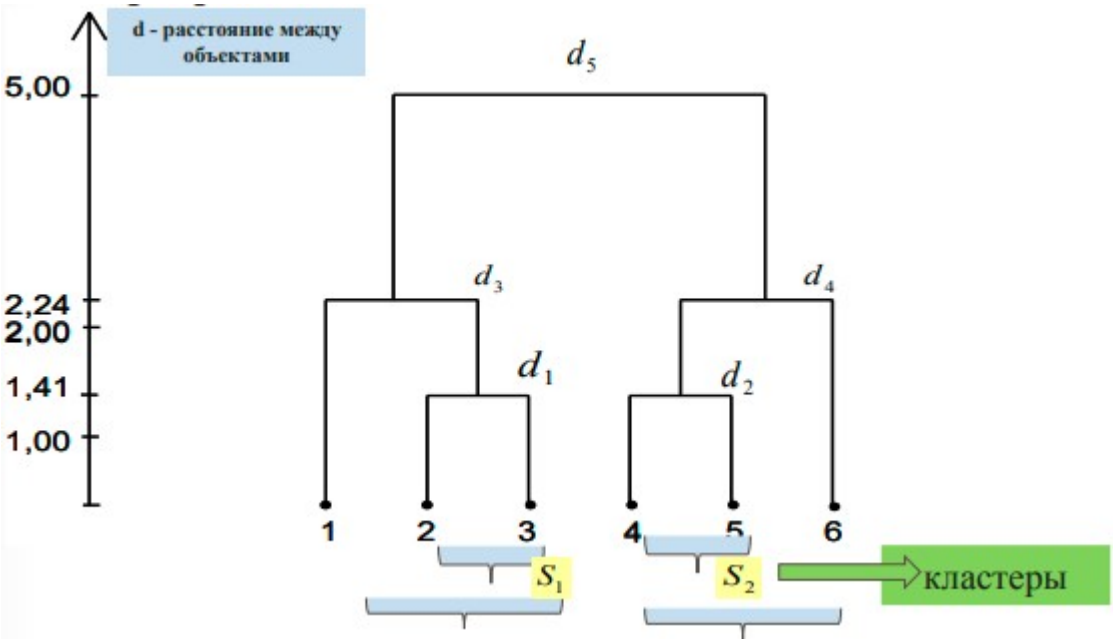
- Обобщённая внутриклассовая дисперсия:

$$Q_3(S) = \sum_{l=1}^{p} \sum_{j=1 \in k} S_j^2(l) \to min,$$

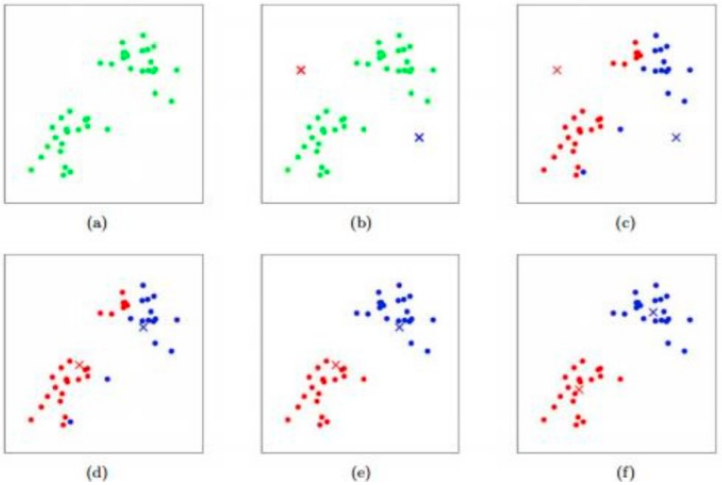
  $S_j^2(l)$ – оценка дисперсии j-ого признака l-ого класса.

5.4 Иерархические методы классификации (дендрограммы)

При необходимости кластеризации относительно небольшого числа наблюдений будет уместно представить визуализацию пошагового объединения наблюдений в кластеры через дендрограмму. По оси ОУ на ней представлено расстояние между сгруппированными объектами, по оси ОХ - номера объединяемых наблюдений:



5.5 Метод классификации через k-средних



При необходимости кластеризации большого числа наблюдений следует заранее определить оптимальное число кластеров (в машинном обучении число кластеров называется гиперпараметром) и вычислять принадлежность наблюдений к тому или иному классу через итеративные алгоритмы, наиболее популярным из которых является алгоритм к-средних (k-means):

Как применяется метод?

(A) Выбрать случайно заданные координаты центров кластеров $(c_1, c_2, ..., c_K)$ для того количества кластеров, которое мы избрали оптимальным

(B) Отнести каждый объект к ближайшему из случайно на предыдущем шаге заданных центров:

$$y_i = arg\ min\ d(x_i, c_j)$$

(C) Найти центр тяжести для каждой совокупности наблюдений, объединённых на данной итерации в один кластер, и переместить в этот центр тяжести центр каждого из кластеров (для каждого кластера разный центр тяжести!):

$$c_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot I[y_i = j]}{\sum_{i=1}^{n} I[y_i = j]}$$

(D) Повторять два предыдущих шага до момента, пока на новой итерации наблюдения не перестанут переходить из одного кластера в другой

6 Дискриминантный анализ

7 Решающие деревья

7.1 Задача классификации

7.2 Задача регрессии

8 Секретные темы, название которых вы узнаете позже...