Dzień 1 - Model liniowy

Spis treści

Model liniowy

Wersja pdf

Rozważamy wpływ zbioru k zmiennych $X_1, \ldots, X_k$ na zmienną Y. Należy wprowadzić do modelu jak największą liczbę zmiennych niezależnych oraz powinny się w nim znaleźć zmienne silnie skorelowane ze zmienną zależną i jednocześnie jak najsłabiej skorelowane między sobą.

Liniowy model regresji wielowymiarowej:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 \cdot X_1 + \beta_2 \cdot X_2 + \ldots + \beta_k \cdot X_k + \varepsilon.$$

β_i - współczynniki regresji (parametry modelu) opisujące wpływ i-tej zmiennej. ε - składnik losowy.

Załadujmy pakiety i pewną ramkę danych:

```
library(tidyverse)
devtools::install_github("kassambara/datarium")
data("marketing", package = "datarium")
```

```
head(marketing)
```

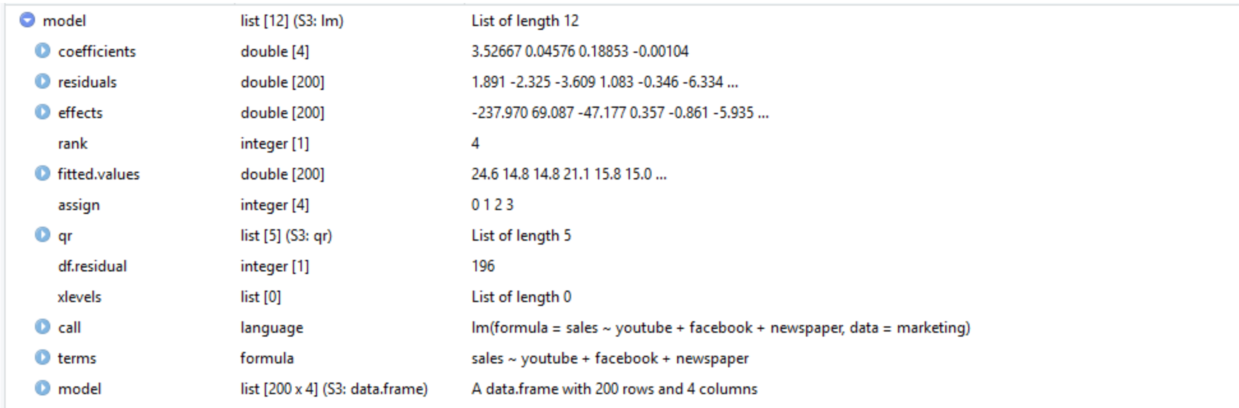
```
##   youtube facebook newspaper sales
## 1  276.12    45.36     83.04 26.52
## 2   53.40    47.16     54.12 12.48
## 3   20.64    55.08     83.16 11.16
## 4  181.80    49.56     70.20 22.20
## 5  216.96    12.96     70.08 15.48
## 6   10.44    58.68     90.00  8.64
```

Ramka `marketing` opisuje wydatki na reklamę w poszczególnych mediach oraz zyski ze sprzedaży. Naszym celem zbadanie wpływu wydatków na wyniki sprzedaży.

Sprawdźmy co otrzymamy w R:

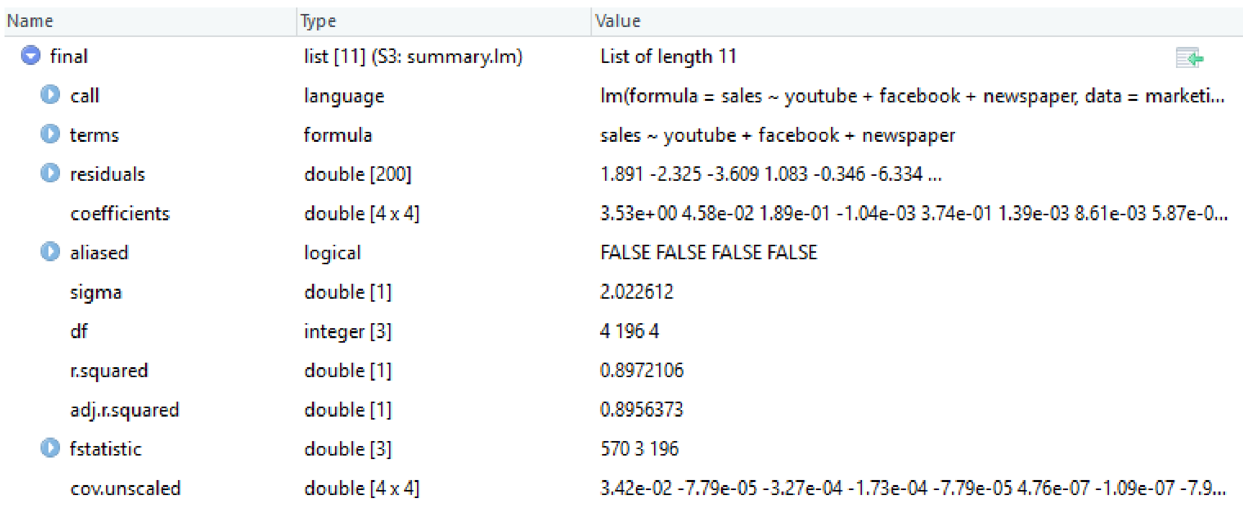
```
model <- lm(sales ~ youtube + facebook + newspaper, data = marketing)
final<-summary(model)
final
```

```
##
## Call:
## lm(formula = sales ~ youtube + facebook + newspaper, data = marketing)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
```



model	list [12] (S3: lm)	List of length 12
coefficients	double [4]	3.52667 0.04576 0.18853 -0.00104
residuals	double [200]	1.891 -2.325 -3.609 1.083 -0.346 -6.334 ...
effects	double [200]	-237.970 69.087 -47.177 0.357 -0.861 -5.935 ...
rank	integer [1]	4
fitted.values	double [200]	24.6 14.8 14.8 21.1 15.8 15.0 ...
assign	integer [4]	0 1 2 3
qr	list [5] (S3: qr)	List of length 5
df.residual	integer [1]	196
xlevels	list [0]	List of length 0
call	language	lm(formula = sales ~ youtube + facebook + newspaper, data = marketing)
terms	formula	sales ~ youtube + facebook + newspaper
model	list [200 x 4] (S3: data.frame)	A data.frame with 200 rows and 4 columns

Rysunek 1:



Name	Type	Value
final	list [11] (S3: summary.lm)	List of length 11
call	language	lm(formula = sales ~ youtube + facebook + newspaper, data = marketi...
terms	formula	sales ~ youtube + facebook + newspaper
residuals	double [200]	1.891 -2.325 -3.609 1.083 -0.346 -6.334 ...
coefficients	double [4 x 4]	3.53e+00 4.58e-02 1.89e-01 -1.04e-03 3.74e-01 1.39e-03 8.61e-03 5.87e-0...
aliased	logical	FALSE FALSE FALSE FALSE
sigma	double [1]	2.022612
df	integer [3]	4 196 4
r.squared	double [1]	0.8972106
adj.r.squared	double [1]	0.8956373
fstatistic	double [3]	570 3 196
cov.unscaled	double [4 x 4]	3.42e-02 -7.79e-05 -3.27e-04 -1.73e-04 -7.79e-05 4.76e-07 -1.09e-07 -7.9...

Rysunek 2:

```
## -10.5932  -1.0690   0.2902   1.4272   3.3951
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  3.526667   0.374290   9.422   <2e-16 ***
## youtube      0.045765   0.001395  32.809   <2e-16 ***
## facebook     0.188530   0.008611  21.893   <2e-16 ***
## newspaper   -0.001037   0.005871  -0.177     0.86
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 2.023 on 196 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.8972, Adjusted R-squared:  0.8956
## F-statistic: 570.3 on 3 and 196 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Widok w RStudio:

Strona w dokumentacji o funkcji `lm` - link.

Sprawdźmy typ:

```
class(model)
```

```
## [1] "lm"
```

```
class(final)
```

```
## [1] "summary.lm"
```

Współczynniki w modelu

Zapiszmy nasz model w postaci:

$$y = X\beta + \varepsilon,$$

gdzie:

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} X_{10} & X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p} \\ X_{20} & X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n0} & X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np} \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

Na mocy konwencji $x_{i0} = 1$ dla wszystkich $i = 1, \ldots, n$. Wtedy β_0 jest wyrazem wolnym. Możemy też zapisać następująco:

$$y_i = \beta_0 + X_{i1}\beta_1 + X_{i2}\beta_2 + \ldots + X_{ip}\beta_p + \varepsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Zazwyczaj taki układ równań nie ma rozwiązania. Naszym zadaniem jest znalezienie możliwych wektorów β, które "dają najlepsze dopasowanie". Innymi słowy, musimy "matematycznie" rozwiązać problem znalezienia

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta} S(\beta),$$

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left| y_i - \sum_{j=0}^{p} X_{ij}\beta_j \right|^2 = \left\| y - X\beta \right\|^2.$$

Rozwiązaniem jest:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

Dowód: wiki lub dowolny "dobry" podręcznik do zaawansowanej analizy matematycznej lub/i statystyki.

Jak to policzyć dla ramki `marketing`?

```
x<-cbind(rep(1,200),as.matrix(marketing[,c(1,2,3)]))
y<-as.matrix(marketing[,c(4)])
betah = solve(t(x) %*% x) %*% (t(x) %*% y)
betah
```

```
##                    [,1]
##             3.526667243
## youtube     0.045764645
## facebook    0.188530017
## newspaper -0.001037493
```

```
model$coefficients
```

```
##  (Intercept)      youtube     facebook    newspaper
##  3.526667243  0.045764645  0.188530017 -0.001037493
```

```
summary(model)$coefficients[,1]
```

```
##  (Intercept)      youtube     facebook    newspaper 
##  3.526667243  0.045764645  0.188530017 -0.001037493
```

```r
coef(model)
```

```
##  (Intercept)      youtube     facebook    newspaper 
##  3.526667243  0.045764645  0.188530017 -0.001037493
```

```r
betah-model$coefficients
```

```
##                    [,1]
##           -6.838974e-14
## youtube    2.428613e-16
## facebook  -3.885781e-16
## newspaper  5.861197e-16
```

Błąd standardowy regresji

Dopasowane wartości (przewidywane wartości) - wartości otrzymane poprzez model:

$$\hat{y} = X\hat{\beta} = Py, \quad P = X(X^T X)^{-1} X^T.$$

Zróbmy to w R:

```r
yh<-x %*% betah
p<-x %*%  solve(t(x) %*% x) %*% t(x)
yh2<- p %*% y
yh3<-model$fitted.values
head(cbind(yh,yh2,yh3))
```

```
##                           yh3
## 1 24.62877 24.62877 24.62877
## 2 14.80543 14.80543 14.80543
## 3 14.76920 14.76920 14.76920
## 4 21.11740 21.11740 21.11740
## 5 15.82641 15.82641 15.82641
## 6 14.97402 14.97402 14.97402
```

Zauważmy, że $PX = X$ oraz $PX - X = 0$. Niech $M = I_n - P$. Wtedy $MX = 0$. Macierz M nazywamy macierzą anihilującą.

W R mamy:

```r
head(p %*% x)
```

```
##        youtube facebook newspaper
## [1,] 1  276.12    45.36     83.04
## [2,] 1   53.40    47.16     54.12
## [3,] 1   20.64    55.08     83.16
## [4,] 1  181.80    49.56     70.20
## [5,] 1  216.96    12.96     70.08
## [6,] 1   10.44    58.68     90.00
```

```r
head(x)
```

```
##        youtube facebook newspaper
## [1,] 1  276.12    45.36     83.04
## [2,] 1   53.40    47.16     54.12
## [3,] 1   20.64    55.08     83.16
## [4,] 1  181.80    49.56     70.20
```

```
## [5,] 1  216.96    12.96     70.08
## [6,] 1   10.44    58.68     90.00
```

```
m<-diag(200)-p
head(m %*% x)
```

```
##                              youtube      facebook    newspaper
## [1,] -1.882175e-16 -1.170453e-13 -2.310565e-14 5.541834e-14
## [2,]  2.740863e-16  4.223288e-13 -4.801715e-15 4.510281e-15
## [3,] -1.526557e-15  2.353673e-13 -4.754530e-14 1.862399e-14
## [4,] -2.359224e-16  2.091660e-13 -1.249001e-15 4.567874e-14
## [5,]  1.023487e-16 -3.175238e-14 -2.490369e-14 7.316370e-14
## [6,] -1.242062e-15  3.108624e-13 -3.716472e-14 5.159762e-14
```

Teraz możemy obliczć reszty (residua):

$$\hat{\varepsilon} = y - \hat{y} = y - X\hat{\beta} = My = M(X\beta + \varepsilon) = (MX)\beta + M\varepsilon = M\varepsilon.$$

W R wygląda to następująco:

```
eh<-y-yh
head(eh)
```

```
##            [,1]
## [1,]  1.8912307
## [2,] -2.3254258
## [3,] -3.6092049
## [4,]  1.0826046
## [5,] -0.3464062
## [6,] -6.3340172
```

```
quantile(eh)
```

```
##          0%         25%         50%         75%        100%
## -10.5932245  -1.0689763   0.2901621   1.4271824   3.3950671
```

```
quantile(model$residuals)
```

```
##          0%         25%         50%         75%        100%
## -10.5932245  -1.0689763   0.2901621   1.4271824   3.3950671
```

```
quantile(summary(model)$residuals)
```

```
##          0%         25%         50%         75%        100%
## -10.5932245  -1.0689763   0.2901621   1.4271824   3.3950671
```

Dzięki resztom możemy estymować wariancję:

$$s^2 = \frac{\hat{\varepsilon}^T\hat{\varepsilon}}{n-p} = \frac{(My)^T My}{n-p} = \frac{y^T M^T My}{n-p} = \frac{y^T My}{n-p} = \frac{S(\hat{\beta})}{n-p}, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{n-p}{n} s^2$$

U nas $n = 200$ i $p = 4$ (liczba zmiennych plus 1 zgodnie z konwencją). Liczba $n - p$ odpowiada "w ujęciu statystycznym" liczbie stopni swobody.

W R mamy:

```
s2<- t(eh) %*% eh /196
s2<-as.numeric(s2)
sqrt(s2)
```

```
## [1] 2.022612
```

```
sigmah2<-196/200*s2
sqrt(sigmah2)
```

```
## [1] 2.002284
```

s^2 jest nieobciążonym estymatorem wariancji przy użyciu metody najmniejszych kwadratów. $\hat{\sigma}^2$ jest obciążonym estymatorem wariancji przy użyciu metody najmniejszej wiarygodności. Częściej jest używane s^2.

```
summary(model)$sigma
```

```
## [1] 2.022612
```

s^2 nazywa się odchyleniem standardowym składnika resztowego, błędem standardowym regresji, odchyleniem standardowym regresji…

"Dobroć" dopasowania

Współczynnik determinacji:

$$R^2 = \frac{\sum(\hat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum(y_i - \overline{y})^2} = \frac{y^T P^T L P y}{y^T L y} = 1 - \frac{y^T M y}{y^T L y} = 1 - \frac{SSR}{SST} = \frac{SSM}{SST},$$

gdzie $L = I_n - \mathbf{1}\mathbf{1}^T/n$, a $\mathbf{1}$ to macierz wymiaru $n \times 1$ składająca się z samych jedynek. SST - całkowita (totalna) suma kwadratów, SSR - suma kwadratów reszt (błędów), SSM - skorygowana suma kwadratów dla modelu.

W R mamy:

```
ym=mean(y)
ssm<-sum((yh-ym)^2)
sst<-sum((y-ym)^2)
r2<-ssm/sst
r2
```

```
## [1] 0.8972106
```

```
one<-matrix( rep( 1, len=200), nrow = 200)
l<-diag(200)- one %*% t(one) /200
t(y) %*% t(p) %*% l %*% p %*% y / (t(y) %*% l %*% y)
```

```
##           [,1]
## [1,] 0.8972106
```

```
1- t(y) %*% m %*% y /(t(y) %*% l %*% y)
```

```
##           [,1]
## [1,] 0.8972106
```

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

```
## [1] 0.8972106
```

Skorygowany współczynnik determinacji:

$$\overline{R}^2 = 1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-p}$$

W R mamy:

```
ro2<-1-((1-r2)*(199/196))
ro2
```

```
## [1] 0.8956373
```

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

```
## [1] 0.8956373
```

F-test

Powtórzmy i wprowadźmy nowe oznaczenia:

- n - liczba obserwacji
- p - liczba parametrów regresji (w modelu liniowym to liczba zmiennych objaśniających+1 zgodnie z konwencją)
- SSM - skorygowana suma kwadratów modelu

$$SSM = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \overline{y})^2$$

```
ssm<-sum((yh-ym)^2)
ssm
```

```
## [1] 6998.866
```

- SSR (SSE) - suma kwadratów reszt, błędów

$$SSR = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

```
ssr<-sum((y-yh)^2)
ssr
```

```
## [1] 801.8284
```

- SST - skorygowana totalna (całkowita) suma kwadratów

$$SST = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2$$

```
sst<-sum((y-ym)^2)
sst
```

```
## [1] 7800.694
```

Zachodzi równość:

$$SSM + SSR = SST$$

```
ssm+ssr
```

```
## [1] 7800.694
```

- DFM - skorygowane stopnie swobody modelu (u nas w modelu liniowym liczba zmiennych objaśniających), $DFM = p - 1$
- DFE - stopnie swobody błędu, $DFE = n - p$
- DFT - skorygowane totalne (całkowite) stopnie swobody, $DFT = n - 1$

Zachodzi:

$$DFM + DFE = DFT.$$

* MSM - średnia kwadratów modelu, $MSM = SSM/DFM$

```
msm<-ssm/3
msm
```

```
## [1] 2332.955
```

- MSE - średnia kwadratów błędów, $MSE = SSR/DFE$

```
mse<-ssr/196
mse
```

```
## [1] 4.090961
```

- MST - totalna (całkowita) średnia kwadratów, $MST = SST/DFT$

```
mst<-sst/199
mst
```

```
## [1] 39.19947
```

F-test dla regresji wielowymiarowej

$$H_0: \qquad \beta_1 = \beta_2 = \ldots = \beta_{p-1} = 0$$

$$H_1: \qquad \beta_j \neq 0 \text{ dla co najmniej jednego } j.$$

Wyliczamy statystykę:

$$F = \frac{MSM}{MSE} = \frac{\text{"wyjaśniona wariancja"}}{\text{ńiewyjaśniona wariancja"}}$$

```
f<-msm/mse
f
```

```
## [1] 570.2707
```

```
summary(model)$fstatistic
```

```
##    value    numdf    dendf
## 570.2707   3.0000 196.0000
```

Statystyka ta podlega rozkładowi F-Snedecora z $p-1$ i $n-p$ stopniami swobody. Ustalamy $\alpha = 0,05$.

```
qf(0.95, 3, 196)
```

```
## [1] 2.650677
```

Jeśli wartość statystyki jest większa kwantylowi, odrzucamy hipotezę zerową. W przeciwnym wypadku przyjmujemy hipotezę zerową.

W naszym wypadku odrzucamy hipotezę zerową. Innymi słowy, odrzucamy hipotezę że wydatki na reklamy na poszczególne media nie mają wpływu na sprzedaż.

Obliczmy wartość p:

```
p<-1-pf(f, 3,196)
p
```

```
## [1] 0
```

```r
fstat<-summary(model)$fstatistic
1-pf(fstat[1], fstat[2],fstat[3])
```

```
## value
##     0
```

W naszym wypadku jest to "bliskie" zeru", więc możemy przyjąć, że się zgadza.

Jeśli $p \leqslant \alpha$ odrzucamy H_0 przyjując H_1. W przeciwnym wypadku nie ma podstaw by odrzucić H_0.

t-test

Przypomnijmy, że

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

Wariancja wektora współczynników:

$$(VAR)(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}.$$

Zamieniając na esytmator nieobciążony:

$$(\widehat{VAR})(\hat{\beta}) = s^2 (X^T X)^{-1}$$

By otrzymać odchylenie standardowe poszczególnych współczynników, wybieramy elementy na głównej przekątnej ostatniej macierzy i potem je pierwiastkujemy.

```r
v<-s2 * solve(t(x) %*% x)
v
```

```
##                             youtube      facebook     newspaper
##            0.1400929170 -3.188728e-04 -1.338587e-03 -7.092255e-04
## youtube   -0.0003188728  1.945737e-06 -4.470395e-07 -3.265950e-07
## facebook  -0.0013385874 -4.470395e-07  7.415335e-05 -1.780062e-05
## newspaper -0.0007092255 -3.265950e-07 -1.780062e-05  3.446875e-05
```

```r
vcov(model)
```

```
##               (Intercept)       youtube      facebook     newspaper
## (Intercept)  0.1400929170 -3.188728e-04 -1.338587e-03 -7.092255e-04
## youtube     -0.0003188728  1.945737e-06 -4.470395e-07 -3.265950e-07
## facebook    -0.0013385874 -4.470395e-07  7.415335e-05 -1.780062e-05
## newspaper   -0.0007092255 -3.265950e-07 -1.780062e-05  3.446875e-05
```

```r
ste<-sqrt(diag(v))
sqrt(diag(vcov(model)))
```

```
## (Intercept)     youtube    facebook   newspaper
## 0.374289884 0.001394897 0.008611234 0.005871010
```

```r
summary(model)$coefficients[,2]
```

```
## (Intercept)     youtube    facebook   newspaper
## 0.374289884 0.001394897 0.008611234 0.005871010
```