Домашнее задание 3

Задание 1

a) В данном случае регрессором X являются значения переменной HP, а откликом Y – значения переменной MPG. Простая линейная регрессия имеет вид: $r(x) = \beta_0 + \beta_1 x$. Можно оценить $\hat{r}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$, где согласно лекции оценки

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N} (X_i - \bar{X_n})(Y_i - \bar{Y_n})}{\sum_{i=1}^{N} (X_i - \bar{X_n})^2}$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y_n} - \hat{\beta}_1 \bar{X_n}$$

In [1]:

```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

%matplotlib inline
```

In [2]:

```
data = pd.read_csv("data.txt", delim_whitespace=True)
data.head()
```

Out[2]:

	MAKE/MODEL	VOL	HP	MPG	SP	WT
0	GM/GeoMetroXF1	89	49	65.4	96	17.5
1	GM/GeoMetro	92	55	56.0	97	20.0
2	GM/GeoMetroLSI	92	55	55.9	97	20.0
3	SuzukiSwift	92	70	49.0	105	20.0
4	DaihatsuCharade	92	53	46.5	96	20.0

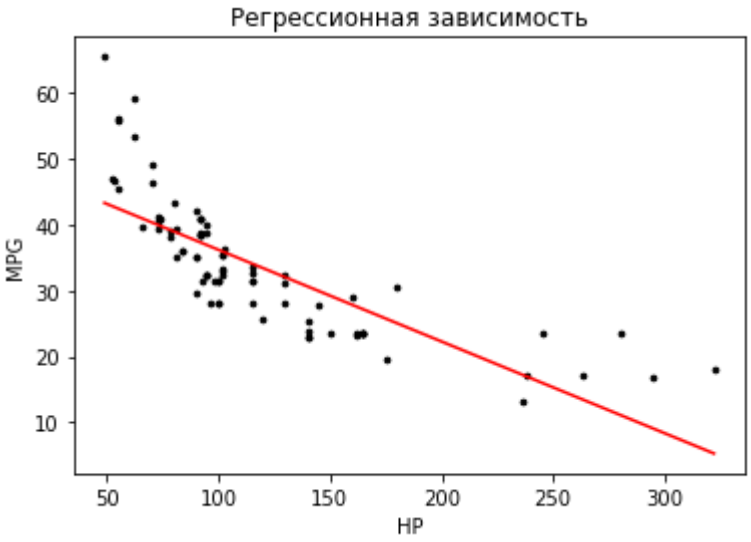
In [3]:

```
X = np.array(data['HP'])
Y = np.array(data['MPG'])

# вычислим оценки коэффициентов по формулам выше
b1 = np.sum((X - X.mean()) * (Y - Y.mean())) / np.sum((X - X.mean())**2)
b0 = Y.mean() - b1 * X.mean()
print("Регрессионная зависимость: r(x) = " + str(b0) + str(b1) + "x")

plt.scatter(X, Y, c='k', s=7)

xx = np.linspace(X.min(), X.max(), )
yy = b0 + b1 * xx
plt.plot(xx, yy, 'r-')
plt.title(u'Регрессионная зависимость')
plt.xlabel('HP')
plt.ylabel('MPG')
```

```
Регрессионная зависимость: r(x) = 50.0660780702-0.139023258903x
```

Out[3]:

```
<matplotlib.text.Text at 0x282d1654a58>
```



Видим, что прямая неплохо приближает большинство точек выборки, однако зависимость далека от линейной, поэтому у нескольких точек наблюдается большое отклонение от построенной регрессией прямой.

b) Построем стандартную линейную регрессию аналогично предыдущему пункту, используя $\log(MPG)$ в качестве отклика.

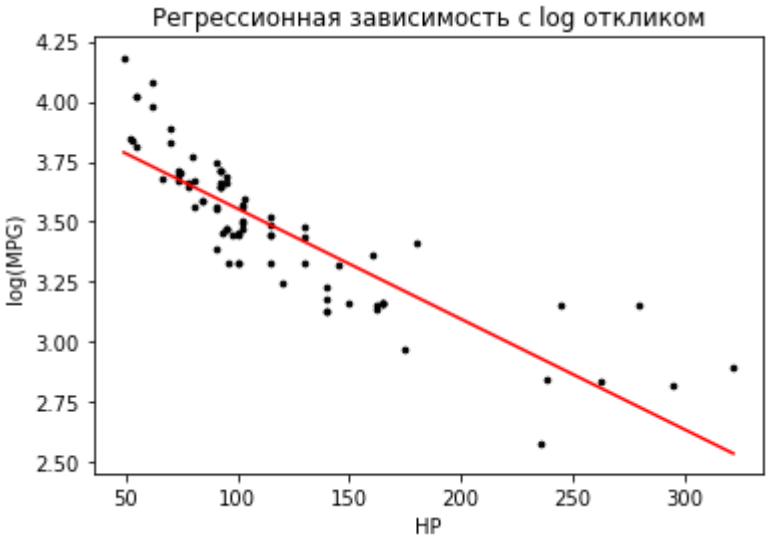
In [4]:

```
Y_log = np.log(Y)

# вычислим оценки коэффициентов по формулам выше
b1_log = np.sum((X - X.mean()) * (Y_log  - Y_log .mean())) / np.sum((X - X.mean())*
b0_log = Y_log.mean() - b1_log * X.mean()
print("Регрессионная зависимость: r(x) = " + str(b0_log) + str(b1_log) + "x")

plt.scatter(X, Y_log, c='k', s=7)

xx = np.linspace(X.min(), X.max(), )
yy_log = b0_log + b1_log * xx
plt.plot(xx, yy_log, 'r-')
plt.title(u'Регрессионная зависимость с log откликом')
plt.xlabel('HP')
plt.ylabel('log(MPG)')
```

```
Регрессионная зависимость: r(x) = 4.01322939993-0.00458889589541x
```

Out[4]:

```
<matplotlib.text.Text at 0x282d17434a8>
```



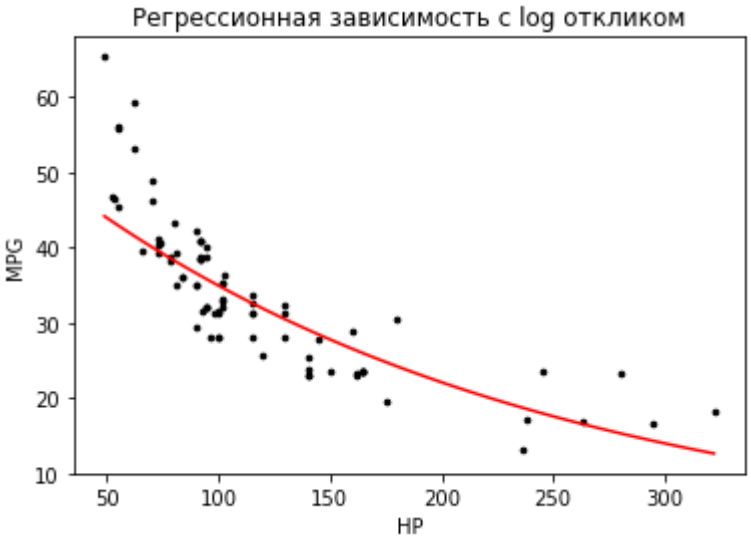
Построим также полученную зависимость MPG от HP, чтобы можно было сравнить с предыдущим пунктом (для этого рассмотрим экспоненту от прогнозов).

In [5]:

```
plt.scatter(X, Y, c='k', s=7)
yy_log = np.exp(b0_log + b1_log * xx)
plt.plot(xx, yy_log, 'r-')
plt.title(u'Регрессионная зависимость с log откликом')
plt.xlabel('HP')
plt.ylabel('MPG')
```

Out[5]:

```
<matplotlib.text.Text at 0x282d1764550>
```



Сумма квадратов остатков подгонки оценивается $RSS = \sum_{i=1}^{n} \hat{\varepsilon}_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i))^2$

In [6]:

```
RSS = np.sum((Y - (b0 + b1 * X))**2)
RSS_log = np.sum((Y - np.exp(b0_log + b1_log * X))**2)
print("RSS из пункта a: ", RSS)
print("RSS из пункта b: ", RSS_log)
```

```
RSS из пункта a:  3049.43511117
RSS из пункта b:  2378.36267487
```

Согласно данной метрике качество во втором пункте лучше. Это подтверждается и визуально.

c) Для множественной регрессии данные имеют вид $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$, где $X_i = (X_{i1}, \ldots, X_{ik}) \in \mathrm{R}^k$. Для учета нулевого коэффициента обычно полагают $X_{i1} = 1$ при $i = 1, \ldots, n$.

По теореме из лекции оценка функции регрессии имеет вид: $\hat{r}(x) = \sum_{j=1}^{k} \hat{\beta}_j x_j$, где $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$.

In [7]:

```
X = (np.ones(Y.size), np.array(data['VOL']), np.array(data['HP']), np.array(data['S
X = np.column_stack(X)
Y = np.array(data['MPG'])

b = np.dot(np.dot(np.linalg.inv(np.dot(X.T, X)), X.T), Y)
print("Beca b:", b)
```

```
Beca b: [  1.92437753e+02  -1.56450113e-02   3.92212315e-01  -1.294818
48e+00
  -1.85980373e+00]
```

Найдем тут также $R_{tr} = \sum_{i=1}^{n} \hat{\varepsilon}_i^2$ (оценку риска прогноза), где вектор остатков $\hat{\varepsilon} = X\hat{\beta} - Y$

In [8]:

```
R_tr = np.sum((np.dot(X, b) - Y)**2)
print("R_tr = ", R_tr)
```

```
R_tr =  1027.38147725
```

Видим, что в случае множественной регрессии отклонение (сумма квадратов остатков) стало в 2-3 раза меньше, чем для простой, что вполне соответсвует ожиданиям.

d) Статистика C_p Mallow для выбранного подмножества регрессоров S имеет вид $\hat{R}(S) = \hat{R}_{tr}(S) + 2|S|\hat{\sigma}^2$. Здесь $|S|$ - число регрессорова, а $\hat{\sigma}^2$ - оценка дисперсии шума σ^2, полученная по полной модели.

По теореме из лекции $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-k}\sum_{i=1}^{n} \hat{\varepsilon}_i^2$.

Существуют два способа выбора метода моделей: включений и исключений.

1) Включения

На первом шаге регрессоров нет вообще;

Далее добавляется регрессор, для которого C_p Mallow минимальное и т.д.

2) Исключения

На первом шаге количество регрессоров максимальное;

На каждом шаге удаляется регрессор, исключение которого приводит к минимальному значению C_p Mallow.

In [9]:

```
# Выберем сначала модель по методу включений

k = 5 # т.к. в полной модели вектора из пространства R^5
Regr = [np.ones(Y.size), np.array(data['VOL']), np.array(data['HP']), np.array(data
S = []
sig = R_tr/(Y.size - k)

C_p = np.infty
ind = 10

while (ind >= 0):  # ind - добавляемый на данном шаге индекс
    if ind != 10 and ind >= 0:
        S += [ind]
    ind = -1
    for i in range(k):
        if i not in S:
            S_cur = S[:] + [i]
            X = []
            for el in S_cur:
                X += [Regr[el]]
            X = np.column_stack(X)  # столбцы, соответствующие индексам в S_cur
            b = np.dot(np.dot(np.linalg.inv(np.dot(X.T,  X)), X.T), Y)
            C_p_cur = np.sum((np.dot(X, b) - Y)**2) + 2 * len(S_cur) * sig
            if C_p_cur < C_p:
                C_p = C_p_cur
                ind = i

print('Полученное подмножество регрессоров: ', sorted(S))
print('C_p = ', C_p)
```

```
Полученное подмножество регрессоров:  [0, 2, 3, 4]
C_p =  1140.39087112
```

In [10]:

```
# Теперь построим модель по методу исключений

Regr = [np.ones(Y.size), np.array(data['VOL']), np.array(data['HP']), np.array(data
S = [0, 1, 2, 3, 4]
sig = R_tr/(Y.size - k)  # т.к. в полной модели вектора из пространства R^5

C_p = np.infty
ind = 10

while (ind >= 0):
    if ind != 10 and ind >= 0:
        S.remove(ind)
    ind = -1
    for i in S:
        S_cur = S[:]
        S_cur.remove(i)
        X = []
        for el in S_cur:
            X += [Regr[el]]
        X = np.column_stack(X)
        b = np.dot(np.dot(np.linalg.inv(np.dot(X.T,  X)), X.T), Y)
        C_p_cur = np.sum((np.dot(X, b) - Y)**2) + 2 * len(S_cur) * sig
        if C_p_cur < C_p:
            C_p = C_p_cur
            ind = i

print('Полученное подмножество регрессоров: ', sorted(S))
print('C_p = ', C_p)
```

```
Полученное подмножество регрессоров:  [0, 2, 3, 4]
C_p =  1140.39087112
```

Два данных метода вернули один и тот же результат - в качестве регрессоров нужно использовать все столбцы, кроме 'VOL'.

Задание 2

Критерий AIC имеет вид $AIC(S) = l_S - |S| \to \max\limits_S$, где $l_S = l_S(\hat{\beta})$ - логарифм правдоподобия модели, где в качестве неизвестных параметров были подставлены их оценки, полученные с помощью максимизации $l_S(\beta)$.

Поскольку $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, а $Y = X\beta + \varepsilon$, то $Y_i \sim \mathcal{N}(X_i\beta, \sigma^2)$.

Пусть X - выборка для фиксированного S. Тогда функция правдоподобия:

$$\mathcal{L}_S(\beta) = \prod_{i=1}^{n} p(Y_i) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(Y_i - X_i\beta)^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \prod_{i=1}^{n} \exp\left(-\frac{(Y_i - X_i\beta)^2}{2\sigma^2}\right) \to \max_\beta$$

Значит, логарифмическая функция правдоподобия:

$$l_S(\beta) = -\frac{n}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - X_i\beta)^2 = -\frac{n}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i^2 =$$

$$= -\frac{n}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}R_{tr}(S) \rightarrow \max_{\beta}$$

Таким образом, поскольку шум берется равным оценке, полученной по полной модели,

$$AIC(S) = -\frac{n}{2}\ln(2\pi\hat{\sigma}^2) - \frac{1}{2\hat{\sigma}^2}\hat{R}_{tr}(S) - |S|$$

Поскольку $-\frac{n}{2}\ln(2\pi\hat{\sigma}^2)$ - известная константа, то максимизация данного критерия по S эквивалетна минимизации $\frac{1}{2\hat{\sigma}^2}\hat{R}_{tr}(S) + |S|$, или, что то же самое, минимизации по S статистики $\hat{R}_{tr}(S) + 2|S|\hat{\sigma}^2 = C_p$ Mallow, ЧТД.

Задание 3

a)

Функция правдоподобия

$$\mathcal{L}_n(\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(X_i) = \prod_{i=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-(X_i-\theta)^2}$$

Логарифм функции правдоподобия

$$l_n(\theta) = -\frac{n}{2}\ln(2\pi) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \theta)^2$$

$$\frac{\partial l_n}{\partial\theta} = \sum_{i=1}^{n}(X_i - \theta) = n\bar{X} - n\theta$$

$$\frac{\partial^2 l_n}{\partial\theta^2} = -n < 0$$

Откуда MLE $\hat{\theta} = \bar{X}$.

Таким образом,

$$P(J_n = 0) = P\left(l_n(0) - l_n(\hat{\theta}) + 1 > 0\right) = P\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}X_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2 + 1 > 0\right) =$$

$$= P\left(\sum_{i=1}^{n}(-\bar{X})(2X_i - \bar{X}) + 2 > 0\right) = P\left(\bar{X}(2\sum_{i=1}^{n}X_i - n\bar{X}) < 2\right) = P\left(n\bar{X}^2 < 2\right) =$$

$$= P\left(-\sqrt{2} < \sqrt{n}\bar{X} < \sqrt{2} \right) = P\left(\sqrt{n}\bar{X} < \sqrt{2} \right) - P\left(\sqrt{n}\bar{X} \leq -\sqrt{2} \right)$$

1) Если M_0 верна, то согласно ЦПТ $\sqrt{n}\bar{X} \underset{n \to \infty}{\overset{d}{\to}} \mathcal{N}(0, 1)$.

Значит, $\lim\limits_{n \to \infty} P(J_n = 0) = \Phi(\sqrt{2}) - \Phi(-\sqrt{2}) = 2\,\Phi(\sqrt{2}) - 1$, где Φ – функция распредления $\mathcal{N}(0, 1)$.

2) В случае $\theta \neq 0$, по ЦПТ получим $\sqrt{n}(\bar{X} - \theta) \underset{n \to \infty}{\overset{d}{\to}} \mathcal{N}(0, 1)$. Значит,

$$\lim_{n \to \infty} P(J_n = 0) = \lim_{n \to \infty} \left[P\left(\sqrt{n}(\bar{X} - \theta) < \sqrt{2} - \sqrt{n}\theta \right) - P\left(\sqrt{n}(\bar{X} - \theta) \leq -\sqrt{2} - \sqrt{n}\theta \right) \right] =$$

$$= \lim_{n \to \infty} \left[\Phi(\sqrt{2} - \sqrt{n}\theta) - \Phi(-\sqrt{2} - \sqrt{n}\theta) \right] = 0 - 0 = 0$$

.

b) Заметим, что $\hat{f}_n(x) = \phi_{\tilde{\theta}}(x)$, где $\tilde{\theta} = 0$, если $J_n = 0$, и $\tilde{\theta} = \hat{\theta}$ иначе.

1) Пусть $\theta = 0$. Тогда по определению расстояния Кульбака-Лейблера

$$D(\phi_0 \parallel \hat{f}_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \log \frac{e^{-x^2/2}}{e^{-(x-\tilde{\theta})^2/2}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left(-\frac{x^2}{2} + \frac{(x-\tilde{\theta})^2}{2} \right) dx =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left(\frac{\tilde{\theta}^2 - 2x\tilde{\theta}}{2} \right) dx = [\text{т.к } x e^{-x^2/2} - \text{ нечетная функция}] =$$

$$= \frac{\tilde{\theta}^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx = \frac{\tilde{\theta}^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(x) dx = \frac{\tilde{\theta}^2}{2}$$

Для того чтобы показать, что $\frac{\tilde{\theta}^2}{2} \underset{n \to \infty}{\overset{P}{\to}} 0$, достаточно доказать, что $\tilde{\theta} \underset{n \to \infty}{\overset{P}{\to}} 0$ [т.к. $P\left(\frac{\tilde{\theta}^2}{2} > \varepsilon \right) = P\left(|\tilde{\theta}| > \sqrt{2\varepsilon} \right)$, а ε выбирается в определении сходимости по вероятности произвольно].

Докажем по определению:

$$\forall \varepsilon > 0 : 0 \leq P(|\tilde{\theta}| > \varepsilon) \leq P(|\hat{\theta}| > \varepsilon) = P(|\sqrt{n}\bar{X}| > \sqrt{n}\varepsilon) = 1 - P(\sqrt{n}\bar{X} \leq \sqrt{n}\varepsilon) + P(\sqrt{n}\bar{X} < -\sqrt{n}\varepsilon)$$

Поскольку по ЦПТ $\sqrt{n}\bar{X} \underset{n \to \infty}{\overset{d}{\to}} \mathcal{N}(0, 1)$, то

$$\lim_{n \to \infty} P(|\hat{\theta}| > \varepsilon) = \lim_{n \to \infty} \left[1 - P(\sqrt{n}\bar{X} \leq \sqrt{n}\varepsilon) + P(\sqrt{n}\bar{X} < -\sqrt{n}\varepsilon) \right] = 1 - 1 + 0 = 0$$

Значит, и $\lim\limits_{n \to \infty} P(|\tilde{\theta}| > \varepsilon) = 0$, ЧТД.

2) Пусть $\theta \neq 0$.

Тогда аналогично первому случаю получим:

$$D(\phi_\theta \parallel \hat{f}_n) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\theta)^2/2} \log \frac{e^{-(x-\theta)^2/2}}{e^{-(x-\tilde{\theta})^2/2}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-\theta)^2/2} \left(-\frac{(x-\theta)^2}{2} + \frac{(x-\tilde{\theta})^2}{2} \right) dx =$$

$$= [y = x - \theta] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2} \left(-\frac{-y^2}{2} + \frac{(y+\theta-\tilde{\theta})^2}{2} \right) dy = [\text{аналогично 1)}] = \frac{(\theta-\tilde{\theta})^2}{2}$$

Опять достаточно доказать, что $\theta - \tilde{\theta} \xrightarrow[n \to \infty]{\text{P}} 0$.

По пункту а) знаем, что $\lim\limits_{n \to \infty} P(J_n = 0) = 1$, поэтому $\tilde{\theta} \xrightarrow[n \to \infty]{\text{п.н.}} \hat{\theta}$. Значит,

$$\forall \varepsilon > 0 \colon \lim_{n \to \infty} P(|\theta - \tilde{\theta}| > \varepsilon) = P(|\theta - \hat{\theta}| > \varepsilon) = P\left(|\sqrt{n}(\bar{X} - \hat{\theta})| > \sqrt{n}\varepsilon \right) =$$

$$= 1 - P\left(\sqrt{n}(\bar{X} - \hat{\theta}) \leq \sqrt{n}\varepsilon \right) + P\left(\sqrt{n}(\bar{X} - \hat{\theta}) < -\sqrt{n}\varepsilon \right)$$

Поскольку по ЦПТ $\sqrt{n}(\bar{X} - \hat{\theta}) \xrightarrow[n \to \infty]{d} \mathcal{N}(0, 1)$, то

$$\lim_{n \to \infty} P(|\theta - \tilde{\theta}| > \varepsilon) = 1 - 1 + 0 = 0$$

ЧТД.