

Παλινδρόμηση και Ανάλυση Διακύμανσης

Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση

αρχή: $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \epsilon$
 εφάρτημένη ή απόκριση $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$: Παράμετροι σταθμάτα

Μοντέλο $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$
 Πολλαπλής Γραμμικής Παλινδρόμησης (π.χ.π)
 ανεξάρτητες ή επεξηγηματικές

Μορφή δεδομένων στο μοντέλο π.χ.π.

Πειραματικές Μονάδες	Y	X ₁	X ₂	...	X _p
1	Y ₁	X ₁₁	X ₁₂	...	X _{1p}
2	Y ₂	X ₂₁	X ₂₂	...	X _{2p}
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
n	Y _n	X _{n1}	X _{n2}	...	X _{np}

ο 1^{ος} δείκτης παρουσιάζει την πειραματική μονάδα

Μια ισοδύναμη μορφή του π.χ.π



$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \dots + \beta_p X_{ip} + \epsilon_i, \quad i=1, 2, \dots, n$$

↑ Ισοδύναμη μορφή

$$Y = X\beta + \epsilon$$



Αν ορίσω

$$\underline{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}$$

$n \times 1$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1p} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{np} \end{bmatrix}$$

$n \times (p+1)$
πίνακας

$$\underline{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}$$

$(p+1) \times 1$

$$\underline{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

$n \times 1$

Άρα

ΠΙΝΑΚΑΣ
ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ.

$$\underline{Y} = X \underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$$

$n \times 1$ $n \times (p+1)$ $(p+1) \times 1$ $n \times 1$

Εκτιμητές ελαχίστων τετραγώνων (ΕΕΤ) $\underline{\beta}$.

ΕΕΤ : Είναι εκείνοι που ελαχιστοποιούν τα σφάλματα του μοντέλου ή που ελαχιστοποιούν το άθροισμα τετ των σφαλμάτων.

$$S = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \underline{\varepsilon}' \underline{\varepsilon} = (\underline{Y} - X \underline{\beta})' (\underline{Y} - X \underline{\beta})$$

$$= \underline{Y}' \underline{Y} - \underline{\beta}' X' \underline{Y} - \underline{Y}' X \underline{\beta} + \underline{\beta}' X' X \underline{\beta}$$

Το $\underline{Y}' X \underline{\beta}$: είναι αριθμός $\Rightarrow \underline{Y}' X \underline{\beta} = (\underline{Y}' X \underline{\beta})' = \underline{\beta}' X' \underline{Y}$

$n \times 1$ $n \times (p+1)$ $(p+1) \times 1$

$$\Rightarrow S = \underline{Y}' \underline{Y} - 2 \underline{\beta}' X' \underline{Y} - \underline{\beta}' X' X \underline{\beta}$$

Άρα οι ΕΕΤ θα προκύψουν από την επίλυση ως προς $\underline{\beta}$ του συστήματος

$$\frac{\partial S}{\partial \underline{\beta}} = \underline{0} \quad \text{ή} \quad \nabla_{\underline{\beta}} S = \underline{0} \quad \text{με} \quad \frac{\partial}{\partial \underline{\beta}} = \left(\frac{\partial}{\partial \beta_0}, \frac{\partial}{\partial \beta_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial \beta_p} \right)$$

(2)

Ισχύει $\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta' \alpha) = \alpha$ ①

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta' A \beta) = 2A\beta$$
 ②

Σύμφωνα με ① και ② προκύπτει:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} S = \frac{\partial}{\partial \beta} (Y'Y) - 2 \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta' X' Y) + \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta' X' X \beta)$$

① $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \beta} S = 0 \Rightarrow -2X'Y + 2X'X\beta = 0$

②

①) $X'X\beta = X'Y$ ← Σύστημα $p+1$ εξισώσεων με $p+1$ αγνώστους
↳ ΚΑΝΟΝΙΚΕΣ ΕΞΙΣΟΤΗΣΕΙΣ.

Αν \exists ο αντίστροφος μπορούμε να το λύσουμε

Το σύστημα έχει μοναδική λύση αν \exists ο $(X'X)^{-1}$
και η μοναδική λύση είναι $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$

Συμπερασματικά: οι ΕΕΤ είναι $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$

Εκτιμώμενο μοντέλο: $\hat{Y} = X\hat{\beta}$

Υπόλοιπα: $e = Y - \hat{Y}$

Παρατήρηση: Οι ΕΕΤ παρήχθησαν με την υπόθεση ότι \exists ο αντίστροφος $(X'X)^{-1}$


Ένα μοντέλο για το οποίο \exists ο $(X'X)^{-1}$ λέγεται μοντέλο πλήρους βαθμίδας

Αν \nexists ο $(X'X)^{-1}$ το μοντέλο είναι μη πλήρους βαθμού
 οι ΕΕΤ δεν είναι μοναδιαίοι και δίνονται
 από τη σχέση $\underline{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$

όπου $(X'X)^{-}$ ένας γενικευμένος αναστροφός του
 $(X'X)$ δηλ τ.ω $(X'X)(X'X)^{-}(X'X) = X'X$.

Υποθέσεις για τα σφάλματα.

① $E(\epsilon_i) = 0$ \longrightarrow ① $E(\underline{\epsilon}) = \underline{0}$

② $Var(\epsilon_i) = \sigma^2$ $\left\{ \begin{array}{l} \xrightarrow{\text{Ισοδύναμο}} \\ \xleftarrow{\text{Μορφή Υποθέσεων}} \\ \xrightarrow{\text{που σπληνόνται}} \\ \text{στο } \underline{\epsilon}. \end{array} \right.$ ② $Var(\underline{\epsilon}) = \begin{pmatrix} \sigma^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma^2 \end{pmatrix}$
 $\parallel = \sigma^2 I_n$ 

③ $Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$ $i \neq j$

④ $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i=1, \dots, n$ \longrightarrow ③ $\underline{\epsilon} \sim N_n(\underline{0}, \sigma^2 I_n)$

Θυμίζουμε:

Αν $\underline{W} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}$ είναι τυχαίο διάνυσμα

τότε η μέση τιμή \underline{W} είναι

$$E(\underline{W}) = \begin{pmatrix} E(w_1) \\ E(w_2) \\ \vdots \\ E(w_n) \end{pmatrix}$$

Ο πίνακας Διακυμάνσεων -συνδιακυμάνσεων του τ.δ $\underline{W} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}$
 συμβολίζεται με $Var(\underline{W})$ ή Σ



$$\text{Var}(\underline{W}) = \Sigma = \begin{pmatrix} \text{Var}(W_1) & & & \\ & \text{Var}(W_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots & \\ \text{Cov}(W_j, W_i) & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & \text{Var}(W_n) \end{pmatrix}_{n \times n}$$

όπου $\text{Cov}(W_i, W_j) = E(W_i W_j) - (E W_i)(E W_j)$

Επειδή η Cov είναι συμμετρική

ο $\text{Var}(\underline{W})$ πάντα συμμετρικός

ο $\text{Var}(\underline{W}) \geq 0$ (θετικά ημωρισμένος)



Συνέπεια

των υποθέσεων

στο \underline{Y}

→ ① $E(\underline{Y}) = E(\underline{X}\beta + \underline{\epsilon}) = \underline{X}\beta + E(\underline{\epsilon}) = \underline{X}\beta$

→ ② $\text{Var}(\underline{Y}) = \text{Var}(\underline{X}\beta + \underline{\epsilon}) = \text{Var}(\underline{\epsilon}) = \sigma^2 \underline{I}_n$

→ ③ Επειδή το $\underline{Y} = \underline{X}\beta + \underline{\epsilon}$ γραμμικός μετασχηματισμός του κανονικού $\underline{\epsilon}$

$$\underline{Y} \sim N_n(\underline{X}\beta, \sigma^2 \underline{I}_n)$$

ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΕΕΤ $\hat{\beta}$

αντιστροφος

- ① Ο ΕΕΤ $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$ είναι αμερόληπτη της παραμέτρου β
δηλ $E(\hat{\beta}) = \beta$

Αν

$$E(\hat{\beta}) = E[(X'X)^{-1} X'Y] \\ = (X'X)^{-1} X' E(Y)$$

$$\underline{E(Y) = X\beta} \\ (X'X)^{-1} X' X \beta \\ = I_{p+1} \beta \\ = \beta$$

- ② $\text{Var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X'X)^{-1}$

Αν

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = \text{Var} \left[\overbrace{(X'X)^{-1} X' Y}^A \right]$$

Από ΘΜΣ: Ισχύει $\text{Var}(AW) = A \text{Var}(W) A'$

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1} X' \text{Var}(Y) [(X'X)^{-1} X']' \\ \frac{(AB)' = B'A'}{(A^{-1})' = (A')^{-1}} \quad (X'X)^{-1} X' [\sigma^2 I_n] X (X'X)^{-1}$$

$$= \sigma^2 \underbrace{(X'X)^{-1} X' X (X'X)^{-1}}_I \\ = \sigma^2 (X'X)^{-1}$$

- ③ Αν $X_0 = (1, X_{01}, \dots, X_{0p})'$ μια δεδομένη τιμή των ανεξάρτητων μεταβλητών και $\hat{Y}_0 = X_0' \hat{\beta}$ η προβλεπόμενη τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής Y τότε

$$\text{Var}(\hat{Y}_0) = \sigma^2 X_0' (X'X)^{-1} X_0$$

Απ

$$\text{Var}(\hat{y}_0) = \text{Var}(\underline{X}_0' \hat{\beta})$$

Ισχύει, $\text{Var}(\underline{a}'\underline{w}) = \underline{a}'\text{Var}(\underline{w})\underline{a}$

$$\text{Var}(\hat{y}_0) = \underline{X}_0' \text{Var}(\hat{\beta}) \underline{X}_0$$

$$= \underline{X}_0' [\sigma^2 (\underline{X}'\underline{X})^{-1}] \underline{X}_0$$

$$= \sigma^2 \underline{X}_0' (\underline{X}'\underline{X})^{-1} \underline{X}_0 \quad \square$$

(4) Ανοίγουμε Ολικής Μεταβλητικότητας στην πηγή - Πινάκας ANOVA

$$SS_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - 2\bar{y} \sum_{i=1}^n y_i + n\bar{y}^2$$

$$= \underline{y}'\underline{y} - 2\bar{y}n\bar{y} + n\bar{y}^2$$

$$= \underline{y}'\underline{y} - n\bar{y}^2$$

$$\Rightarrow SS_{\text{tot}} = \underline{y}'\underline{y} - n\bar{y}^2 \quad (1)$$

$$SS_{\text{res}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = (\underline{y} - \hat{\underline{y}})'(\underline{y} - \hat{\underline{y}}) = (\underline{y} - \underline{X}\hat{\beta})'(\underline{y} - \underline{X}\hat{\beta})$$

$$= \underline{y}'\underline{y} - \underline{y}'\underline{X}\hat{\beta} - \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{y} + \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{X}\hat{\beta}$$

$$= \underline{y}'\underline{y} - (\underline{y}'\underline{X}\hat{\beta})' - \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{y} + \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{X}\hat{\beta}$$

$$= \underline{y}'\underline{y} - \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{y} - \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{y} + \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{X}\hat{\beta}$$

$$= \underline{y}'\underline{y} - 2\hat{\beta}'\underline{X}'\underline{y} + \hat{\beta}'\underline{X}'\underline{X}\hat{\beta}$$

Αλλά

$$\begin{aligned}\hat{\beta}' X' X \hat{\beta} &= \hat{\beta}' X' X (X' X)^{-1} X' Y \\ &= \hat{\beta}' X' Y\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Αρα } SS_{\text{res}} &= \underline{Y}' \underline{Y} - 2 \hat{\beta}' X' Y + \hat{\beta}' X' Y \\ &= \underline{Y}' \underline{Y} - \hat{\beta}' X' Y\end{aligned}$$

$$\boxed{SS_{\text{res}} = \underline{Y}' \underline{Y} - \hat{\beta}' X' Y} \quad (2)$$

$$SS_{\text{reg}} = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^n \hat{Y}_i^2 + n\bar{Y}^2 - 2\bar{Y} \sum \hat{Y}_i$$

$$= \underline{\hat{Y}}' \underline{\hat{Y}} + n\bar{Y}^2 - 2\bar{Y} \sum \hat{Y}_i$$

$$= (X \hat{\beta})' (X \hat{\beta}) + n\bar{Y}^2 - 2\bar{Y} \sum \hat{Y}_i$$

$$\Rightarrow SS_{\text{reg}} = \hat{\beta}' X' X \hat{\beta} + n\bar{Y}^2 - 2\bar{Y} \sum \hat{Y}_i$$

$$= \hat{\beta}' X' Y - n\bar{Y}^2 - 2\bar{Y} \sum \hat{Y}_i$$

$$\boxed{SS_{\text{reg}} = \hat{\beta}' X' Y - n\bar{Y}^2 - 2\bar{Y} \sum \hat{Y}_i} \quad (3)$$

Από κανονικές εξισώσεις: $X' X \hat{\beta} = X' Y$

$$\Rightarrow X' Y - X' X \hat{\beta} = \underline{0}$$

$$\Rightarrow X' (Y - X \hat{\beta}) = \underline{0} \Rightarrow (Y - X \hat{\beta})' X = \underline{0}$$

$$\Rightarrow (Y - \hat{Y})' X = 0$$

$$\Rightarrow (y_1 - \hat{y}_1, y_2 - \hat{y}_2, \dots, y_n - \hat{y}_n) \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow (y_1 - \hat{y}_1) + (y_2 - \hat{y}_2) + \dots + (y_n - \hat{y}_n) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) = 0$$

$$\Rightarrow n\bar{y} - \sum \hat{y}_i = 0 \Rightarrow \boxed{\sum \hat{y}_i = n\bar{y}} \quad (4)$$

Από (3) (4)

$$SS_{reg} = \hat{\beta}' X' y + n\bar{y}^2 - 2\bar{y}(n\bar{y})$$

$$= \hat{\beta}' X' y + n\bar{y}^2 - 2n\bar{y}^2$$

$$= \hat{\beta}' X' y - n\bar{y}^2$$

$$\boxed{SS_{reg} = \hat{\beta}' X' y - n\bar{y}^2} \quad (5)$$

Από (1) (2) (5) βγήκαν όλα.

$$SS_{tot} = SS_{reg} + SS_{res}$$

↳ υπόλοιπα



Αν $SS_{reg} \gg SS_{res}$ υποσχόμενο μοντέλο.

Πίνακας ANOVA στο μοντέλο πηπ.

Πηγή μεταβλητότητας	SS	β.ε	MS	F-πηλίκο
Μοντέλο πηπ	SS _{reg}	$\frac{(p+1)-1}{=p}$	$MS_{reg} = \frac{SS_{reg}}{p}$	$F = \frac{MS_{reg}}{MS_{res}}$
Υπόλοιπα	SS _{res}	$\frac{(n-1)-p}{=n-p-1}$	$MS_{res} = \frac{SS_{res}}{n-p-1}$	
Ολική	SS _{tot}	n-1		

⑤ $E(MS_{res}) = \sigma^2$

⑥ $R^2 = \frac{SS_{reg}}{SS_{tot}} = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$ Καθαρός αριθμός
 $0 \leq R^2 \leq 1$

$R^2\text{-adjusted} = \frac{MS_{res}}{MS_{tot}}$

ΑΣΚΗΣΗ 1

Για το μοντέλο της αgh αν ισχύουν οι υποθέσεις για τα σφάλματα. Το $\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \bar{X}\hat{\beta}_1 \sim N(\beta_0, \sigma^2 \left\{ \frac{1}{n} + \frac{\bar{X}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right\})$

Το $\hat{\beta}_0$ είναι γραμμικός συνδυασμός του \bar{Y} που ακολουθεί κανονική και του $\hat{\beta}_1$ που ακολουθεί κανονική

Ισχύει: Γραμμικός συνδυασμός κανονικών ακολουθεί κανονική

Άρα $\hat{\beta}_0 \sim \text{Normal}$

$$E(\hat{\beta}_0) = E(\bar{Y} - \bar{X}\hat{\beta}_1) = E(\bar{Y}) - \bar{X}E(\hat{\beta}_1) = E(\bar{Y}) - \bar{X}\beta_1 \quad (1)$$

$$\circ E(\bar{Y}) = E\left(\frac{1}{n} \sum Y_i\right) = \frac{1}{n} \sum E(Y_i) \quad \underline{\underline{E(Y_i) = \beta_0 + \beta_1 X_i}}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{n} \sum (\beta_0 + \beta_1 X_i) = \frac{1}{n} (n\beta_0 + \beta_1 \sum X_i) = \beta_0 + \beta_1 \frac{\sum X_i}{n} \\ &= \beta_0 + \beta_1 \frac{1}{n} \sum X_i \\ &= \beta_0 + \beta_1 \bar{X} \quad (2) \end{aligned}$$

$$\text{Από (1) κ (2)} \quad E(\hat{\beta}_0) = \beta_0 + \beta_1 \bar{X} - \bar{X}\beta_1 \Rightarrow \boxed{E(\hat{\beta}_0) = \beta_0}$$

$$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \text{Var}(\bar{Y} - \bar{X}\hat{\beta}_1)$$

$$\text{Var}(\sum \alpha_i W_i) = \sum \alpha_i^2 \text{Var}(W_i) + \sum_i \sum_j \alpha_i \alpha_j \text{Cov}(W_i, W_j)$$

$$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \text{Var}(\bar{Y}) + \bar{X}^2 \text{Var}(\hat{\beta}_1) - \bar{X} \text{Cov}(\bar{Y}, \hat{\beta}_1)$$

Αποδείξαμε ότι $\text{Cov}(\bar{Y}, \hat{\beta}_1) = 0$ από

$$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \text{Var}(\bar{Y}) + \bar{X}^2 \text{Var}(\hat{\beta}_1) = \text{Var}(\bar{Y}) + \bar{X}^2 \frac{\sigma^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$$

Y_i αααααα.

$$\bullet \text{Var}(\bar{Y}) = \frac{1}{n^2} \sum \text{Var}(Y_i) = \frac{1}{n^2} \cdot n \sigma^2 = \frac{1}{n^2} n \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{n}$$

Οπότε $\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\sigma^2 \bar{X}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$

$$= \sigma^2 \left\{ \frac{1}{n} + \frac{\bar{X}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right\}$$