5ο μάθημα

1/11/21

Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση (π.γ.π.) ⇝ επέκταση της α.γ.π. ή **Γενικό Γραμμικό Μοντέλο** (γ.γ.μ.)

α.γ.π. : $Y = b_0 + b_1 X + \varepsilon$

π.γ.π. : $Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_p X_p + \varepsilon$

Y: εξαρτημένη μεταβλητή

$b_0, b_1, b_2, \dots, b_p$: παράμετροι (ή επεξηγηματικός) του μοντέλου (ή συντελεστής παλινδρ.)

$X_1, X_2, \dots, X_p$: ανεξάρτ. μεταβλητή

ε: σφάλματα

- **Μορφή Δεδομένων στο μοντέλο π.γ.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}

$$\boxed{Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_p X_p} \xleftrightarrow[\text{μορφή}]{\text{ισοδύναμη}} Y_i = b_0 + b_1 X_{i1} + \dots + b_p X_{ip} + \varepsilon_i, \text{ με } i = 1, \dots, n$$

$$\Updownarrow$$

$$\boxed{\underset{\sim}{Y} = X \cdot \underset{\sim}{b} + \underset{\sim}{\varepsilon}}, \text{ όπου } \underset{\sim}{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}_{n \times 1}$$

σε πινακοποιημένη μορφή

(design matrix) πίνακας σχεδιασμού

$$X = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1p} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2p} \\ \vdots & & & & \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{np} \end{pmatrix}_{n \times (p+1)}$$

$$\underset{\sim}{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}_{(p+1)\times 1} , \quad \underset{\sim}{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}_{n\times 1}$$

[Στο γ.γ.μ. $\nexists$ το β_0, επομένως στον πίνακα σχεδιασμού X $\nexists$ η στήλη $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$!!!]

Μοντέλο: $\underset{(n\times 1)}{\underset{\sim}{Y}} = \underset{n\times(p+1)}{X} \cdot \underset{(p+1)\times 1}{\underset{\sim}{\beta}} + \underset{(n\times 1)}{\underset{\sim}{\varepsilon}}$

Εκτιμητές Ελαχίστων Τετραγώνων του $\underset{\sim}{\beta}$ (ΕΕΤ)

Προκύπτουν από ελαχ. ως προς $\underset{\sim}{\beta}$

$$S(\underset{\sim}{\beta}) = \Sigma \varepsilon^2 = \underset{\sim}{\varepsilon}^T \cdot \underset{\sim}{\varepsilon} = (\underset{\sim}{Y} - X\cdot\underset{\sim}{\beta})^T \cdot (\underset{\sim}{Y} - X\underset{\sim}{\beta}) =$$

$$= (\underset{\sim}{Y}^T - \underset{\sim}{\beta}^T \cdot X^T) \cdot (\underset{\sim}{Y} - X\cdot\underset{\sim}{\beta}) =$$

$$= \underset{\sim}{Y}^T \underset{\sim}{Y} - \underset{\sim}{\beta}^T \cdot X^T \cdot \underset{\sim}{Y} + \underset{\sim}{\beta}^T \cdot X^T \cdot X \cdot \underset{\sim}{\beta} \qquad \underset{\sim}{\beta}^T X^T \underset{\sim}{Y} = \underset{\sim}{Y}^T X \underset{\sim}{\beta}$$

$$= \underset{\sim}{Y}^T \cdot \underset{\sim}{Y} - 2\cdot\underset{\sim}{\beta}^T \cdot X^T \cdot \underset{\sim}{Y} + \underset{\sim}{\beta}^T \cdot X^T X \cdot \underset{\sim}{\beta}$$

Σχέσεις Παραγώγισης: Αν $\underset{\sim}{\alpha}$ διάνυσμα και A πίνακας, τότε:

$$\frac{\partial}{\partial \underset{\sim}{\beta}}(\underset{\sim}{\beta}^T \underset{\sim}{\alpha}) = \underset{\sim}{\alpha} \qquad \frac{\partial}{\partial \underset{\sim}{\beta}}(\underset{\sim}{\beta}^T A \cdot \underset{\sim}{\beta}) = 2A\underset{\sim}{\beta} \Rightarrow \frac{\partial S(\underset{\sim}{\beta})}{\partial \underset{\sim}{\beta}} = \underset{\sim}{0}$$

$$\Rightarrow 2(X^T X \underset{\sim}{\beta} - X^T \underset{\sim}{Y}) = 0 \Rightarrow \boxed{X^T X \underset{\sim}{\beta} = X^T \underset{\sim}{Y}}$$ (Κανονικές Εξισώσεις) (κ.ε.)

Οι ΕΕΤ του $\underset{\sim}{\beta}$ προκύπτουν από τη λύση ως προς $\underset{\sim}{\beta}$ των κ.ε.
Αν $X^T X$ είναι αντιστρέψιμος ($\exists (X^T X)^{-1}$), τότε οι ΕΕΤ είναι: $\boxed{\hat{\underset{\sim}{\beta}} = (X^T X)^{-1} X^T \underset{\sim}{Y}}$ → αν ΔΕΝ είναι αντιστρ. $\nexists$ ΕΕΤ που να είναι μοναδικός

(απο εδω κ περα) αυτα υποθετω !

Παρατήρηση :

Αν ο $X'.X$ είναι αντιστρέψιμος, το μοντέλο λέγεται πλήρους βαθμίδας.
Αν ο $X'.X$ δεν είναι αντιστρέψιμος, το μοντέλο λέγεται μη πλήρους βαθμίδας, ο ΕΕΤ δεν είναι μοναδικός και δίνεται από τη σχέση $\hat{b} = (X'.X)^{-}.X'.Y$ όπου ο $(X'.X)^{-}$ ο γενικευμένος αντίστροφος του $X'.X$. (Ο γενικευμένος αντίστροφος του A είναι τ/ω $A.A^{-}.A = A$)

Παρατήρηση: Το μοντέλο της α.γ.π. (πολλαπλή) απορρέει από το μοντέλο της α.γ.π. για $X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$

Μοντέλο: $\underset{\sim}{Y} = X.\underset{\sim}{b} + \varepsilon$

Ε.Ε.Τ: $\underset{\sim}{\hat{b}} = (X'.X)^{-1}.X'.Y$

Εκτιμημένο Μοντέλο : $\underset{\sim}{\hat{Y}} = X.\underset{\sim}{\hat{b}}$

(μέσω αυτού ορίζω το)
Διάνυσμα Υπολοίπων: $\underset{\sim}{e} = \underset{\sim}{Y} - \underset{\sim}{\hat{Y}}$

Ιδιότητες: (και υποθέσεις κυρίως για τα σφάλματα ε)

- $E(\varepsilon_i) = 0$, $i = 1, \dots, n$
- $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$, $i = 1, \dots, n$ (κοινή διακύμανση)
- $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$, $i \neq j$ (ασυσχέτιστα μεταξύ τους ανά δύο)
- $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, $i = 1, \dots, n$

Τυχαίο Διάνυσμα: $\underset{\sim}{W} = \begin{pmatrix} W_1 \\ \vdots \\ W_n \end{pmatrix}$ $E(\underset{\sim}{W}) \overset{\text{ορ}}{=} \begin{pmatrix} E(W_1) \\ \vdots \\ E(W_n) \end{pmatrix}$

διακυμάνσεις των συνιστωσών του τ.δ. για διαγώνιο
συνδιακυμάνσεις —||— ανα δύο στα υπόλοιπα

$$Var(\underset{\sim}{w}) = \Sigma = \begin{pmatrix} Var(w_1) & & & Cov(w_i, w_j) \\ \vdots & Var(w_2) & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ Cov(w_j, w_i) & & & Var(w_n) \end{pmatrix}_{n \times n}$$

1) Ο Σ συμμετρικός
2) Ο Σ πάντα θετικά ημιορισμένος. (δηλ. $\underset{\sim}{a}' \cdot \Sigma \cdot \underset{\sim}{a} \geq 0$)

Αν $E(\varepsilon_i) = 0$, $\forall\, i = 1, \dots, n \longleftarrow E(\underset{\sim}{\varepsilon}) = \underset{\sim}{0}$

Επομένως, οι <u>υποθέσεις για τα σφάλματα</u> στο μοντέλο της α.γ.π.:

i) $E(\underset{\sim}{\varepsilon}) = 0$

Αν $\left.\begin{array}{l} Var(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow Var(\underset{\sim}{\varepsilon}) \overset{\text{ορ}}{=} \begin{pmatrix} Var(\varepsilon_1) = \sigma^2 & & Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \\ & Var(\varepsilon_2) = \sigma^2 & \\ & & \ddots \\ & & Var(\varepsilon_n) = \sigma^2 \end{pmatrix}$

$$= \begin{pmatrix} \sigma^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma^2 \end{pmatrix} = \sigma^2 \cdot I_n$$

Άρα

ii) $Var(\underset{\sim}{\varepsilon}) = \sigma^2 \cdot I_n$

iii) $\underset{\sim}{\varepsilon} \sim N_n(\underset{\sim}{0}, \sigma^2 \cdot I_n)$

$$\xrightarrow{} (\underset{\sim}{y} = X \cdot \underset{\sim}{b} + \varepsilon)$$

<u>Συνέπειες των υποθέσεων στο $\underset{\sim}{y}$:</u>

i) $E(\underset{\sim}{y}) = X \cdot \underset{\sim}{b}$

ii) $Var(\underset{\sim}{y}) = \sigma^2 \cdot I_n$

iii) $\underset{\sim}{y} \sim N_n(X \cdot \underset{\sim}{b}, \sigma^2 \cdot I_n)$

<u>Ιδιότητες των Ε.Ε.Τ $\underset{\sim}{\hat{b}}$:</u>

Έστω ότι οι υποθέσεις για τα σφάλματα ικανοποιούνται

i) $E(\underset{\sim}{\hat{b}}) = \underset{\sim}{b}$

<u>Απόδειξη:</u> $E(\underset{\sim}{\hat{b}}) = E[(X' \cdot X)^{-1} \cdot X' \cdot \underset{\sim}{y}] = (X' \cdot X)^{-1} \cdot X' \cdot E(\underset{\sim}{y}) =$

$$= \underbrace{(X' \cdot X)^{-1} \cdot X' \cdot X}_{I_n} \cdot \underset{\sim}{b} = I_n \cdot \underset{\sim}{b} = \underset{\sim}{b}$$

ii) $Var(\underset{\sim}{\hat{b}}) = \sigma^2 \cdot (X' \cdot X)^{-1}$.

<u>Απόδειξη:</u> $Var(\underset{\sim}{\hat{b}}) = Var(\underbrace{(X' \cdot X)^{-1} \cdot X'}_{\substack{\text{Πίνακας} \\ (p+1)\times n}} \cdot \underset{\sim}{y})$

Ισχύει ότι: $Var(A \cdot \underset{\sim}{w}) = A \cdot Var(\underset{\sim}{w}) \cdot A'$

$$\Rightarrow Var(\underset{\sim}{\hat{b}}) = (X' \cdot X)^{-1} \cdot X \cdot Var(\underset{\sim}{y}) \cdot [(X' \cdot X)^{-1} \cdot X']' =$$

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

$$= \sigma^2 \cdot \cancel{(X' \cdot X)^{-1}} \cdot \cancel{X' \cdot X} (X' \cdot X)^{-1} =$$

$$= \sigma^2 \cdot (X' \cdot X)^{-1}.$$

iii) Διακύμανση της πρόβλεψης.

Έστω X_{01} συγκεκριμένη τιμή της X_1

$\vdots$

X_{0p} ———"——— X_p

Τότε η προβλεπόμενη τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής Y, έστω $\hat{Y}_0$ είναι: $\hat{Y}_0 = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 X_{01} + \dots + \hat{b}_p X_{0p} \Rightarrow$

$\Rightarrow \hat{Y}_0 = \hat{\underset{\sim}{b}}' \cdot \underset{\sim}{X_0}$, όπου $\underset{\sim}{X_0} = (1, X_{01}, \dots, X_{0p})$

Ν.δ.ο: $\boxed{Var(\hat{Y}_0) = \sigma^2 \underset{\sim}{X_0}' (X'X)^{-1} \cdot \underset{\sim}{X_0}}$

Απόδειξη: $Var(\hat{Y}_0) = Var(\hat{\underset{\sim}{b}}' \cdot \underset{\sim}{X_0}) = Var(\underset{\sim}{X_0}' \cdot \hat{\underset{\sim}{b}})$ $\Rightarrow$

Είναι σαν να ζητώ $Var(\underset{\sim}{a}' \underset{\sim}{W}) = \underset{\sim}{a}' Var(\underset{\sim}{W}) \cdot \underset{\sim}{a}$

$Var(\hat{Y}_0) = Var(\underset{\sim}{X_0}' \cdot \hat{b}) = \underset{\sim}{X_0}' Var(\hat{\underset{\sim}{b}}) \underset{\sim}{X_0} =$

$= \underset{\sim}{X_0}' \cdot [\sigma^2 (X'X)^{-1}] \cdot \underset{\sim}{X_0} = \sigma^2 \underset{\sim}{X_0}' (X'X)^{-1} \underset{\sim}{X_0}$

Επομένως: $Var(\hat{Y}_0) = \sigma^2 \underset{\sim}{X_0}' (X'X)^{-1} \underset{\sim}{X_0}$

iv) Πίνακας ΑναΔια μοντέλου π.γ.π.

Για το μοντέλο της α.γ.π: $SStot = SSreg + SSres$
Ισχύει το ίδιο για το μοντέλο της π.γ.π?

Για την π.γ.π: $SStot = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 =$

$= \sum_{i=1}^{n} Y_i^2 - 2\bar{Y} \sum Y_i + n \bar{Y}^2 = Y'Y - 2n\bar{Y}^2 + n\bar{Y}^2$

$$\boxed{SS_{tot} = \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - n.\bar{y}^2} \quad (1)$$

Οδο : $SS_{res} = \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.\underset{\sim}{y}$ (2)

$$SS_{res} = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \underset{\sim}{e}'.\underset{\sim}{e} = (\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{\hat{y}})'.(\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{\hat{y}})$$

$$\Rightarrow SS_{res} = (\underset{\sim}{y} - X.\underset{\sim}{\hat{\beta}})'.(\underset{\sim}{y} - X.\underset{\sim}{\hat{\beta}}) = (\underset{\sim}{y}' - \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X').(\underset{\sim}{y} - X\underset{\sim}{\hat{\beta}}) =$$

$$= \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{y}'.X.\underset{\sim}{\hat{\beta}} + \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.X.\underset{\sim}{\hat{\beta}} =$$

$$= \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - 2\underset{\sim}{\hat{\beta}}.X'.\underset{\sim}{y} + \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.X.\underset{\sim}{\hat{\beta}} =$$

<u>Αλλά</u> $\underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.X.\underset{\sim}{\hat{\beta}} = \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.X.[(X'X)^{-1}.X'.\underset{\sim}{y}] = \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.\underset{\sim}{y}$

$$SS_{res} = \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - 2\underset{\sim}{\hat{\beta}}.X'.\underset{\sim}{y} + \underset{\sim}{\hat{\beta}}.X'.\underset{\sim}{y} = \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.\underset{\sim}{y}$$

Άρα : $\boxed{SS_{res} = \underset{\sim}{y}'.\underset{\sim}{y} - \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.\underset{\sim}{y}}$

Οδο $SS_{reg} = \underset{\sim}{\hat{\beta}}.X'.\underset{\sim}{y} - n.\bar{y}^2$ (3).

Έχω ότι $SS_{reg} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \Sigma(\hat{y}_i^2 - 2\bar{y}.\hat{y}_i + \bar{y}^2)$

$$= \underset{\sim}{\hat{y}}'.\underset{\sim}{\hat{y}} - 2.\bar{y}.\Sigma\hat{y}_i + n.\bar{y}^2 \quad \overset{\underset{\sim}{\hat{y}} = X.\underset{\sim}{\hat{\beta}}}{=\!=\!=}$$

$$= \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.X.\underset{\sim}{\hat{\beta}} + n.\bar{y}^2 - 2\bar{y}.\Sigma\hat{y}_i \quad \overset{\underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.X\underset{\sim}{\hat{\beta}} = \underset{\sim}{\hat{\beta}}'.X'.\underset{\sim}{y}}{=\!=\!=}$$

$$= \underset{\sim}{\hat{\beta}}.X'.\underset{\sim}{y} + n.\bar{y}^2 - \underbrace{2\bar{y}.\Sigma\hat{y}_i}_{\text{ο μόνος διαφορετικός όρος σε σχέση με πριν}} \quad (4)$$

Εκμεταλλεύομαι τις κανονικές εξισώσεις.

$$\text{Κ.Ε.}: \quad (X'.X).\hat{\underset{\sim}{b}} = X'.Y$$

$$\Rightarrow X'.\underset{\sim}{Y} - X'.X.\hat{\underset{\sim}{b}} = \underset{\sim}{0} = X'(\underset{\sim}{Y} - X.\hat{\underset{\sim}{b}}) = \underset{\sim}{0} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (\underset{\sim}{Y} - X.\hat{\underset{\sim}{b}})'.X = \underset{\sim}{0} \Rightarrow (\underset{\sim}{Y} - \hat{\underset{\sim}{Y}})'.X = \underset{\sim}{0} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (Y_1-\hat{Y}_1, Y_2-\hat{Y}_2, \ldots, Y_n-\hat{Y}_n)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \ldots & X_{1p} \\ X_{21} & X_{22} & \ldots & X_{2p} \\ \vdots & & & \\ X_{n1} & \ldots & \ldots & X_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i) = 0 \Rightarrow \boxed{\Sigma \hat{Y}_i = \Sigma Y_i = n\bar{Y}} \quad (5)$$

$$\text{Από } (4),(5): \quad SSreg = \hat{\underset{\sim}{b}}'.X'.\underset{\sim}{Y} - 2\bar{Y}.n.\bar{Y} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{SSreg = \hat{\underset{\sim}{b}}'.X'.\underset{\sim}{Y} - 2n.\bar{Y}^2}$$

$$\text{Από } (1),(2),(3): \quad SStot = SSreg + SSres \quad \boxed{\checkmark}$$

Πίνακας ΑναΔια μοντέλου π.γ.π:

Πηγή Μεταβλητότητας	SS	β.ε	MS	F-πηλίκο
Μοντέλο π.γ.π	SSreg	p	$MSreg = \frac{SSreg}{p}$	$F = \frac{MSreg}{MSres}$
Υπόλοιπα	SSres	$n-p-1$	$MSres = \frac{SSres}{n-p-1}$	
Ολική Μεταβλητότητα	SStot	$n-1$		