

## Филатов Александр Юрьевич

(Главный научный сотрудник, доцент ШЭМ ДВФУ)

alexander.filatov@gmail.com

http://vk.com/alexander.filatov, http://vk.com/baikalreadings

Лекции 3.1-3.2 Регрессионный анализ. МНК. Мультиколлинеарность



## Регрессионный анализ

Построение функциональной зависимости результирующей переменной y от объясняющих переменных  $x^{(1)},...,x^{(n)}$ .

**Этимология (Фрэнсис Гальтон):** «регрессия» – отступление, возврат.

x — рост отца Положительная связь, но тенденция возврата

y - poct сына (отклонение сына < отклонения отца).

Классическая линейная модель множественной регрессии (КЛММР):  $y_i = \theta_0 + \theta_1 x_i^{(1)} + ... + \theta_p x_i^{(p)} + \varepsilon_i, \quad i = 1,...,n.$ 

$$y_i = \theta_0 + \theta_1 x_i^{(1)} + \dots + \theta_p x_i^{(p)} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

#### Свойства:

 $1. E\varepsilon_i = 0, \ i = 1,...,n$  — остатки в среднем нулевые.

 $2. E(\varepsilon_i \varepsilon_j) = \begin{cases} \sigma^2, i = j - \text{гомоскедастичность.} \\ 0, \quad i \neq j - \text{взаимная некоррелированность.} \end{cases}$ 

 $3. rank X = p+1 \le n$  — линейная независимость регрессоров, существует матрица  $(X^TX)^{-1}$ , если p+1 > n, для выводов недостаточно данных.



## Линейная регрессия: матричная форма

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} = 1 & x_1^{(1)} & \dots & x_1^{(p)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n^{(0)} = 1 & x_n^{(1)} & \dots & x_n^{(p)} \end{pmatrix}, \quad \Theta = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \dots \\ \theta_p \end{pmatrix},$$

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}, \quad \sum_{\varepsilon} = \begin{pmatrix} E(\varepsilon_1^2) & \dots & E(\varepsilon_1 \varepsilon_n) \\ \dots & \dots & E(\varepsilon_n \varepsilon_n) \end{pmatrix}$$

Если в дополнение к перечисленным 3 свойствам добавить распределение остатков по нормальному закону, получим нормальную КЛММР.



## **Оценивание параметров. Метод наименьших квадратов**

#### Принцип:

Прогнозные значения должны минимально отличаться от наблюдаемых. Минимальность понимается в смысле суммы квадратов отклонений.

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_{i}^{2} \to \min_{\theta_{0},...,\theta_{p}},$$

$$\varepsilon_{i} = y_{i} - \theta_{0} - \theta_{1} x_{i}^{(1)} - ... - \theta_{p} x_{i}^{(p)}$$



#### Матричная форма:

$$\varepsilon = Y - X\Theta, \quad (Y - X\Theta)^T (Y - X\Theta) \to \min_{\Theta}, \qquad (AB)^T = B^T A^T$$

$$Y^T Y - 2\Theta^T X^T Y + \Theta^T X^T X\Theta \to \min_{\Theta}, \quad -2X^T Y + 2X^T X\Theta = 0,$$

$$\hat{\Theta} = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$



## Метод наименьших квадратов. Случай парной регрессии

Случаи парнои регрессии
$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix}$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \quad X^T X = \begin{pmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix}, \quad X^T Y = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}.$$

$$(X^T X)\Theta = X^T Y, \qquad \begin{cases} n\theta_0 + \theta_1 \sum x_i = \sum y_i, \\ \theta_0 \sum x_i + \theta_1 \sum x_i^2 = \sum x_i y_i. \end{cases} \qquad \theta_0 = \frac{\sum y_i - \theta_1 \sum x_i}{n}.$$

$$\sum x_i \sum y_i - \theta_1 \left(\sum x_i\right)^2 + \theta_1 n \sum x_i^2 = n \sum x_i y_i.$$

### Формулы МНК для парной регрессии $y = \theta_0 + \theta_1 x$ :

$$\hat{\theta}_1 = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}, \qquad \hat{\theta}_0 = \overline{y} - \hat{\theta}_1 \overline{x}.$$



## Численный пример



	объем	цена	рекл	празд
	y	$x^{(1)}$	$x^{(2)}$	$x^{(3)}$
янв.16	91	1990	10	6
фев.16	93	1990	30	1
мар.16	84	1990	30	2
апр.16	77	1990	10	0
май.16	69	2190	10	3
июн.16	49	2190	0	1
июл.16	53	2190	0	0
авг.16	55	2190	20	0
сен.16	62	2190	20	0
окт.16	69	2190	20	0
ноя.16	68	2190	20	1
дек.16	109	2190	20	0
янв.17	70	2590	20	5
фев.17	87	2390	20	2

	объем	цена	рекл	празд
	y	$x^{(1)}$	$x^{(2)}$	$x^{(3)}$
мар.17	66	2290	20	1
апр.17	61	2290	20	0
май.17	66	2290	20	3
июн.17	55	2090	50	1
июл.17	89	2090	50	0
авг.17	64	2090	10	0
сен.17	56	2090	0	0
окт.17	68	2090	0	0
ноя.17	109	2090	80	1
дек.17	115	1890	20	0
янв.18	95	2090	20	6
фев.18	88	2290	40	1
мар.18	82	2290	40	2
апр.18	72	2290	20	0

= ЛИНЕЙН 
$$(y_1,...,y_n; x_1^{(1)},...,x_n^{(p)}; 1; 1)$$
.  
 $3 \times (p+1) \Rightarrow \text{формула} \Rightarrow \text{Ctrl-Shift-Enter}$   
 $\hat{y}_i = 158,8 - 0,045x_i^{(1)} + 0,471x_i^{(2)} + 2,70x_i^{(3)}$ 

2,70	0,471	-0,045	158,8
1,62	0,164	0,020	43,7
0,386	14,91	#Н/Д	#Н/Д

## Свойства оценок

На разных выборках за счет случайного характера остатков будут получены различные оценки!

**1. Состоятельность:**  $\lim_{n\to\infty} \hat{\theta} = \theta$ .

При росте выборки оценка стремится к истинному значению параметра (асимптотическое свойство проявляющееся при больших n).

Замечание 1: Состоятельные оценки бывают разного качества.

## В случае симметрично распределенной случайной величины

$$\hat{\theta}_1 = \overline{x} = \frac{1}{n} (x_1 + \dots + x_n), \quad \hat{\theta}_2 = \frac{1}{2} (x_{\min} + x_{\max}) - \text{состоятельные оценки.}$$

**Замечание 2:** Состоятельная оценка может быть сколь угодно далекой от истинного значения.

## Средняя зарплата в отрасли, где работают n человек

$$\theta = \begin{cases} \theta_0, \ n < N \end{cases}$$
 при любом объеме выборки, кроме сплошного обслежа,  $n = N \end{cases}$  дования, получаем сколь угодно завышенный результат.



### Свойства оценок



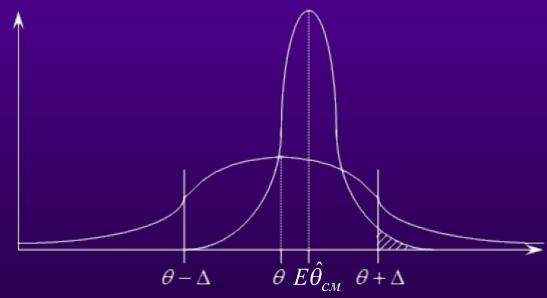
**2. Несмещенность:**  $E\hat{\theta} = \theta$  при любом объеме выборки.

Усреднение полученных оценок по всем выборкам данного объема дает истинное значение параметра (свойство «хороших свойств» оценки при каждом конечном объеме выборки).

3. Эффективность: 
$$E(\hat{\theta}_{eff} - \theta)^2 = \min_{\hat{\theta} \in M} (\hat{\theta} - \theta)^2$$

Эффективная оценка обладает наименьшим случайным разбросом в изучаемом классе M.

Замечание: Смещенная оценка может быть точнее несмещенной.



значения оценок на разных выборках

## Свойства оценок КЛММР

Важен не только полученный по выборке вид регрессии, но и то, насколько мы можем ему доверять!

#### Несмещенная оценка ошибки прогноза:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p-1} \sum_{i=1}^{n} \left( y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i^{(1)} - \dots - \hat{\theta}_p x_i^{(p)} \right)^2.$$

$$\hat{\sigma} = 14,91.$$

2,70	0,471	-0,045	158,8
1,62	0,164	0,020	43,7
0,386	14,91	#Н/Д	#Н/Д

#### Ковариационная матрица оценок параметров:

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\Theta}} = E\left(\left(\hat{\Theta} - \Theta\right)\left(\hat{\Theta} - \Theta\right)^{T}\right) = \hat{\sigma}^{2}\left(X^{T}X\right)^{-1}$$

Наиболèе важными являются диагональные элементы — квадраты среднеквадратических ошибок  $s_i$  оценок коэффициентов  $\theta_i$ .

$$\hat{y}_i = 158.8 - 0.045 x_i^{(1)} + 0.471 x_i^{(2)} + 2.70 x_i^{(3)}.$$

$$(43.7) \quad (0.020) \quad (0.164) \quad (1.62)$$

2,70	0,471	-0,045	158,8
1,62	0,164	0,020	43,7
0,386	14,91	#Н/Д	#Н/Д

### Значимость регрессоров

$$t_j = \frac{\theta_j - \theta_j}{s_j} \sim t(n-p-1)$$
 — распределена по закону Стьюдента.

### Проверка гипотезы о значимости регрессоров: $H_0$ : $\theta_i = 0$

- 1. Задаем уровень значимости  $\alpha$ .

- 2. Находим эмпирическую точку  $t_j = \theta_j / s_j$ . 3. Находим критическую точку  $t_{\text{крит}} = \text{СТЬЮДРАСПОБР}(\alpha; n-p-1)$ . 4. Если  $|t_j| > t_{\text{крит}}$ , то  $H_0$  отвергается и делается вывод о наличии связи.

$$\hat{y}_{i} = 158,8 - 0,045 x_{i}^{(1)} + 0,471 x_{i}^{(2)} + 2,70 x_{i}^{(3)}.$$

$$t_{0} = \frac{158,8}{43,7} = 3,64, \quad t_{1} = \frac{-0,045}{0,020} = -2,22, \quad t_{2} = \frac{0,471}{0,164} = 2,87, \quad t_{3} = \frac{2,70}{1,62} = 1,67,$$

 $t_{\text{крит}} = \text{СТЬЮДРАСПОБР}(0,05; 28 - 3 - 1) = 2,06.$ 

Гипотеза  $H_0$  принимается для  $\theta_3$  и отвергается для  $\theta_0$ ,  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  при  $\alpha=0.05$ . Регрессор  $x^{(3)}$  незначим, коэффициент  $heta_3$  не отличается значимо от 0,регрессоры  $x^{(1)}$  и  $x^{(2)}$  значимо влияют на у.

## Построение доверительного интервала

11

$$\hat{y}_i = 158,8 - 0,045 x_i^{(1)} + 0,471 x_i^{(2)} + 2,70 x_i^{(3)}.$$

$$(43,7) \quad (0,020) \quad (0,164) \quad (1,62)$$

При уровне значимости 1% ( $t_{\text{крит}} = 2,80$ ) незначимой становится цена, при 0,1% ( $t_{\text{крит}} = 3,75$ ) – реклама.

При уровне значимости 10% ( $t_{\text{крит}} = 1,71$ ) число праздников по-прежнему незначимо, но если бы число наблюдений составило n=100 ( $t_{\text{крит}} = 1,66$ ), то выводы сменились на противоположные.

#### Построение доверительного интервала для $\theta_i$ :

1. Задаем доверительную вероятность  $\gamma$ .

2. 
$$\theta_{j} \in [\hat{\theta}_{j} - t_{1-\gamma}(n-p-1)s_{j}; \ \hat{\theta}_{j} + t_{1-\gamma}(n-p-1)s_{j}]$$
.  $\theta_{0} \in [68,7; 249,0],$   $\theta_{1} \in [-0,086; -0,003],$   $\theta_{2} \in [0,132; 0,809],$   $\theta_{3} \in [-0,64; 6,04]$  с вероятностью  $\gamma = 0,95$ .



## Проверка гипотезы о значимости модели

## Проверка гипотезы о значимости модели: $H_0$ : $R^2 = 0$

- 1. Задаем уровень значимости  $\alpha$ .
- 2. Находим эмпирическую точку  $F_{\text{эмп}} = \frac{\hat{R}_{y,X}^2 \quad n p 1}{1 \hat{R}_{y,X}^2 \quad p}$ .
- 3. Находим критическую точку  $F_{\text{крит}} = \text{FPAC\PiOFP}(\alpha; p; n-p-1).$  4. Если  $F_{\text{эмп}} > F_{\text{крит}}$ , то  $H_0$  отвергается и делается вывод о наличии связи, иначе гипотеза принимается, линейная модель неадекватна.

#### В случае линейной модели квадрат множественного коэффициента корреляции $\mathbb{R}^2$ равен коэффициенту детерминации!

$$\hat{R}^2 = 0,386, \quad F_{\text{эмп}} = \frac{0,386}{1 - 0,386} \frac{28 - 3 - 1}{3} = 5,03,$$

$$F_{\text{крит}} = F_{0,05}(3;24) = 3,01.$$

Гипотеза  $H_0$  отвергается, линейная модель значима при  $\alpha = 0.05$ .

#### Неправомерное исключение значащих объясняющих переменных

- 1) Смещены оценки коэффициентов регрессии;
- 2) Еще сильнее смещена оценка дисперсии остатков. Всё это приводит к неверным выводам!
- ## В примере не учтена дополнительная переменная цена конкурента. Цена конкурента  $x^{(4)}$  в течение 24 месяцев из 28 совпадает с нашей.

#### Но есть 4 отличающихся месяца:

Декабрь 2016:  $x_{12}^{(4)} = \overline{23900}$  онкурент раньше поднял цены.

Февраль 2017:  $x_{14}^{(4)} = 25960$ нкурент позже опустил цены.

Июнь 2017:  $x_{18}^{(4)} = 1696$ онкурент организовал летнюю распродажу.

Январь 2018:  $x_{25}^{(4)} = 189$  сонкурент продолжил зимнюю распродажу.

### Сопоставление моделей

Старая модель:

$$\hat{y}_i = 158.8 - 0.045 x_i^{(1)} + 0.471 x_i^{(2)} + 2.70 x_i^{(3)}, \quad \hat{R}^2 = 0.386.$$

$$(43.7) \quad (0.020) \quad (0.164) \quad (1.62)$$

#### Новая модель:

$$\hat{y}_i = 201,3 - 0,177 x_i^{(1)} + 0,623 x_i^{(2)} + 4,22 x_i^{(3)} + 0,111 x_i^{(4)}, \quad \hat{R}^2 = 0,713.$$
(31,6) (0,029) (0,118) (1,17)

#### Можно учесть влияние предпраздничного месяца:

$$\hat{y}_i = 173,3 - 0,142 \, x_i^{(1)} + 0,641 \, x_i^{(2)} + 4,31 \, x_i^{(3)} + 0,085 \, x_i^{(4)} + 5,29 \, x_{i+1}^{(3)}, \quad \hat{R}^2 = 0,908.$$

$$(18,7) \quad (0,018) \quad (0,068) \quad (0,68) \quad (0,013) \quad (0,77)$$

#### Есть риск введения в модель лишних несущественных переменных:

Меньшее из зол, однако при увеличении числа переменных

- 1) Ослабевает точность выводов, зависящая от n / (p+1);
- 2) Возможно появление **мультиколлинеарности** взаимозависимости объясняющих переменных.

## Мультиколлинеарность

Полная мультиколлинеарность — линейная функциональная связь между объясняющими переменными, одна из них линейно выражается через остальные.

 $rank X < p+1, X^{T}X$  – вырожденная,  $(X^{T}X)^{-1}$  – не существует. Избежать легко – на этапе отбора объясняющих переменных.

Частичная мультиколлинеарность – тесная, однако не функциональная связь между объясняющими переменными, выявляется сложнее.

## Эвристические рекомендации для выявления частичной мультиколлинеарности

- 1. Анализ корреляционной матрицы  $R: |r_{ij}| > 0.8.$ 2. Анализ обусловленности матрицы  $X^TX, |X^TX| \approx 0.$
- 3. Анализ собственных чисел матрицы  $X^{T}X$ ,  $\lambda_{min} \approx 0$ .
- 4. Анализ коэффициентов детерминации каждой объясняющей переменной  $x^{(j)}$  по всем остальным:  $R^2_{\ j} > 0,9$ .



# Эвристические рекомендации для выявления частичной мультиколлинеарности

## 16

#### 5. Анализ экономической сущности модели.

## Некоторые оценки коэффициентов имеют неверные с точки зрения экономической теории значения (неверные знаки, слишком большие или слишком малые значения).

#### 6. Анализ чувствительности модели.

## Небольшое изменение данных (добавление или изъятие небольшой порции наблюдений) существенно изменяет оценки коэффициентов модели (вплоть до изменения знаков).

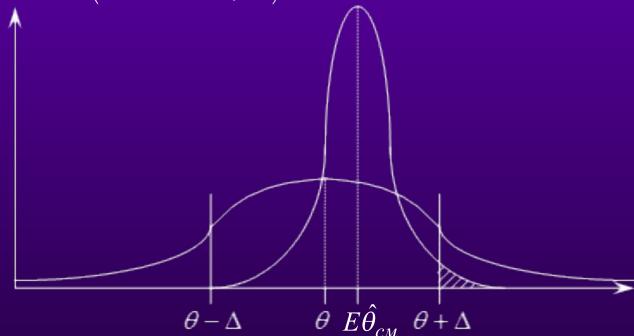
#### 7. Анализ значимости модели.

## Большинство (или даже все) оценки коэффициентов модели статистически неотличимы от нуля, в то время как модель в целом является значимой.

## **Переход к смещенным методам оценивания**

#### Смещенная оценка может быть более точно, чем несмещенная!

Один из методов — «ридж-регрессия» (ridge — гребень): добавляем к диагональным элементам матрицы  $X^TX$  «гребень»  $\tau \in (0,1; 0,4)$ , матрица становится хорошо обусловленной:



значения оценок на разных выборках

## Отбор наиболее существенных объясняющих переменных

## 18

#### 1. Версия всех возможных регрессий.

Для заданного k = 1, ..., p-1 находится набор переменных  $x^{(j_1)}, ..., x^{(j_k)}$ , дающих максимальное значение коэффициента детерминации  $R^2(k)$ . Увеличиваем число переменных k, пока растет нижняя граница ~95%-доверительного интервала для коэффициента детерминации.

$$R_{\min}^{2}(k) = \hat{R}_{\text{Hecm}}^{2}(k) - 2\sqrt{\frac{2k(n-k-1)}{(n-1)(n^{2}-1)}} (1 - \hat{R}^{2}(k)), \ \hat{R}_{\text{Hecm}}^{2}(k) = 1 - (1 - \hat{R}^{2}(k)) \frac{n-k}{n-k-1}.$$

**Проблема:** огромное количество переборов (для 20 переменных – более 1 млн).

#### 2. Версия пошагового отбора переменных.

При переходе от k переменных к (k+1) учитываются результаты предыдущего шага — все отобранные переменные остаются навсегда. Проблема: нет гарантии получения оптимума.

#### 1.1. Подготовительный этап

- 1) Центрирование и нормирование переменных:  $(x_i^{(j)} \overline{x}^{(j)}) / \sqrt{\sigma_i}$
- 2) Вычисление матрицы ковариаций

$$\sum = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{11} & \dots & \hat{\sigma}_{1p} \\ \dots & \dots & \dots \\ \hat{\sigma}_{p1} & \dots & \hat{\sigma}_{pp} \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{kj} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left( x_i^{(k)} - \overline{x}^{(k)} \right) \left( x_i^{(j)} - \overline{x}^{(j)} \right) = \\ = KOBAP \left( x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}; x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)} \right).$$

## 1.2. Решение характеристического уравнения $\sum -\lambda E = 0$

- 1) Нахождение собственных чисел  $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge ... \ge \overline{\lambda_p} > 0$ .
  2) Нахождение собственного вектора  $l^{(k)}$  для каждого корня  $\lambda_k$ .

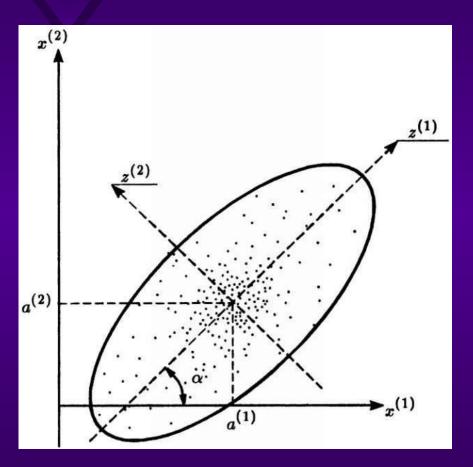
$$\left(\sum -\lambda_k E\right) l^{(k)} = 0, \quad \left\| l^{(k)} \right\| = 1.$$

**1.3.** Переход к новым переменным Z = XL  $z^{(k)} = X l^{(k)}, \ k = 1,...,p'$  — новые переменные, «главные компоненты»

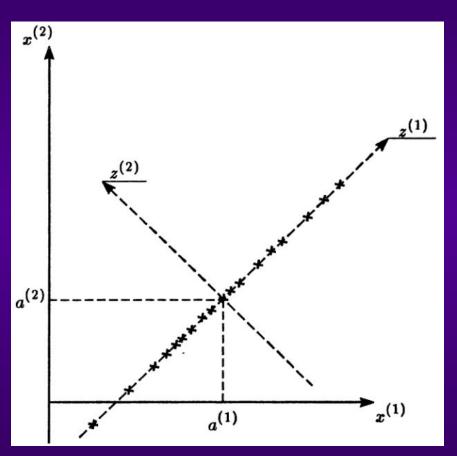
$$I_{p'} = rac{\lambda_1 + ... + \lambda_{p'}}{\lambda_1 + ... + \lambda_p}$$
 — доля дисперсии, вносимая первыми  $p$  ' главными компонентами.



## **Геометрическая интерпретация метода главных компонент**



**Рис.1.** Умеренный разброс точек вдоль  $z^{(2)}$ 



**Рис.2.** Вырожденный случай: отсутствие разброса вдоль  $z^{(2)}$ 



**Матрица нагрузок главных компонент на исходные переменные:** 
$$A \in R^{p \times p'}, \ A = L\Lambda^{1/2}, \ \Lambda^{1/2} = diag\{\sqrt{\lambda_j}\}, \ a_{ij} = r(x^{(i)}, z^{(j)})$$

## Наблюдения – помесячные данные

 $x^{(1)}$  — число торговых точек, где распространяется продукция, шт.

 $x^{(2)}$  – расходы на рекламу, руб.

 $x^{(3)}$  — доля новинок в ассортименте, %

 $x^{(4)}$  — средний месячный доход на душу населения, руб.

 $x^{(5)}$  — количество праздников, шт.

$$A = \begin{pmatrix} 0.95 & x^{(2)} \\ 0.95 & -0.19 \\ 0.97 & -0.17 \\ 0.94 & -0.28 \\ 0.24 & 0.88 \\ 0.56 & 0.67 \end{pmatrix} x^{(1)} x^{(2)} x^{(3)} x^{(4)}$$

$$\sum_{\substack{i=1\\ p}}^{p} a_{ij}^2 = a_{1j}^2 + a_{2j}^2 + \dots + a_{pj}^2 = \lambda_j$$

$$\sum_{\substack{j=1\\ j=1}}^{p} a_{ij}^2 = a_{i1}^2 + a_{i2}^2 + \dots + a_{ip}^2 = 1$$

 $z^{(1)}$  тесно связана с  $x^{(1)}$ ,  $x^{(2)}$ ,  $x^{(3)}$  $z^{(2)}$  тесно связана с  $x^{(4)}$ ,  $x^{(5)}$ 



## Спасибо за внимание!

<u>alexander.filatov@gmail.com</u> <u>http://vk.com/alexander.filatov, http://vk.com/baikalreadings</u>