Osnova přednášky Jednoduchá lineární regrese

1. Motivace

2. Specifikace klasického modelu lineární regrese
- 2.1. Základní pojmy
- 2.2. Označení
- 2.3. Význam jednotlivých typů součtů čtverců
- 2.4. Maticový zápis klasického modelu lineární regrese
- 2.5. Odhad regresních parametrů metodou nejmenších čtverců

3. Statistická inference v klasickém modelu lineární regrese
- 3.1. Intervaly spolehlivosti pro regresní parametry
- 3.2. Celkový F-test
- 3.3. Dílčí t-testy
- 3.4. Interval spolehlivosti pro teoretickou regresní funkci
- 3.5. Predikční interval spolehlivosti

4. Kritéria pro posouzení vhodnosti zvolené regresní funkce
- 4.1. Index determinace
- 4.2. Testové kritérium celkového F-testu
- 4.3. Reziduální součet čtverců a reziduální rozptyl
- 4.4. Střední absolutní procentuální chyba predikce

5. Analýza reziduí
- 5.1. Požadavky kladené na rezidua
- 5.2. Ověřování požadavků kladených na rezidua

1. Motivace

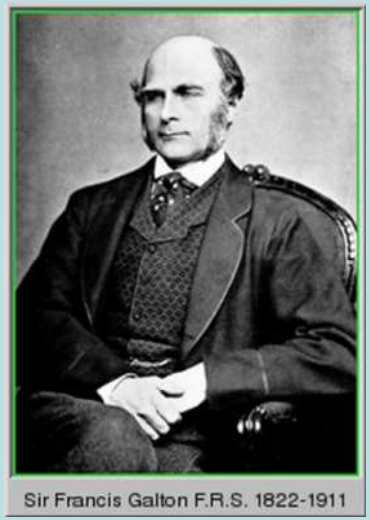
Cíl regresní analýzy - popsat závislost hodnot veličiny Y na hodnotách veličiny X.

Nutnost vyřešení dvou problémů:

a) jaký typ funkce se použije k popisu dané závislosti;

b) jak se stanoví konkrétní parametry daného typu funkce?

Základy regresní analýzy položil kolem roku 1880 Francis Galon, anglický vědec, činný ve velmi mnoha různých oborech: psychologii a antropologii, statistice, geografii a dalších. Byl to bratranec Charlese Darwina.



Sir Francis Galton F.R.S. 1822-1911

ad a) Při určení typu funkce je třeba provést teoretický rozbor zkoumané závislosti. Ten může upozornit například na to, že

- s růstem hodnot veličiny X budou mít hodnoty veličiny Y tendenci monotónně růst či klesat,
- jde o závislost, kdy s růstem hodnot veličiny X dochází zpočátku k růstu hodnot veličiny Y, který je po dosažení určitého maxima vystřídán poklesem,
- apod.

Vždy se snažíme o to aby regresní model byl jednoduchý, tj. aby neobsahoval příliš mnoho parametrů. Připadá-li v úvahu více funkcí, posuzujeme jejich vhodnost pomocí různých kritérií – viz dále.

Není-li dostatek informací k provedení teoretického rozboru, snažíme se odhadnout typ funkce pomocí tečkových diagramů.

Zde se omezíme na funkce, které závisejí lineárně na parametrech $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$.

ad b) Odhady $b_0, b_1, \ldots, b_p$ neznámých parametrů $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ získáme na základě dvourozměrného datového souboru $\begin{pmatrix} x_1 & y_1 \\ \ldots & \ldots \\ x_n & y_n \end{pmatrix}$

metodou nejmenších čtverců, tj. z podmínky, aby součet čtverců odchylek zjištěných a odhadnutých hodnot byl minimální.

Ilustrace metody nejmenších čtverců pro model přímky

2. Specifikace klasického modelu lineární regrese

2.1. Základní pojmy

Model má tvar $Y = m(x;\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p)+\varepsilon$, kde

$m(x;\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p)$ - teoretická regresní funkce

- lineárně závisí na neznámých regresních parametrech $\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p$,

- lineárně závisí na známých funkcích $f_1(x),\ldots,f_p(x)$, které již neobsahují neznámé parametry,

tj. $m(x;\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p)=\sum_{j=0}^{p}\beta_j f_j(x)$, přičemž $f_0(x)\equiv 1$. Jde o deterministickou složku modelu.

Složka ε - náhodná složka modelu:

- je to náhodná odchylka od deterministické závislosti Y na X,

- popisuje závislost vysvětlované proměnné na neznámých nebo nepozorovaných proměnných a popisuje i vliv náhody,

- nelze ji funkčně vyjádřit.

Veličina Y - závisle proměnná (též vysvětlovaná) veličina.

Veličina X - nezávisle proměnná (též vysvětlující) veličina.

Pořídíme n dvojic pozorování $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, tj. dvourozměrný datový soubor $\begin{pmatrix} x_1 & y_1 \\ \ldots & \ldots \\ x_n & y_n \end{pmatrix}$.

Pro i = 1, ..., n platí: $y_i = m(x_i; \beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) + \varepsilon_i$.

O náhodných odchylkách $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ předpokládáme, že

a) $E(\varepsilon_i) = 0$ (odchylky nejsou systematické)

b) $D(\varepsilon_i) = \sigma^2 > 0$ (všechna pozorování jsou prováděna s touž přesností)

c) $C(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$ pro $i \neq j$ (mezi náhodnými odchylkami neexistuje žádný lineární vztah)

d) $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

V tomto případě hovoříme o klasickém modelu lineární regrese.

2.2. Označení

$b_0, b_1, \ldots, b_p$ - odhady regresních parametrů $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ (nejčastěji je získáme metodou nejmenších čtverců, tj. z podmínky, že výraz $\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{p}\beta_j f_j(x_i)\right)^2$ nabývá svého minima pro $\beta_j = b_j$, j = 0, 1, …, p)

$\hat{m}(x; b_0, \ldots, b_p)$ - empirická regresní funkce

$\hat{y}_i = \hat{m}(x_i; b_0, \ldots, b_p) = \sum_{j=0}^{p} b_j f_j(x_i)$ - regresní odhad i-té hodnoty veličiny Y (i-tá predikovaná hodnota veličiny Y)

$e_i = y_i - \hat{y}_i$ - i-té reziduum

$S_E = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$ - reziduální součet čtverců, f_E = n-p-1 … reziduální počet stupňů volnosti

$s^2 = \frac{S_E}{n-p-1}$ - odhad rozptylu σ^2 (reziduální rozptyl, průměrný reziduální čtverec)

$S_R = \sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - m_2)^2$ - regresní součet čtverců ($m_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$), f_R = p … regresní počet stupňů volnosti

$\frac{S_R}{p}$ … průměrný regresní čtverec

$S_T = \sum_{i=1}^{n}(y_i - m_2)^2$ - celkový součet čtverců ($S_T = S_R + S_E$)

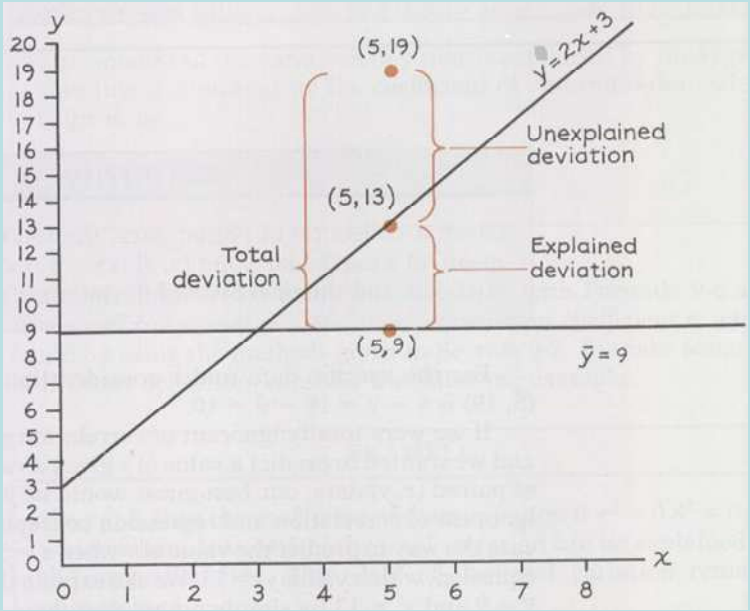
2.3 Význam jednotlivých typů součtů čtverců

Předpokládejme, že máme dvourozměrný datový soubor, v němž průměr hodnot závisle proměnné veličiny Y je 9 a závislost veličiny Y na veličině X je popsána regresní přímkou y = 2x + 3. Dvourozměrný tečkový diagram obsahuje bod o souřadnicích (5, 19), který pochází z datového souboru. Na regresní přímce leží bod o souřadnicích (5, 13).

Odchylka zjištěné hodnoty 19 od průměru 9 je v obrázku označena „Total deviation“ a po umocnění je to jedna ze složek celkového součtu čtverců S_T, tj. složka $y_i - m_2$.

Odchylka zjištěné hodnoty 19 od hodnoty 13 na regresní přímce je v obrázku označena „Unexplained deviation“ a po umocnění je to jedna ze složek reziduálního součtu čtverců S_E, tj. složka $y_i - \hat{y}_i$.

Odchylka hodnoty 13 na regresní přímce od průměru 9 je v obrázku označena „Explained deviation“ a po umocnění je to jedna ze složek regresního součtu čtverců S_R, tj. složka $\hat{y}_i - m_2$.



2.4. Maticový zápis klasického modelu lineární regrese

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & f_1(x_1) & \dots & f_p(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & f_1(x_n) & \dots & f_p(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \dots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}, \text{ tj } \mathbf{y} = \mathbf{X\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \text{ kde}$$

$\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ - vektor pozorování závisle proměnné veličiny Y,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & f_1(x_1) & \dots & f_p(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & f_1(x_n) & \dots & f_p(x_n) \end{pmatrix}$$ - regresní matice

(předpokládáme, že h(**X**) = p+1 < n)

$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)'$ - vektor regresních parametrů,

$\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)'$ - vektor náhodných odchylek.

Podmínky (a) až (d) lze zkráceně zapsat ve tvaru $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$.

Příklad

Sestrojte regresní matici **X** pro lineární regresní model

a) $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$, provedeme-li 4 měření,

b) $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i1}^2 + \beta_3 \ln x_{i2} + \varepsilon_i$, provedeme-li 5 měření.

Řešení:

ad a) $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \end{pmatrix}$, ad b) $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{11}^2 & \ln x_{12} \\ 1 & x_{21} & x_{21}^2 & \ln x_{22} \\ 1 & x_{31} & x_{31}^2 & \ln x_{32} \\ 1 & x_{41} & x_{41}^2 & \ln x_{42} \\ 1 & x_{51} & x_{51}^2 & \ln x_{52} \end{pmatrix}$

2.5. Odhad regresních parametrů metodou nejmenších čtverců

Maticově zapsaná metoda nejmenších čtverců $(\mathbf{y}-\mathbf{X\beta})'(\mathbf{y}-\mathbf{X\beta}) \to \min$ vede na rovnice

X'Xβ = X'y - systém normálních rovnic

b = $(\mathbf{X'X})^{-1}$ **X' y** – odhad vektoru **β** získaný metodou nejmenších čtverců

$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{Xb}$ – vektor regresních odhadů (vektor predikce)

e = y - ŷ - vektor reziduí

Vlastnosti odhadu **b** = $(\mathbf{X'X})^{-1}$ **X' y**:

- odhad **b** je lineární, je to lineární kombinace pozorování $y_1, \ldots, y_n$ s maticí vah $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$;

- odhad **b** je nestranný, neboť E(**b**) = **β**;

- odhad **b** má varianční matici var **b** = $\sigma^2(\mathbf{X'X})^{-1}$;

- odhad **b** ~ $N_{p+1}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 (\mathbf{X'X})^{-1})$ vzhledem k platnosti podmínky (d), tj $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$;

- **b** = $(\mathbf{X'X})^{-1}$ **X'y** je nejlepší nestranný lineární odhad vektoru **β**.

3. Statistická inference v klasickém modelu lineární regrese

3.1. Intervaly spolehlivosti pro regresní parametry

$s_{b_j} = s\sqrt{v_{jj}}$ - směrodatná chyba odhadu b_j, kde v_{jj} je j-tý diagonální prvek matice $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$.

Pro j = 0, 1, ..., p statistika $T_j = \dfrac{b_j - \beta_j}{s_{b_j}} \sim t(n-p-1)$, tedy 100(1- α)% interval spolehlivosti

pro β_j má meze: $b_j \pm t_{1-\alpha/2}(n-p-1)s_{b_j}$.

Pokud interval spolehlivosti obsahu nulu (tj. dolní mez je záporná a horní mez je kladná), pak regresní parametr je nevýznamný.

3.2. Testování významnosti modelu jako celku (celkový F-test)

Na hladině významnosti α testujeme

H_0: $(\beta_1,\ldots,\beta_p)' = (0,\ldots,0)'$ proti H_1: $(\beta_1,\ldots,\beta_p)' \neq (0,\ldots,0)'$.

(Nulová hypotéza říká, že dostačující je model konstanty.)

Testová statistika: $F = \dfrac{S_R/p}{S_E/(n-p-1)}$ má rozložení F(p, n-p-1), pokud H_0 platí.

Kritický obor: $W = \langle F_{1-\alpha}(p, n-p-1), \infty)$.

$F \in W \Rightarrow H_0$ zamítáme na hladině významnosti α.

Výsledky F-testu zapisujeme do tabulky analýzy rozptylu:

zdroj variability	součet čtverců	stupně volnosti	podíl	statistika F
model	S_R	p	S_R/p	$\dfrac{S_R/p}{S_E/(n-p-1)}$
reziduální	S_E	n-p-1	$S_E/(n-p-1)$	-
celkový	S_T	n-1	-	-

Příklad:

U 24 osob byl zjišťován jejich věk (v letech) a hodnoty systolického krevního tlaku (v mm rtuťového sloupce):

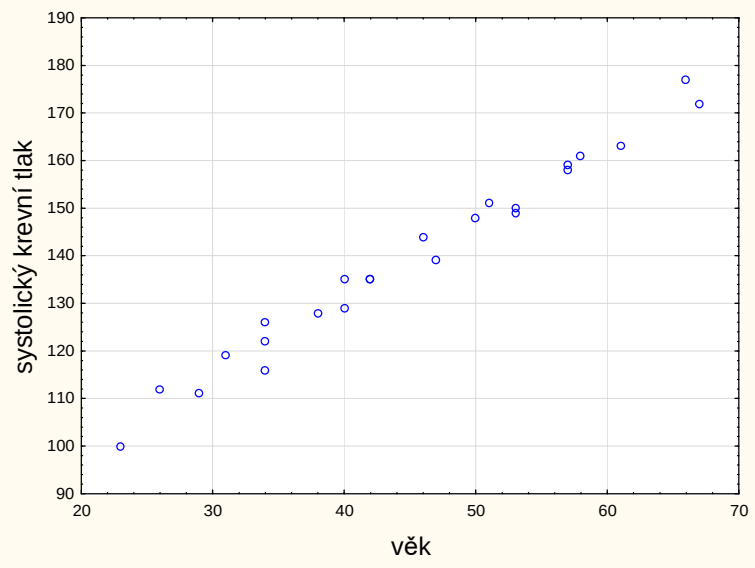
	1 i	2 X	3 Y
1	1	34	116
2	2	40	129
3	3	29	111
4	4	23	100
5	5	57	159
6	6	26	112
7	7	31	119
8	8	50	148
9	9	47	139
10	10	66	177
11	11	51	151
12	12	57	158
13	13	40	135
14	14	42	135
15	15	42	135
16	16	58	161
17	17	46	144
18	18	34	126
19	19	61	163
20	20	53	149
21	21	34	122
22	22	53	150
23	23	67	172
24	24	38	128

Předpokládejte, že závislost krevního tlaku na věku lze vyjádřit regresní přímkou $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$.

a) Vytvořte graf závislosti tlaku na věku a MNČ najděte odhady neznámých regresních parametrů β_0, β_1.

b) Sestrojte 95% intervaly spolehlivosti pro regresní parametry β_0, β_1.

Vytvoříme graf závislosti tlaku na věku:



Vzhled grafu svědčí o tom, že přímka by mohla být vhodným regresním modelem.

MNČ získáme odhady b_0, b_1 společně s 95% intervaly spolehlivosti pro β_0, β_1:

N=24	b	d	h
Abs.člen	66,808	62,246	71,370
X	1,609	1,511	1,706

Rovnice regresní přímky: $y = 66{,}808 + 1{,}609x$.
S pravděpodobností 95 % se bude úsek β_0 nacházet v intervalu (62,241; 71,370).
S pravděpodobností 95 % se bude směrnice β_1 nacházet v intervalu (1,511; 1,706).

Řešení v sytému R

Načteme data:

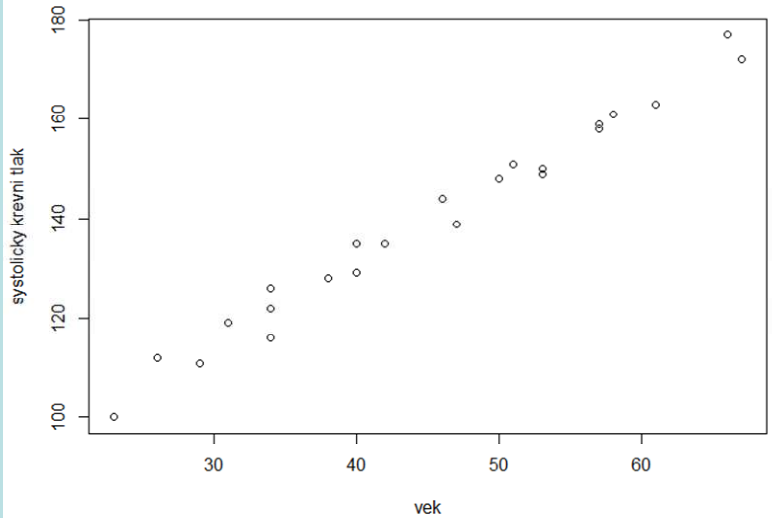
```
>vek_tlak <- read_csv("vek_tlak.csv")
```

Pojmenujeme nezávisle proměnnou X a závisle proměnnou Y:

```
> X<-vek_tlak$X
> Y<-vek_tlak$Y
```

Vykreslíme dvourozměrný tečkový diagram závislosti Y na X:

```
> plot(X,Y,xlab="vek",ylab="systolicky krevni tlak")
```



Sestavíme regresní model:

```
> vystup<-lm(Y~X)
> summary(vystup)

Call:
lm(formula = Y ~ X)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-5.4982 -2.2259  0.5037  2.1994  4.5018

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  66.8081     2.1996   30.37   <2e-16 ***
X             1.6085     0.0472   34.08   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 2.836 on 22 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9814,    Adjusted R-squared:  0.9806
F-statistic:  1161 on 1 and 22 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

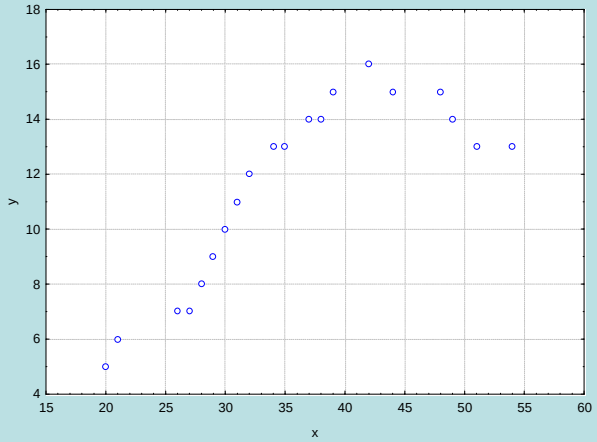
Najdeme meze 95% intervalů spolehlivosti pro regresní koeficienty:

```
> confint(vystup)
                2.5 %    97.5 %
(Intercept) 62.246338 71.369825
X            1.510642  1.706422
```

Příklad:
Majitelé prodejny počítačových her nechali své prodavače absolvovat kurz prodejních dovedností. Poté zjišťovali po dobu 20 dnů, kolik osob navštíví během otevírací doby prodejnu (proměnná X) a jaká je v tento den tržba (proměnná Y, udává se v tisících Kč a je zaokrouhlená).

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
x_i	20	21	26	27	28	29	30	31	32	34	35	37	38	39	42	44	48	49	51	54
y_i	5	6	7	7	8	9	10	11	12	13	13	14	14	15	16	15	15	14	13	13

Dvourozměrný tečkový diagram



Z grafu závislosti Y na X vyplývá, že s rostoucím počtem zákazníků se tržby zvyšují, avšak při denním počtu zákazníků asi 42 dosahují svého maxima a pak už zase klesají (vyšší počet zákazníků obsluha prodejny nezvládá a zákazníci odcházejí, aniž by nakoupili). Zdá se tedy, že vhodným modelem závislosti tržeb na počtu zákazníků bude regresní parabola

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \varepsilon.$$

Odhadněte parametry regresního modelu a proveďte celkový F-test.

Řešení:

Tabulka s odhady b_0, b_1, b_2 a mezemi 95% intervalů spolehlivosti pro β_0, β_1, β_2:

N=20	b	d	h
Abs.člen	-20,7723	-27,88920	-13,655307
x	1,5651	1,16517	1,965036
x^2	-0,0173	-0,02264	-0,011940

Regresní parabola má tedy tvar: $y = -20{,}7723 + 1{,}5651x - 0{,}0173x^2$.

Výsledky celkového F-testu:

Efekt	Součet čtverců	sv	Průměr čtverců	F	p-hodn.
Regres.	199,8141	2	99,90706	88,52445	0,000000
Rezid.	19,1859	17	1,12858		
Celk.	219,0000				

Regresní součet čtverců je 199,8141, reziduální 19,1859, testová statistika F nabývá hodnoty 88,524, odpovídající p-hodnota je blízká 0, tedy na hladině významnosti 0,05 zamítáme hypotézu, že dostačující je model konstanty.

Odhad rozptylu náhodných odchylek (reziduální rozptyl, průměrný reziduální čtverec) $s^2 = 1{,}12858$.

3.3. Testování významnosti regresních parametrů (dílčí t-testy)

Na hladině významnosti α pro j = 0,1, ..., p testujeme hypotézu
$H_0: \beta_j = 0$ proti $H_1: \beta j \neq 0$.

Testová statistika: $T_j = \frac{b_j}{s_{b_j}}$ má rozložení t(n-p-1), pokud H_0 platí.

Kritický obor: $W = \left(-\infty, -t_{1-\alpha/2}(n-p-1)\right\rangle \cup \left\langle t_{1-\alpha/2}(n-p-1), \infty\right)$.

$T_j \in W \Rightarrow H_0$ zamítáme na hladině významnosti α.

3.3. Testování významnosti regresních parametrů (dílčí t-testy)

Na hladině významnosti α pro j = 0,1, ..., p testujeme hypotézu
$H_0: \beta_j = 0$ proti $H_1: \beta j \neq 0$.

Testová statistika: $T_j = \frac{b_j}{s_{b_j}}$ má rozložení t(n-p-1), pokud H_0 platí.

Kritický obor: $W = \left(-\infty, -t_{1-\alpha/2}(n-p-1)\right\rangle \cup \left\langle t_{1-\alpha/2}(n-p-1), \infty\right)$.

$T_j \in W \Rightarrow H_0$ zamítáme na hladině významnosti α.

Příklad:
V předešlém příkladě, kde byla modelována závislost tržby na počtu zákazníků regresní parabolou, proveďte dílčí t-testy o nevýznamnosti jednotlivých regresních parametrů

Řešení:
Tabulka odhadu regresních parametrů s výsledky dílčích t-testů:

N=20	b	t(17)	p-hodn.
Abs.člen	-20,7723	-6,15792	0,000011
x	1,5651	8,25655	0,000000
x^2	-0,0173	-6,81912	0,000003

Sloupec označený t(17) obsahuje realizace testových statistik a sloupec p-hodn. pak odpovídající p-hodnoty. Ve všech třech případech jsou p-hodnoty menší než 0,05, tedy na hladině významnosti 0,05 zamítáme hypotézy o nevýznamnosti regresních parametrů β_0, β_1, β_2.

Interpretace výsledků F-testu a t-testů

Mohou nastat tyto situace:

a) F-test je významný, všechny t-testy jsou významné => vhodný model

b) F-test je nevýznamný, všechny t-testy jsou nevýznamné => nevhodný model

c) F-test je významný, ale některé t-testy jsou nevýznamné => vypustíme odpovídající vysvětlující proměnné

d) F-test je významný, ale všechny t-testy jsou nevýznamné => model formálně vyhovuje jako celek, ale žádná vysvětlující proměnná není významná. Je to důsledek silného lineárního vztahu mezi proměnnými (tzv. multikolinearita). Je nutné upravit nebo zcela změnit model.

3.4. Interval spolehlivosti pro teoretickou regresní funkci

V uvažovaném lineárním modelu $Y = m(x_0;\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p)+\varepsilon$ neboli $Y = \sum_{j=0}^{p}\beta_j f_j(x_0)+\varepsilon$ můžeme na základě n dvojic pozorování (x_i, y_i), i = 1, …, n získat jak bodové, tak intervalové odhady neznámých regresních parametrů $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$.
Lze však spočítat též meze 100(1-α) % intervalu spolehlivosti pro teoretickou regresní funkci při zadané hodnotě x_0, tj. pro hodnotou $m(x_0;\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p)=\sum_{j=0}^{p}\beta_j f_j(x_0)$.

100(1- α)% interval spolehlivosti pro $m(x_0;\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p)$ má meze

$$\mathbf{x}_0'\mathbf{b} \pm t_{1-\alpha/2}(n-p-1)s\sqrt{\mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0}\ .$$

Při spojité změně argumentu x_0 mezní hodnoty tohoto 100(1-α)% empirického intervalu spolehlivosti pro teoretickou regresní funkci vytvoří 100(1-α)% pás spolehlivosti kolem regresní funkce.

Pás spolehlivosti je nejužší v bodě $m_1 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$, směrem od tohoto bodu se na obě strany rozšiřuje.

Příklad: U automobilu Škoda 120 byla změřena spotřeba benzínu (v l/100 km) v závislosti na rychlosti (v km/h).

rychlost X	40	50	60	70	80	90	100	110
spotřeba Y	5,7	5,4	5,2	5,2	5,8	6,0	7,5	8,1

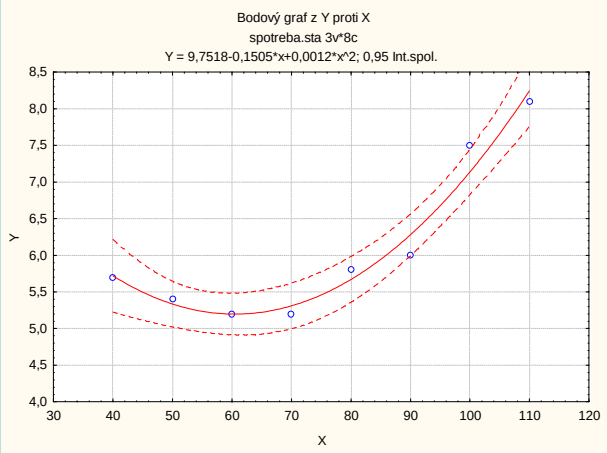
Vhodným modelem je regresní parabola $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$. Odhadněte její parametry a najděte 95% pás spolehlivosti kolem regresní funkce.

Řešení:

N=8	b	d	h	t(5)	p-hodn.
Abs.člen	9,751786	7,32081487	12,1827566	10,31183	0,000148
x	-0,150536	-0,2194809	-0,0815906	-5,61264	0,002483
x^2	0,001244	0,00078845	0,00169965	7,01912	0,000905

Spotřeba = 9,751786 – 0,150536*rychlost + 0,001244*rychlost^2

95% pás spolehlivosti kolem regresní funkce:



3.5. Predikční interval spolehlivosti

V případě, kdy chceme zkonstruovat 100(1- α)% interval spolehlivosti nikoli pro hodnotu regresní funkce, ale pro jednu novou pozorovanou hodnotu závisle proměnné veličiny Y (tzv. predikční interval), dostaneme meze

$$\mathbf{x}_0'\mathbf{b} \pm t_{1-\alpha/2}(n-p-1)s\sqrt{1+\mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0}\ .$$

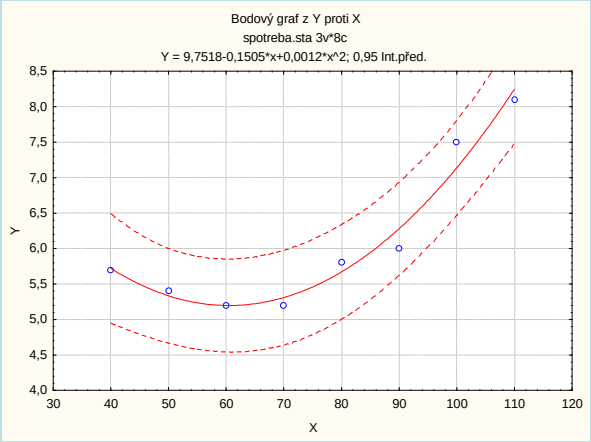
Vidíme, že tento predikční interval je širší než předešlý interval spolehlivosti.

Je to interval, který nás informuje o tom, v jakém rozsahu můžeme očekávat jedno další pozorování s pravděpodobností aspoň 1- α.

Při spojitě se měnícím $\mathbf{x}_0$ vytvoří meze tohoto predikčního intervalu spolehlivosti tzv. predikční pás spolehlivosti kolem regresní funkce.

Příklad: Pro regresní parabolu z předešlého příkladu sestrojte 95% predikční pás spolehlivosti kolem regresní funkce.

Řešení:



4. Kritéria pro posouzení vhodnosti zvolené regresní funkce

4.1. Index determinace

$ID^2 = \frac{S_R}{S_T} = 1 - \frac{S_E}{S_T}$ - index determinace $(0 \le ID^2 \le 1)$

- udává, jakou část variability závisle proměnné veličiny Y lze vysvětlit zvolenou regresní funkcí (často se udává v %);
- je zároveň mírou těsnosti závislosti proměnné Y na proměnné X;
- je to obecná míra, nezávislá na typu regresní funkce (lze použít i pro měření nelineární závislosti);
- je to míra, která nebere v úvahu počet parametrů regresní funkce. U regresních funkcí s více parametry vychází tedy obvykle vyšší než u regresních funkcí s méně parametry;
- tato míra není symetrická.

Za vhodnější se považuje ta regresní funkce, pro niž je index determinace vyšší. V případě, že porovnáváme několik modelů s rozdílným počtem parametrů, používáme adjustovaný index determinace:

$ID_{adj}^{\ 2} = ID^2 - \frac{(1 - ID^2)p}{n - p - 1}$ - adjustovaný index determinace

V příkladu s prodejem software najdeme index determinace ve výstupní tabulce regrese:

N=20	Výsledky regrese se závislou proměnnou : y (prodejna_software.sta) R= ,95519276 R2= ,91239322 Upravené R2= ,90208653 F(2,17)=88,524 p<,00000 Směrod. chyba odhadu : 1,0623					
	b*	Sm.chyba z b*	b	Sm.chyba z b	t(17)	p-hodn.
Abs.člen			-20,7723	3,373256	-6,15792	0,000011
x	4,52641	0,548220	1,5651	0,189559	8,25655	0,000000
xkv	-3,73838	0,548220	-0,0173	0,002535	-6,81912	0,000003

Index determinace je zde označen jako R2, nabývá hodnoty 0,9124 a říká nám, že 91,24% variability tržeb je vysvětleno regresní parabolou. Adjustovaný index determinace je označen Upravené R2.

Upozornění: Ve výstupní tabulce regrese najdeme též směrodatnou chybu odhadu, která je vypočtena podle vzorce $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2}{n-p-1}}$.

4.2. Testové kritérium celkového F-testu

Za vhodnější je považována ta regresní funkce, u níž je hodnota testové statistiky

$$F = \frac{S_R / p}{S_E / (n - p - 1)}$$ pro test významnosti modelu jako celku vyšší.

Ve výstupní tabulce regrese je testová statistika F uvedena v záhlaví:

Výsledky regrese se závislou proměnnou : y (prodejna_software.sta)
R= ,95519276 R2= ,91239322 Upravené R2= ,90208653
F(2,17)=88,524 p<,00000 Směrod. chyba odhadu : 1,0623

N=20	b*	Sm.chyba z b*	b	Sm.chyba z b	t(17)	p-hodn.
Abs.člen			-20,7723	3,373256	-6,15792	0,000011
x	4,52641	0,548220	1,5651	0,189559	8,25655	0,000000
xkv	-3,73838	0,548220	-0,0173	0,002535	-6,81912	0,000003

V našem příkladě je označena F(2,17) a nabývá hodnoty 88,524.

4.3. Reziduální součet čtverců a reziduální rozptyl

Reziduální součet čtverců: $S_E = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$

Za vhodnější považujeme funkci, která má reziduální součet čtverců nižší. Reziduální součet čtverců lze použít pouze tehdy, když srovnáváme funkce se stejným počtem parametrů.

Reziduální rozptyl: $s^2 = \frac{S_E}{n - p - 1}$

Za vhodnější považujeme tu funkci, která má reziduální rozptyl nižší. Reziduální rozptyl můžeme použít vždy, bez ohledu na to, kolik parametrů mají srovnávané regresní funkce.

Obě charakteristiky najdeme v tabulce ANOVA:

Efekt	Analýza rozptylu (prodejna_software.sta)				
	Součet čtverců	sv	Průměr čtverců	F	p-hodn.
Regres.	199,8141	2	99,90706	88,52445	0,000000
Rezid.	19,1859	17	1,12858		
Celk.	219,0000				

Reziduální součet čtverců je 19,1859 a reziduální rozptyl je 1,12858.

4.4. Střední absolutní procentuální chyba predikce (MAPE)

$$\mathrm{MAPE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right|$$

Za vhodnější považujeme tu funkci, která má MAPE nižší.

V příkladě s prodejem software je MAPE 9,31%.

5. Analýza reziduí

5.1. Požadavky kladené na rezidua

Rezidua považujeme za odhady náhodných odchylek a klademe na ně stejné požadavky jako na náhodné odchylky, tj.

- mají být nezávislá,
- mají být normálně rozložená,
- mají mít nulovou střední hodnotu,
- mají mít konstantní rozptyl (tj. jsou homoskedastická).

5.2. Ověřování požadavků kladených na rezidua

Nezávislost reziduí (autokorelaci) posuzujeme např. pomocí Durbinovy – Watsonovy statistiky, která by se měla nacházet v intervalu $\langle 1{,}4;2{,}6 \rangle$ (to je ovšem pouze orientační vodítko, korektní postup spočívá v porovnání této statistiky s tabelovanou kritickou hodnotou).

Normalitu reziduí ověřujeme pomocí testů normality (např. Lilieforsovou variantou Kolmogorovova – Smirnovova testu nebo Shapirovým – Wilkovým testem) či graficky pomocí N-P plotu.

Testování nulovosti střední hodnoty reziduí provádíme pomocí jednovýběrového t-testu.

Homoskedasticitu reziduí posuzujeme pomocí grafu závislosti reziduí na predikovaných hodnotách. V tomto grafu by rezidua měla být rovnoměrně rozptýlena.

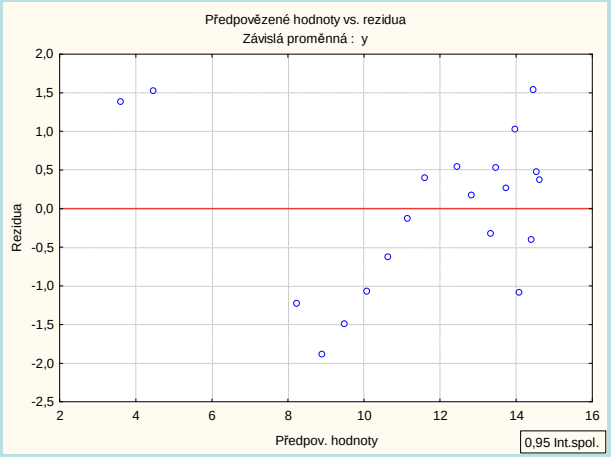
Příklad: Proveďte analýzu reziduí pro příklad s modelováním závislosti tržby na počtu zákazníků.

Posouzení nezávislosti reziduí pomocí Durbinovy – Watsonovy statistiky:

	Durbin-Watson.d
Odhad	0,702506

Hodnota této statistiky je nízká, svědčí o tom, že rezidua jsou kladně korelovaná.

Posouzení homoskedasticity reziduí pomocí grafu závislosti reziduí na předikovaných hodnotách



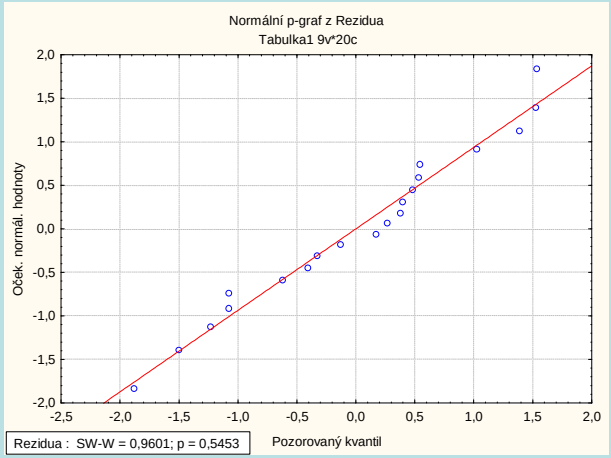
Je vidět, že rezidua nejsou kolem 0 rozmístěna náhodně. Model s regresní parabolou tedy není úplně vhodný.

Testování nulovosti střední hodnoty reziduí:

Proměnná	Průměr	Sm.odch.	N	Sm.chyba	Referenční konstanta	t	SV	p
Rezidua	-0,000000	1,004880	20	0,224698	0,00	-0,000000	19	1,000000

Na hladině významnosti 0,05 nezamítáme hypotézu, že střední hodnota reziduí je 0.

Posouzení normality reziduí pomocí N-P plotu:



Rezidua se řadí kolem ideální přímky, lze tedy soudit, že se řídí normálním rozložením.

Závěr: V neprospěch regresní paraboly hovoří hodnota Durbinovy – Watsonovy statistiky a graf závislosti reziduí na predikovaných hodnotách.

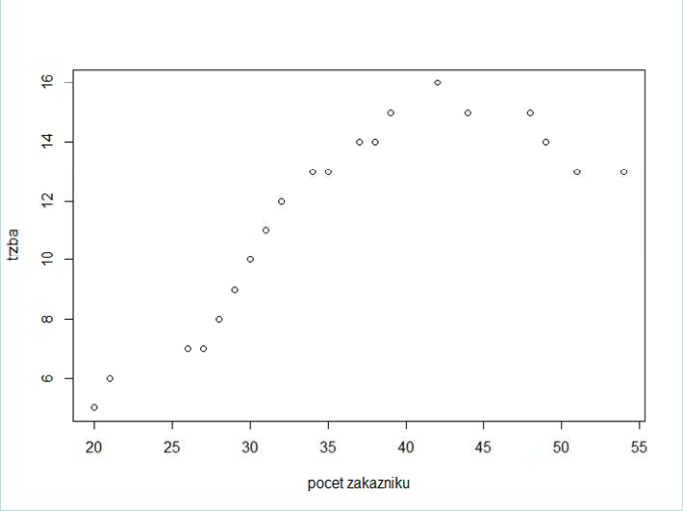
Postup pro regresní analýzu souboru prodejna_software.txt v systému R

Načteme data:

```
data <- read.delim('prodejna_software.txt',sep = ';',header=T)
```

Vytvoříme dvourozměrný tečkový diagram:

```
plot(x,y,xlab='pocet zakazniku', ylab='trzba')
```

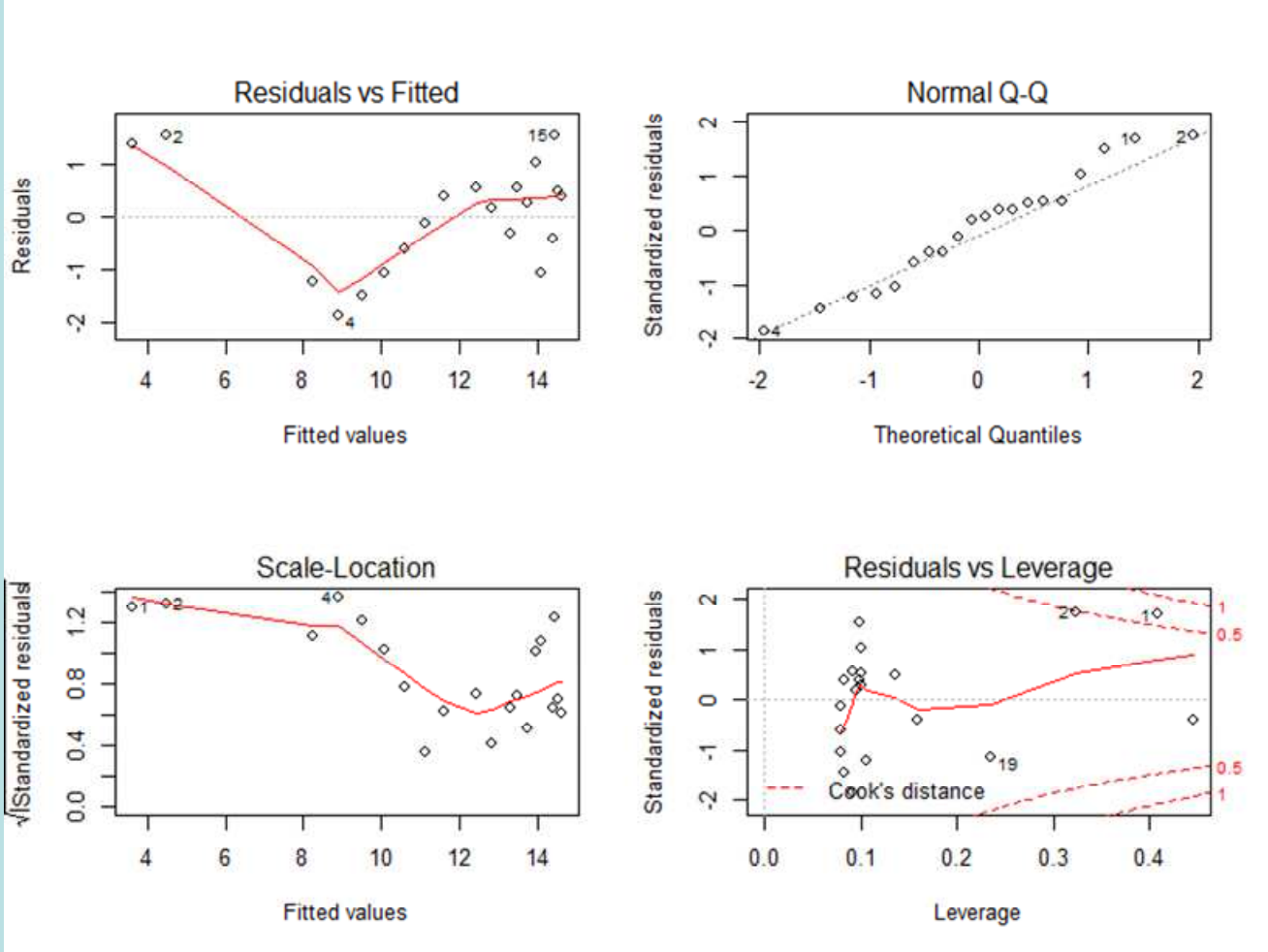


Zavedeme novou proměnnou xkv:

```
xkv<-x^2
```

Sestavíme model regresní přímky a pomocí analýzy reziduí ověříme předpoklady modelu:

```
model<-lm(y~x+xkv)
par(mfrow=c(2,2))
plot(model)
```



Předpoklad normality reziduí můžeme dále posoudit Shapirovým-Wilkovým testem, nulovost střední hodnoty pomocí t-testu a nezávislost reziduí pomocí Durbinova-Watsonova testu (v R je třeba načíst knihovnu car).

```
shapiro.test(model$residuals)
     Shapiro-Wilk normality test

data:  model$residuals
W = 0.96007, p-value = 0.5453
```

```
t.test(model$residuals)
     One Sample t-test

data:  model$residuals
t = -6.792e-17, df = 19, p-value = 1
alternative hypothesis: true mean is not equal to 0
95 percent confidence interval:
 -0.4702982  0.4702982
sample estimates:
   mean of x
-1.52615e-17
```

```
durbinWatsonTest(model)
 lag Autocorrelation D-W Statistic p-value
   1       0.5958889     0.7025064       0
 Alternative hypothesis: rho != 0
```

Podíváme se na podrobné informace o modelu:

```
summary(model)

Call:
lm(formula = y ~ x + xkv)
Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-1.8817 -0.7343  0.2185  0.5356  1.5361

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -20.772255   3.373256  -6.158 1.05e-05 ***
x             1.565102   0.189559   8.257 2.37e-07 ***
xkv          -0.017289   0.002535  -6.819 2.99e-06 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 1.062 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9124, Adjusted R-squared:  0.9021
F-statistic: 88.52 on 2 and 17 DF,  p-value: 1.027e-09
```

Výpočet 95% intervalů spolehlivosti pro regresní parametry:

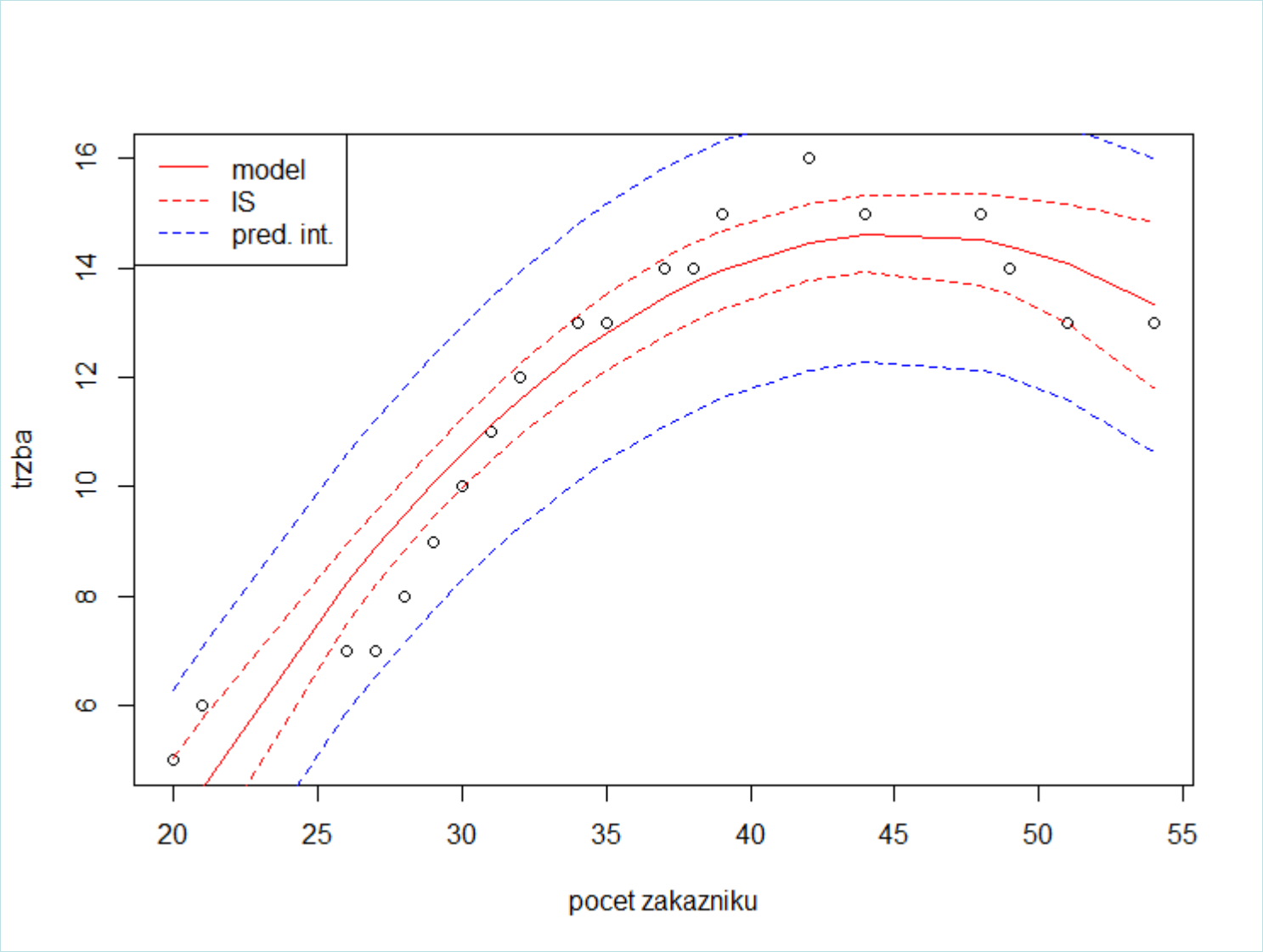
```
confint(model)
                   2.5 %       97.5 %
(Intercept) -27.88920254 -13.65530683
x             1.16516818   1.96503626
xkv          -0.02263843  -0.01193997
```

Výpočet střední absolutní procentuální chyby predikce:

```
MAPE<-100 * mean(abs(model$residuals/y))
> MAPE
[1] 9.308607
```

Vykreslení regresní paraboly společně s 95% pásem spolehlivosti a 95% predikčním pásem:

```
interval.spol <-predict(model,interval='confidence')
pred.interval <-predict(model,interval='predict')
plot(x,y,xlab='pocet zakazniku', ylab='trzba')
lines(x,interval.spol[,1],col='red')
> lines(x,interval.spol[,2], col='red', lty=2)
> lines(x,interval.spol[,3], col='red', lty=2)
> lines(x,pred.interval[,2], col='blue', lty=2)
> lines(x,pred.interval[,3], col='blue', lty=2)
> legend("topleft",c('model','IS','pred. int.'), lty=c(1,2,2),
+        col=c('red', 'red', 'blue'))
```


model
IS
pred. int.
trzba
pocet zakazniku
6
8
10
12
14
16
20
25
30
35
40
45
50
55