

Maximálně věrohodné odhady

Náhodný výběr X_1, \dots, X_n rozmahu n z rozdělení pravděpodobnosti P :

- ▶ $X_i \sim P$ ($i = 1, \dots, n$)
- ▶ X_1, \dots, X_n jsou stochasticky nezávislé
- ▶ Co to znamená pro vztah mezi simultánní a marginální hustotou pravděpodobnosti $f(x)$ (pravděpodobnostní funkci $p(x)$) ?

Rozdělení pravděpodobnosti závislé na parametru (parametrech) θ :

- ▶ $f(x), p(x)$ jako funkce proměnné $\theta \Rightarrow L(\theta)$
- ▶ Věrohodnostní funkce $L(\theta)$ a logaritmická věrohodnostní funkce $I(\theta)$:

$$L(\theta) = L(\theta; x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n f(x_i; \theta) = \prod_{i=1}^n p(x_i; \theta)$$

$$I(\theta) = I(\theta; x_1, \dots, x_n) = \ln L(\theta; x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \ln f(x_i; \theta) = \sum_{i=1}^n \ln p(x_i; \theta)$$

- ▶ Jak odhadnout θ ze znalosti X_1, \dots, X_n ?

Maximálně věrohodné odhady

Myšlenka: parametr θ odhadneme hodnotou, která je při daném náhodném výběru ze známého rozdělení pravděpodobnosti nejvíce pravděpodobná.

Maximálně věrohodný odhad (MLE = maximum likelihood estimator) $\hat{\theta}_{\text{ML}}$
 parametru θ se získá maximalizací věrohodnostní funkce $L(\theta)$:

$$\hat{\theta}_{\text{ML}} : L(\theta; x_1, \dots, x_n) \rightarrow \max_{\theta}, \quad \text{resp. } I(\theta; x_1, \dots, x_n) \rightarrow \max_{\theta}$$

To znamená najít stacionární bod funkce $I(\theta)$ vzhledem k θ ,

$$\frac{\partial}{\partial \theta} I(\theta) = 0 \quad (\text{věrohodnostní rovnice}),$$

a ověřit 2. diferenciál, resp. derivaci,

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} I(\theta) \right|_{\theta=\hat{\theta}_{\text{ML}}} < 0 .$$

Poznámka: v případě vektoru parametrů θ řešíme soustavu věrohodnostních rovnic pro θ z 1. derivací a ověřujeme negativní definitnost matice 2. derivací.

MLE – příklady (1)

- 1.** Najděte ML-odhad parametru $\theta \in [0, 1]$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z binomického rozdělení $\text{Bi}(m, \theta)$ ($m \in \mathbb{N}$) s pravděpodobností funkcí

$$p(x) = \binom{m}{x} \theta^x (1 - \theta)^{m-x} \quad \text{pro } x = 0, 1, \dots, m; \quad p(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

- 2.** Najděte ML-odhad parametru $\theta \in [0, 1]$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z geometrického rozdělení $\text{Ge}(\theta)$ s pravděpodobností funkcí

$$p(x) = (1 - \theta)^x \theta \quad \text{pro } x \in \mathbb{N}_0; \quad p(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

- 3.** Najděte ML-odhad parametrů $\mu \in \mathbb{R}$ a $\sigma^2 > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z Gaussova rozdělení $\text{N}(\mu, \sigma^2)$ s hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right].$$

- 4.** Najděte ML-odhad parametrů $\mu \in \mathbb{R}$ a $\sigma^2 > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z logaritmického normálního rozdělení $\text{LN}(\mu, \sigma^2)$:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}x} \exp\left[-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad \text{pro } x > 0; \quad f(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

MLE – příklady (2)

5. Najděte ML-odhad parametru $\mu > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z exponenciálního rozdělení $\text{Ex}(\mu)$ s hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = \frac{1}{\mu} \exp\left[-\frac{x}{\mu}\right] \quad \text{pro } x \geq 0; \quad f(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

6. Najděte ML-odhad parametru $\lambda > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z exponenciálního rozdělení $\text{Ex}(\lambda)$ s hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = \lambda \exp[-\lambda x] \quad \text{pro } x \geq 0; \quad f(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

7. Najděte ML-odhad parametrů $\lambda > 0$ a $k > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z Weibullovova rozdělení $\text{Wb}(\lambda, k)$ s hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = k \lambda x^{k-1} \exp[-\lambda x^k] \quad \text{pro } x \geq 0; \quad f(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

8. Najděte ML-odhad parametru $s > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z Rayleighova rozdělení $\text{Ra}(s)$ s hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = \frac{x}{s} \exp\left[-\frac{x^2}{2s}\right] \quad \text{pro } x \geq 0; \quad f(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

MLE – příklady (3)

9. Najděte ML-odhad parametru $\lambda > 0$ pro náhodný výběr X_1, \dots, X_n z Gamma rozdělení $\Gamma(\lambda, k)$ ($k > 0$) s hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = \frac{\lambda^k}{\Gamma(k)} x^{k-1} \exp[-\lambda x] \quad \text{pro } x \geq 0; \quad f(x) = 0 \quad \text{jinak.}$$

Najděte také věrohodnostní rovnici pro ML-odhad k .

Pomůcka: $\frac{\partial}{\partial k} \ln \Gamma(k) = \Psi(k) = \text{digamma funkce}$.

- * Další příklady pro odvození ML-odhadů parametrů v rozděleních s podobnými tvary hustot naleznete na stránce dr. Forbelské.

MLE – řešení příkladů

1. $\hat{\theta}_{\text{ML}} = \frac{\bar{X}}{2\bar{X} - n}$

2. $\hat{\theta}_{\text{ML}} = \frac{1}{1 + \bar{X}}$

3. $\hat{\mu}_{\text{ML}} = \bar{X} , \quad \widehat{\sigma^2}_{\text{ML}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \hat{\mu}_{\text{ML}})^2$

4. $\hat{\mu}_{\text{ML}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln X_i , \quad \widehat{\sigma^2}_{\text{ML}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\ln X_i - \hat{\mu}_{\text{ML}})^2$

5. $\hat{\lambda}_{\text{ML}} = \bar{X}$

6. $\hat{\lambda}_{\text{ML}} = \frac{1}{\bar{X}}$

7. $\hat{\lambda}_{\text{ML}} = \frac{n}{\sum_{i=1}^n X_i^k}$

8. $\hat{s}_{\text{ML}} = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n X_i^2$

9. $\hat{\lambda}_{\text{ML}} = \frac{k}{\bar{X}} , \quad \text{ML-rovnice pro } k: \Psi(\hat{k}_{\text{ML}}) = \ln \lambda + \bar{X}$

Odhady parametrů momentovou metodou

Odhady parametrů tzv. **metodou momentů** spočívá ve využití několika prvních (tolik, kolik potřebujeme) **momentů M_p** rozdělení pravděpodobnosti náhodné veličiny X ,

$$M_p = E(X^p) \quad (p = 1, 2, \dots)$$

Teoretické momenty M_p závisí na neznámých parametrech, které chceme odhadnout.

Momenty M_p v rovnici (rovnících) nahradíme (aproximujeme) **výběrovými momenty m_p** ,

$$m_p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^p \quad (p = 1, 2, \dots)$$

které závisí pouze na náhodném výběru. Algebraickým využitím (příp. numerickým výpočtem) hledaných parametrů z rovnice (systému rovnic) pro m_p obdržíme odhady **$\widehat{\theta}_{MM}$** momentovou metodou.

Momentové odhady – příklady

Jako cvičení spočtěte odhady parametrů momentovou metodou v příkladech 1.–9. pro maximálně věrohodné odhady.

Nejdříve odvoďte (pro hustoty integrováním), nebo pomocí tabulek či počítače nalezněte, momenty daných rozdělení pravděpodobnosti,

$$M_p = E(X^p) \quad (p = 1, 2, \dots)$$

Pro kontrolu jsou první dva momenty M_1, M_2 uvedeny v tabulce vpravo.

Poté odvoďte momentové odhady parametrů a porovnejte je s maximálně věrohodnými odhady.

příklad	M_1	M_2
1.	$m\theta$	$m\theta(1-\theta)$
2.	$\frac{1-\theta}{\theta}$	$\frac{(1-\theta)^2+(1-\theta)}{\theta^2}$
3.	μ	$\mu^2 + \sigma^2$
4.	$\exp[\mu + \frac{1}{2}\sigma^2]$	$\exp[2\mu + 2\sigma^2]$
5.	μ	$2\mu^2$
6.	$\frac{1}{\lambda}$	$\frac{2}{\lambda^2}$
7.	$\frac{1}{k} \lambda^{-\frac{1}{k}} \Gamma\left(\frac{1}{k}\right)$	$\lambda^{-\frac{2}{k}} \Gamma\left(1 + \frac{2}{k}\right)$
8.	$\sqrt{\frac{\pi s}{2}}$	$2s$
9.	$\frac{k}{\lambda}$	$\frac{k(k+1)}{\lambda^2}$

Momentové odhady – řešení příkladů

Označení: p -tý výběrový moment = $m_p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^p$ ($p = 1, 2, \dots$)

1. $\hat{\theta}_{\text{MM}} = \frac{m_1}{m}$

2. $\hat{\theta}_{\text{MM}} = \frac{1}{1 + m_1}$

3. $\hat{\mu}_{\text{MM}} = m_1$, $\widehat{\sigma^2}_{\text{MM}} = m_2 - m_1^2$

4. $\hat{\mu}_{\text{MM}} = 2 \ln m_1 - \frac{1}{2} \ln m_2$, $\widehat{\sigma^2}_{\text{MM}} = \ln m_2 - 2 \ln m_1$

5. $\hat{\lambda}_{\text{MM}} = m_1$

6. $\hat{\lambda}_{\text{MM}} = \frac{1}{m_1}$

8. $\hat{s}_{\text{MM}} = \frac{2 m_1^2}{\pi}$, anebo $\hat{s}_{\text{MM}} = \frac{m_2}{2}$

9. $\hat{\lambda}_{\text{MM}} = \frac{m_1}{m_2 - m_1^2}$, $\hat{k}_{\text{MM}} = \frac{m_1^2}{m_2 - m_1^2}$

Náhodné vektory

Náhodný vektor $X = (X_1, \dots, X_n)'$ (reálný) je měřitelná vektorová funkce $X = (X_1, \dots, X_n)': \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$, jejíž složky jsou náhodné veličiny, $X_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, na stejném pravděpodobnostním prostoru (Ω, \mathcal{A}, P) .

Střední hodnota $E(X)$ náhodného vektoru je definována po složkách:

$$E(X) = (E(X_1), \dots, E(X_n))'$$
.

Kovarianční matice $\text{cov}(X)$ (*variance-covariance matrix*) náhodného vektoru:

$$D(X) = \text{cov}(X) = \{c_{i,j}\}_{i,j=1}^n , \quad \text{kde } c_{i,j} = C(X_i, X_j) .$$

- ▶ $\text{cov}(X)$ je čtvercová řádu n , symetrická (proč?)
- ▶ hlavní diagonálu tvoří rozptyly $D(X_i)$, ostatní složky jsou kovariance $C(X_i, X_j)$
- ▶ pozitivně semidefinitní, tzn. $\forall u \in \mathbb{R}^n : u' \text{cov}(X) u \geq 0$

Poznámka: Anglická literatura často užívá společný pojem *variance* (var, Var). Potom rozumíme: $\text{var}(X) = D(X)$ pro náhodnou veličinu a $\text{var}(X) = \text{cov}(X)$ pro náhodný vektor.

Jednoduché transformace náhodných vektorů

Lineární transformace $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\boldsymbol{a} + B\boldsymbol{X}) &= \boldsymbol{a} + B\mathbb{E}(\boldsymbol{X}) \\ \text{cov}(\boldsymbol{a} + B\boldsymbol{X}) &= B \text{cov}(\boldsymbol{X}) B'\end{aligned}$$

Lineární forma $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(a + \boldsymbol{b}'\boldsymbol{X}) &= a + \boldsymbol{b}'\mathbb{E}(\boldsymbol{X}) \\ \text{D}(a + \boldsymbol{b}'\boldsymbol{X}) &= \boldsymbol{b}' \text{cov}(\boldsymbol{X}) \boldsymbol{b}\end{aligned}$$

Kvadratická forma $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\mathbb{E}(\boldsymbol{X}' A \boldsymbol{X}) = \mathbb{E}(\boldsymbol{X})' A \mathbb{E}(\boldsymbol{X}) + \text{Tr}[A \text{cov}(\boldsymbol{X})]$$

$\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m$; $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$; $a \in \mathbb{R}$; $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$; $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitivně definitní

Stopa (Trace) matice $= \text{Tr}(C) = \sum_{i=1}^n \{c_{i,i}\}$

Platí: $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB)$

Náhodné vektory – příklady (1)

V následujících příkladech spočítejte $E(\mathbf{X})$, $\text{cov}(\mathbf{X})$ náhodného vektoru \mathbf{X} :

13. Znáte: $E(X_i) = 10i$, $C(X_i, X_j) = ij$, ($i, j = 1, 2$).
14. Znáte: $E(X_i) = 10i$, $D(X_i) = i^2$, ($i, j = 1, 2, 3$); $\rho(X_i, X_j) = 0,5$ pro $i \neq j$.
15. \mathbf{X} je náhodný výběr rozsahu 4 z rozdělení $N(10, 4)$.
16. \mathbf{X} je náhodný výběr rozsahu 5 z rozdělení $E(\lambda)$.

17. Znáte: $E \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 30 \\ 2 \end{pmatrix}$, $\text{cov} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 100 & 0 & 25 \\ ? & 9 & ? \\ ? & 9 & 16 \end{pmatrix}$. Spočítejte střední hodnoty, rozptyly, kovariance, korelační koeficienty náhodných veličin X_1, X_2, X_3 . Které dvojice (trojice) veličin jsou stochasticky nezávislé?

18. V příkladu 17., s využitím vhodných transformací, spočítejte:

- ▶ $E(10X_3)$
- ▶ $D(10X_3)$
- ▶ $E(2X_1 - 5X_3 - X_2)$
- ▶ $D(2X_1 - 5X_3 - X_2)$
- ▶ $C(10X_3, 2X_1 - 5X_3 - X_2)$
- ▶ $\rho(10X_3, 2X_1 - 5X_3 - X_2)$
- ▶ $C(X_1 + X_2, X_3 - X_2)$
- ▶ $\rho(X_1 + X_2, X_3 - X_2)$

Náhodné vektory – příklady (2)

11. Dokažte vlastnosti kovarianční matice.
12. Dokažte vztahy pro střední hodnotu a kovarianční matici transformovaných náhodných vektorů.
19. OVĚŘTE, PRO ŽE VÝBĚROVÝ PRŮMĚR \bar{X} NÁHODNÉHO VÝBĚRU ROZSAHU n Z ROZDĚLENÍ SE STŘEDNÍ HODNOTOU μ A ROZPTYLEM σ^2 PLATÍ: $E(\bar{X}) = \mu$, $D(\bar{X}) = \sigma^2/n$.
20. OVĚŘTE, ŽE PRO VÝBĚROVÝ ROZPTYL S_X^2 NÁHODNÉHO VÝBĚRU ROZSAHU n Z ROZDĚLENÍ $N(\mu, \sigma^2)$ PLATÍ: $E(S_X^2) = \sigma^2$, $D(S_X^2) = 2\sigma^4/(n - 1)$.
21. OVĚŘTE, PRO ŽE PRO NÁHODNÝ VÝBĚR ROZSAHU n Z ROZDĚLENÍ SE STŘEDNÍ HODNOTOU μ A ROZPTYLEM σ^2 PLATÍ VZTAH $E[3Q_1 - Q_2] = (n - 3)\sigma^2$,
KDE $Q_1 = \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ A $Q_2 = (X_n - X_1)^2 + \sum_{i=2}^{n-1} (X_i - X_{i-1})^2$.
22. SPOČÍTEJTE $E(Y)$ A $\text{cov}(Y)$ TRANSFORMOVANÉHO NÁHODNÉHO VEKTORU

$$Y = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 2 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} X, \quad \text{když } E(X) = \begin{pmatrix} 0 \\ 10 \end{pmatrix}, \text{cov}(X) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} .$$

Náhodné vektory – příklady (3)

23. Spočtěte střední hodnotu $E(Y_1^2 + Y_2^2 + Y_3^2)$ a kovarianční matici $\text{cov}(Y)$, kde $Y_1 = X_1$, $Y_2 = X_1 + X_2$, $Y_3 = X_1 + X_2 + X_3$ jsou transformace vzájemně nezávislých náhodných veličin X_1, X_2, X_3 ,
 $E(X_1) = 10$, $E(X_2) = 20$, $E(X_3) = 30$, $D(X_1) = 1$, $D(X_2) = 4$, $D(X_3) = 9$.
24. Spočtěte střední hodnotu $E(Y_1 Y_2 + Y_2 Y_3 + Y_3 Y_1)$ a kovarianční matici $\text{cov}(Y)$, kde $Y_1 = X_2 + X_3$, $Y_2 = X_1 + X_3$, $Y_3 = X_1 + X_2$ jsou transformace vzájemně nekorelovaných složek náhodného vektoru X , $E(X) = (10, 10, 10)'$, $D(X_i) = i^2$.
25. Spočtěte $E(Y)$, $\text{cov}(Y)$ a $E(Y_1^2 + Y_2^2 + Y_3^2 + Y_4^2 + 2Y_1 Y_4)$, kde X_1, X_2, X_3, X_4 jsou náhodné veličiny, $E(X_i) = 10$, $C(X_i, X_j) = 1$. Známe transformační vztahy
 $X_1 = Y_1$, $X_2 = Y_2 - Y_1$, $X_3 = Y_3 - Y_2$, $X_4 = Y_4 - Y_3$.
26. Spočítejte střední hodnotu povrchu hranolu s podstavou tvaru čtverce. Délka hrany podstavy je náhodná veličina se střední hodnotou 10 a rozptylem 1, výška hranolu je náhodná veličina se střední hodnotou 20 a rozptylem 9 a její korelační koeficient s délkou hrany podstavy je 0,1.

Některé vztahy ve vektorové (maticové) formě

Když $X = (X_1, \dots, X_n)'$ je náhodný vektor, jeho kovarianční matici lze vyjádřit následujícím způsobem:

$$\text{cov}(X) = E \{ [X - E(X)] \cdot [X - E(X)]' \} .$$

Někdy je tímto vztahem kovarianční matice definována. Všimněte si podobnosti s definicí kovariance náhodných veličin: $C(X_1, X_2) = E \{ [X_1 - E(X_1)][X_2 - E(X_2)] \}$. V našem případě však jde součin vektorů (sloupec \cdot řádek \rightarrow matice).

Některé známé vztahy přepsané vektorově (maticově):

- ▶ $X_i = e'_i X$, $e_i = (0, \dots, 0, 1_i, 0, \dots, 0)$ je i -tý "jednotkový vektor"
- ▶ $n \bar{X} = \sum_{i=1}^n X_i = (1, \dots, 1) X$
- ▶ $\sum_{i=1}^n X_i^2 = X' I X$, $I = \text{diag}(1, \dots, 1) =$ "jednotková matice"
- ▶ $n^2 (\bar{X})^2 = X' J X$, $J = \{1\}_{i,j=1}^n =$ "jedničková matice"

Náhodné vektory – řešení příkladů

18. ► $E(10 X_3) = 20$

► $D(10 X_3) = 1600$

► $E(2 X_1 - 5 X_3 - X_2) = 0$

► $D(2 X_1 - 5 X_3 - X_2) = 399$

► $C(10 X_3, 2 X_1 - 5 X_3 - X_2) = -390$

► $\rho(10 X_3, 2 X_1 - 5 X_3 - X_2) \approx -0,488$

► $C(X_1 + X_2, X_3 - X_2) = 25$

► $\rho(X_1 + X_2, X_3 - X_2) \approx 0,905$

22. $E(Y) = \begin{pmatrix} 9 \\ 21 \\ 100 \end{pmatrix}, \quad \text{cov}(Y) = \begin{pmatrix} 7 & 8 & 50 \\ 8 & 13 & 70 \\ 50 & 70 & 400 \end{pmatrix}$

23. $E(\dots) = 4600 + 20 = 4620, \quad \text{cov}(Y) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{pmatrix}$

24. $E(\dots) = 1200 + 14 = 1214, \quad \text{cov}(Y) = \begin{pmatrix} 13 & 9 & 4 \\ 9 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 5 \end{pmatrix}$

25. $E(Y) = \begin{pmatrix} 10 \\ 20 \\ 30 \\ 40 \end{pmatrix}, \quad E(\dots) = 3800 + 38 = 3838, \quad \text{cov}(Y) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ 3 & 6 & 9 & 12 \\ 4 & 8 & 12 & 16 \end{pmatrix}$

26. Střední hodnota povrchu uvedeného hranolu je rovna $1000 + 3,2 = 1003,2$.

Regresní analýza

Regresní analýza :

- ▶ řeší problém odhadu parametrů v **regresním modelu**
- ▶ pevně dané (zvolené, nenáhodné) hodnoty vstupní veličiny, tzv. **regresory**
- ▶ odpověď je závislá na regresorech prostřednictvím známé funkce
- ▶ měřená odpověď je zatížena náhodnými chybami

Regresní model :

- ▶ regresory jsou nenáhodné veličiny, obvykle uspořádané do matice regresorů X
- ▶ odpovědi Y tvoří náhodný vektor, obvykle dokonce náhodný výběr
- ▶ je dán funkční vztah $Y = f(X) + \epsilon$
- ▶ ϵ je vektor náhodných chyb
- ▶ tvar funkce f je dán, regresní analýza odhaduje parametry funkce

Lineární regresní model

Lineární regresní model (LRM) (*linear regression model*) (Y, X, β) :

- ▶ vyjadřuje závislost tvaru

$$Y = X\beta + \epsilon, \text{ podrobněji}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}}_Y = \underbrace{\begin{pmatrix} x_{1,1} & \dots & x_{1,k} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n,1} & \dots & x_{n,k} \end{pmatrix}}_X \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}}_\beta + \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}}_\epsilon$$

- ▶ Y je náhodný vektor n pozorování
- ▶ regresory tvoří pevně danou (nenáhodnou) **matici plánu (design matrix)** X
- ▶ β je vektor k neznámých parametrů
- ▶ závislost je **lineární** vzhledem k parametrům β ;
- ▶ náhodné chyby ϵ_i jsou vzájemně nezávislé a mají rozdělení $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
- ▶ $n > k$, tj. počet pozorování je větší než počet parametrů
- ▶ $h(X) = k$, tj. matice plánu je plně hodnosti

Metoda nejmenších čtverců (MNČ) (1)

Lineární regresní model (Y, X, β) , $Y = X\beta + \epsilon$, se obvykle řeší minimalizací jisté penalizační funkce. Při řešení

metodou nejmenších čtverců (*least square method*) je kvadratický výraz

$$(Y - X\beta)'(Y - X\beta)$$

minimalizován vzhledem k neznámých hodnotám parametrů β . Při splnění podmínek uvedeného lineárního regresního modelu existuje vždy právě jedno řešení této minimalizace, které označíme $\hat{\beta}$.

- ▶ Řešení lineárního regresního modelu metodou nejmenších čtverců, $\hat{\beta}$, lze vyjádřit jako řešení systému **normálních rovnic**:

$$X'X\beta = X'Y .$$

MNČ-odhad parametrů je potom:

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

Metoda nejmenších čtverců (MNČ) (2)

- ▶ Hodnoty sledované proměnné approximované (predikované) zvoleným regresním modelem s parametry $\hat{\beta}$ určenými metodou nejmenších čtverců jsou

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

- ▶ $r = Y - \hat{Y}$ jsou **rezidua (residuals)**, tj. odchylky skutečně pozorované hodnoty Y sledované veličiny od hodnoty \hat{Y} predikované regresním modelem
- ▶ Vhodnost modelu je kvantifikována **reziduálním součtem čtverců**

$$S_e = r'r = (Y - X\hat{\beta})'(Y - X\hat{\beta})$$

- ▶ Vhodnost modelu lze také posuzovat podle odhadu rozptylu náhodných chyb

$$s^2 = \frac{S_e}{n - k}$$

LRM – příklady (1)

31. V LRM (Y, X, β) , $X = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix}$, $Y = \begin{pmatrix} 7 \\ 4 \\ 2 \\ 2 \\ 5 \\ 8 \end{pmatrix}$ spočítejte MNČ-odhady

vektoru parametrů $\hat{\beta}$, approximace \hat{Y} , reziduální součty čtverců S_e a s^2 . Jaké regresní funkci matice plánu odpovídá?

32. Ve dvou LRM (Y, X_1, β) a (Y, X_2, β) ,

$$X_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 4 \\ 9 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix},$$

na stejných datech spočítejte MNČ-odhady vektoru parametrů $\hat{\beta}$, approximace \hat{Y} , reziduální součty čtverců S_e a s^2 . Který model z obou modelů je vhodnější? Jakým regresním funkcím matice plánu odpovídají?

LRM – příklady (2)

V následujících příkladech spočítejte MNČ-odhady vektoru parametrů $\hat{\beta}$, approximace \hat{Y} , reziduální součty čtverců S_e a s^2 pro různé regresní funkce. Rozhodněte, která z funkcí je pro daná data nevhodnější. Odhadnuté regresní funkce zobrazujte také graficky. Můžete též vyzoušet jeden bod z dat vynechat a sledovat, jak se parametry funkce změní.

- ▶ $y = \beta_0 + \beta_1 x$
- ▶ $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$
- ▶ $y = \beta_0 + \beta_1 |x|$
- ▶ $y = \beta_1 x$
- ▶ $y = \beta_1 x + \beta_2 x^2$
- ▶ $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 e^x$

33. Pro data

x	-2	-1	0	1	2
Y	-2	1	-2	1	-1

34. Pro data

x	-3	-1	0	1	3
Y	2	1	1	1	3

35. Pro data

x	-3	-2	-1	0	1	3
Y	-5	-3	-4	0	1	3

LRM – příklady (3)

36. Pro data

x	-2	-1	0	1	2
Y	-16	-6	0	4	-12

.

37. Pro data

x	-2	-1	0	1	2
Y	0	2	3	3	1

.

38. Pro data

x	-2	-1	0	1	2
Y	2	0	0	1	2

.

39. Pro data

x	-3	-1	0	1	2
Y	2	0	-2	-1	1

.

40. Pomocí regresní přímky procházející počátkem spočítejte MNČ-odhady vektoru parametrů $\hat{\beta}$, approximace \hat{Y} , reziduální součty čtverců S_e a s^2 v LRM (Y, X, β) pro data

x	10	20	30	40	50	60
Y	0.18	0.35	0.48	0.65	0.84	0.97

Jedná se o měření koeficientu teplotní délkové roztažnosti měděné trubky. Teplotní rozdíl od 20°C je x , prodloužení tyče je měřená veličina Y .

LRM – příklady (4)

- 41.** Pomocí (obecné) regresní přímky spočítejte MNČ-odhad vektoru parametrů $\hat{\beta}$, approximace \hat{Y} , reziduální součty čtverců S_e a s^2 v LRM (Y, X, β) pro data

x	40	64	34	15	57	45
Y	33	46	23	12	56	40

Jedná se o měření závislosti množství kyseliny mléčné ve 100 ml krve u matky-provorodičky, x , a jejího novorozence, Y . Obě veličiny jsou uváděny jako hmotnost v mg.

- 42.** Pomocí (obecné) regresní paraboly spočítejte MNČ-odhad vektoru parametrů $\hat{\beta}$, approximace \hat{Y} , reziduální součty čtverců S_e a s^2 v LRM (Y, X, β) pro data

x	40	50	60	70	80	90	100
Y	6.1	5.8	6.0	6.5	6.8	8.1	10.0

Jedná se o měření závislosti spotřeby paliva, Y v l/100 km motorového vozidla na rychlosti, x v km/h, při zařazeném stejném rychlostním stupni.

LRM v R prakticky – 1m

- ▶ Uložíme data do proměnných:

`x <- c (1, 2, 3, 4); Y <- c (-1, 0, 2, 3)`

- ▶ Výpočet MNČ-odhadů (nejen) parametrů v R: funkce `lm` (*linear model*)

- ▶ `formule` je tvaru *odpověď* ~ *matice plánu* (regresní funkce), např.:

- ▶ `Y ~ 1 + x` obecná přímka (1 + není třeba psát)
- ▶ `Y ~ 0 + x + I(x^2)` parabola procházející počátkem (0 +)
- ▶ `Y ~ I(abs(x))` $|x|$ (1 + si R doplní automaticky)
- ▶ `Y ~ I(exp(x))` e^x (1 + si R doplní automaticky)

- ▶ `model <- lm (formule)`

- ▶ `summary (model)` přehled výsledků modelu

- ▶ `coef (model)`, `model$coefficients` $\Rightarrow \hat{\beta}$

- ▶ `fitted (model)`, `model$fitted.values` $\Rightarrow \hat{Y}$

- ▶ `residuals (model)`, `model$residuals` $\Rightarrow r$

- ▶ `model$model` $\Rightarrow X$ (bez sloupce jedniček)

- ▶ Jak spočítáme S_e a s^2 ?

LRM v R prakticky – obrázky

► Připravíme si prázdný graf, necháme více místa kolem zadaných dat:

```
plot (c(0,4), c(-2,4), type="n", xlab="osa x", ylab="osa y",  
main="nazev")
```

► Vykreslíme data (x, Y) jako body (pch=číslo znaku, col=číslo barvy):

```
points (x, Y, pch=1, col=1)
```

► Vykreslíme body predikované modelem (x, \hat{Y}):

```
points (x, model$fitted.values, pch=18, col=2)
```

► Predikce odpovědi modelu v libovolných bodech:

```
predict (model, data.frame (x=c(x-souřadnice bodů)))
```

► Vykreslíme celou křivku odhadnuté regresní funkce (lwd=tloušťka čáry, lty=typ čáry, from, to=x-souřadnice intervalu, add=TRUE je důležité pro přidání křivky):

```
curve (predict (model, data.frame(x=x)), from=0, to=4, col=2,  
add=TRUE)
```

► Opakováním předchozích kroků můžeme přikreslovat křivky dalších regresních funkcí, které máme spočítané.

► Kopie obrázku do PDF: `dev.copy2pdf (file="soubor.pdf")`

Rozdělení pravděpodobnosti v LRM

- ▶ máme bodové odhady $\hat{\beta}$, chceme intervalové odhady a testování hypotéz
- ▶ teorie klasického LRM předpokládá $\epsilon \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 I)$
- ▶ Potom máme: $Y \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$ (I = jednotková matice řádu n)
- ▶ MNČ-odhad $\hat{\beta}$ vektoru parametrů je nestranný, $\hat{\beta} \sim N(\beta, \sigma^2(X'X)^{-1})$
- ▶ s^2 je nestranným odhadem rozptylu náhodných chyb, $E(s^2) = \sigma^2$
- ▶ $\frac{s_e}{\sigma^2} \sim \chi^2(n - k)$
- ▶ náhodné veličiny $\hat{\beta}$ a s^2 jsou stochasticky nezávislé
- ▶ $T = \frac{c'\hat{\beta} - c'\beta^0}{s \sqrt{c'(X'X)^{-1}c}} \sim t(n - k)$ ($c \in \mathbb{R}^k$)
- ▶ $F = \frac{(\hat{\beta}^* - \beta^{*0})' W^{-1} (\hat{\beta}^* - \beta^{*0})}{s^2 m} \sim F(m, n - k)$
- β^* je subvektor o m složkách
- W je tomuto subvektoru odpovídající blok $m \times m$ matice $(X'X)^{-1}$.
- horní index 0 značí zvolený číselný vektor, např. při testování významnosti dosazujeme $\beta^0 = (0, \dots, 0_k)',$ resp. $\beta^{*0} = (0, \dots, 0_m)'$

Testy významnosti v LRM

Test významnosti koeficientu β_i , tj. test $H_0: \beta_i = 0$ proti $H_1: \beta_i \neq 0$:

- ▶ v T volíme $c = e_i$ (i -tý jednotkový vektor), $\boldsymbol{\beta}^0 = \mathbf{0}$
- ▶ $T_i = \frac{\hat{\beta}_i - 0}{s \sqrt{v_{i,i}}} \sim t(n - k)$, $v_{i,i} = \{(X'X)^{-1}\}_{i,i}$

Test významnosti modelu, $H_0: (\beta_1, \dots, \beta_{k-1}) = \mathbf{0}$ proti $H_1: \exists i > 0: \beta_i \neq 0$:

- ▶ v F volíme $\boldsymbol{\beta}^* = (\beta_1, \dots, \beta_0)$, $m = k - 1$, $\boldsymbol{\beta}^{*0} = (0, \dots, 0_{k-1})$
- ▶ $F = \frac{n - k}{k - 1} \frac{S_T}{S_e} \sim F(k - 1, n - k)$
- ▶ rezidální součet čtverců: $S_e = \sum_{j=1}^n (Y_j - \hat{Y}_j)^2$
- ▶ celkový součet čtverců: $S_T = \sum_{j=1}^n (Y_j - \bar{Y})^2$
- ▶ R squared: $R^2 = 1 - \frac{S_e}{S_T}$
- ▶ R -bar squared, adjusted R squared: $\bar{R}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-k}$
- ▶ formálně: R^2 = koeficient mnohonásobné korelace mezi \mathbf{Y} a $\hat{\mathbf{Y}}$

LRM v R prakticky – testy významnosti

- ▶ `summary (model)` ⇒ textový přehled
- ▶ `prehled <- summary (model)` ⇒ spočítá další parametry a testy v modelu
- ▶ `M <- coef (prehled), M <- prehled$coefficients` ⇒ matice:
 - ▶ `M[,1]` ⇒ $\hat{\beta}$, MNČ-odhady parametrů modelu
 - ▶ `M[,2]` ⇒ standardní chyby MNČ-odhadů parametrů modelu
 - ▶ `M[,3]` ⇒ T_i , t-statistiky významnosti koeficientů modelu
 - ▶ `M[,4]` ⇒ p-hodnoty testů $H_0: \beta_i = 0$ proti $H_1: \beta_i \neq 0$
- ▶ `prehled$r.squared` ⇒ R^2
- ▶ `prehled$adj.r.squared` ⇒ \bar{R}^2
- ▶ `prehled$fstatistic` ⇒ vektor $(F, k - 1, n - k)$, F-statistika modelu
- ▶ `prehled$sigma` ⇒ s
- ▶ `prehled$df` ⇒ vektor $(k, n - k, k)$
- ▶ `model$df.residuals` ⇒ $n - k$

Obecné testy parametrů v LRM

Test lineární kombinace koeficientů $H_0: \mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}^0$ proti $H_1: \mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}} \neq \mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}^0$:

- ▶ $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$ volíme podle požadované lineární kombinace
- ▶ $\boldsymbol{\beta}^0$ volíme tak, aby $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}^0 \in \mathbb{R}$ byla testovaná hodnota
- ▶ $T = \frac{\mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}^0}{s \sqrt{\mathbf{c}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}}} \sim t(n - k)$
- ▶ Příklad (parabola) • $\beta_0 + \beta_1 = 1?$ ⇒ volíme $\mathbf{c} = (1, 1, 0)', \mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}^0 = 1$
- ▶ Příklad (přímka) • $2\beta_0 - 3\beta_1 = 10?$ ⇒ volíme $\mathbf{c} = (2, 3)', \mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}^0 = 10$

Vektorový test koeficientů $H_0: \hat{\boldsymbol{\beta}}^* = \boldsymbol{\beta}^{*0}$ proti $H_1: \hat{\boldsymbol{\beta}}^* \neq \boldsymbol{\beta}^{*0}$:

- ▶ testujeme subvektor $\boldsymbol{\beta}^*$ o m složkách ($m \leq k$)
- ▶ $F = \frac{\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - \boldsymbol{\beta}^{*0}\right)' W^{-1} \left(\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - \boldsymbol{\beta}^{*0}\right)}{s^2 m} \sim F(m, n - k)$
- ▶ W je testovanému subvektoru odpovídající blok $m \times m$ matice $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$
- ▶ Příklad • $(\beta_0, \beta_2)' = (0, 0)'?$
- ▶ Příklad • $(\beta_0, \beta_1)' = (0, 1)'?$

LRM – testy – příklady

V příkladech **33.–42.** dále spočítejte:

- ▶ testujte významnost koeficientů β_i ($i = 0, \dots, k - 1$) pomocí statistik T_i
- ▶ testujte významnost modelu pomocí statistiky F
- ▶ porovnejte vhodnost regresních funkcí pomocí F , s^2 , R^2 a \bar{R}^2

Poznámka: alternativně ke klasickému rozhodování o výsledku statistického testu na hladině významnosti α (porovnávání hodnoty testovací statistiky s příslušným kvantilem) lze o výsledku testu rozhodnout pomocí **p-hodnoty (p-value)** P :

- ▶ $P \leq \alpha \Rightarrow$ zamítáme H_0 ve prospěch H_1
- ▶ $P > \alpha \Rightarrow$ nezamítáme H_0

Korelační koeficient

Korelační koeficient (Pearsonův) ρ_{XY} :

- ▶ $\rho_{XY} = \frac{C(X, Y)}{\sqrt{D(X)}\sqrt{D(Y)}}$
- ▶ $\rho_{XY} \in [-1; 1]$
- ▶ je měrou lineární závislosti náhodných veličin X, Y (s kladnými rozptyly)
- ▶ Kovariance: $C(X, Y) = E[X - E(X)][Y - E(Y)]$

Pro normálně rozdělené náhodné veličiny lze interpretovat pomocí LRM s regresní funkcí $\hat{Y} = \beta_0 + \beta_1 X$:

- ▶ $\rho_{XY} = 1 \Rightarrow$ pozitivní lineární závislost, $\beta_1 > 0$ je významný
- ▶ $\rho_{XY} = -1 \Rightarrow$ negativní lineární závislost, $\beta_1 < 0$ je významný
- ▶ $\rho_{XY} = 0 \Rightarrow$ lineární nezávislost, β_1 není významný

Obecně platí implikace: X, Y stochasticky nezávislé $\Rightarrow \rho_{XY} = 0$ (nezávislost \Rightarrow nekorelovanost)

Pro normálně rozdělení náhodně veličiny platí ekvivalence (nezávislost = nekorelovanost)

Výběrový korelační koeficient

Výběrový korelační koeficient r_{XY} :

- ▶ je empirickou analogií korelačního koeficientu ρ_{XY}
- ▶ pro náhodný výběr $((X_1, Y_1)', \dots, (X_n, Y_n)')$

$$r_{XY} = \frac{S_{XY}}{S_X S_Y}$$

$$\text{Výběrový rozptyl: } S_X^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n X_i^2 - n\bar{X}^2 \right)$$

Výběrová kovariance:

$$S_{XY} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y}) = \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y} \right)$$

Testy pro normálně rozdělené náhodné veličiny:

▶ Test nezávislosti $H_0: \rho_{XY} = 0$ proti $H_1: \rho_{XY} \neq 0$:

$$T = \frac{r_{XY}}{\sqrt{1 - r_{XY}^2}} \sqrt{n-2} \sim t(n-2)$$

▶ Test $H_0: \rho_{XY} = \rho_0$ proti $H_1: \rho_{XY} \neq \rho_0$ (tzv. Z-transformace):

$$U = \underbrace{\frac{1}{2} \ln \frac{1+r_{XY}}{1-r_{XY}}}_{Z} - \frac{1}{2} \ln \frac{1+\rho_0}{1-\rho_0} - \frac{\rho_0}{2(n-1)} \sqrt{n-3} \sim N(0, 1)$$

Výběrový koeficient mnohonásobné korelace

Výběrový koeficient mnohonásobné korelace $r_{Y \cdot X}$:

- ▶ $r_{Y \cdot X}^2 = R_{YX} R_{XX}^{-1} R_{XY}$
- ▶ je empirickou analogií koeficientu mnohonásobné korelace $\rho_{Y \cdot X}$
- ▶ $r_{Y \cdot X} \approx \rho_{Y \cdot X} = \rho(Y, \hat{Y})$
- ▶ $\rho_{Y \cdot X} \in [0; 1]$
- ▶ Koeficient determinace: $R^2 = r_{Y \cdot X}^2$
- ▶ pro náhodný výběr $((Y_1, X_1)', \dots, (Y_n, X_n)')$ z $(k+1)$ -rozměrného rozdělení
- ▶ Test pro normálně rozdělené náhodné veličiny $H_0: \rho_{Y \cdot X} = 0$ proti $H_1: \rho_{Y \cdot X} \neq 0$, tj. že Y nezávisí na komplexu náhodných veličin X :

$$F = \frac{n - k - 1}{k} \frac{r_{Y \cdot X}^2}{1 - r_{Y \cdot X}^2} \sim F(k, n - k - 1)$$

Výběrový koeficient parciální korelace

Výběrový koeficient parciální korelace $r_{Y,Z \cdot X}$:

- ▶
$$r_{Y,Z \cdot X} = \frac{r_{YZ} - R_{YX}R_{XX}^{-1}R_{XZ}}{\sqrt{(1 - R_{YX}R_{XX}^{-1}R_{XY})(1 - R_{ZX}R_{XX}^{-1}R_{XZ})}}$$
- ▶ je empirickou analogií parciálního korelačního koeficientu $\rho_{Y,Z \cdot X}$
- ▶ $r_{Y,Z \cdot X} \approx \rho_{Y,Z \cdot X} = \rho(Y - \hat{Y}, Z - \hat{Z})$
- ▶ $\rho_{Y,Z \cdot X} \in [-1; 1]$
- ▶ pro náhodný výběr $((Y_1, X_1, Z_1)', \dots, (Y_n, X_n, Z_n)')$ z $(k+2)$ -rozměrného rozdělení
- ▶ Test pro normálně rozdělené náhodné veličiny $H_0: \rho_{Y,Z \cdot X} = 0$ proti $H_1: \rho_{Y,Z \cdot X} \neq 0$, tj. že Y, Z jsou nezávislé náhodné veličiny po odečtení (lineárního) vlivu komplexu náhodných veličin X :

$$T = \frac{r_{Y,Z \cdot X}}{\sqrt{1 - r_{Y,Z \cdot X}^2}} \sim t(n - k - 2)$$

Výběrové korelační koeficienty v R

- ▶ předpokládáme, že v proměnných X , Y , Z máme realizace náhodného výběru
- ▶ `cor (X, Y)` ⇒ výběrový korelační koeficient r_{XY}
- ▶ Výběrový koeficient mnohonásobné korelace $r_{Z \cdot (X, Y)}$
 - ▶ `mZ <- lm (1 + X + Y)` ⇒ LRM na proměnných X , Y
 - ▶ `Zh <- mZ$fitted.values` ⇒ $\hat{Z} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X + \hat{\beta}_2 Y$
 - ▶ `cor (Z, Zh)` ⇒ $r_{Z \cdot (X, Y)} = R(Z, \hat{Z})$
- ▶ Výběrový koeficient parciální korelace $r_{Y, Z \cdot X}$
 - ▶ `mY <- lm (1 + X)` ⇒ LRM na proměnné X
 - ▶ `mZ <- lm (1 + X)` ⇒ LRM na proměnné X
 - ▶ `Yr <- mY$residuals` ⇒ rezidua $Y - \hat{Y} = Y - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X$
 - ▶ `Zr <- mZ$residuals` ⇒ rezidua $Z - \hat{Z} = Z - \hat{\alpha}_0 - \hat{\alpha}_1 X$
 - ▶ `cor (Yr, Zr)` ⇒ $r_{Y, Z \cdot X} = R(Y - \hat{Y}, Z - \hat{Z})$