МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФГБОУ ВО «Уральский государственный экономический университет»

В.П. Часовских

Формализация информации и Big Data

02.03.03 - Математическое обеспечение и администрирование информационных систем
профиль разработка и администрирование информационных систем

Лабораторная работа № 16 основные понятия

Линейная регрессия. Ранговая корреляция. Множественная регрессия.

Екатеринбург 2024

Линейная регрессия

Линейная регрессия является самым простым подходом для статистического обучения и анализа. Понимание этой простой модели создаст хорошую базу, прежде чем перейти к более сложным подходам.

Одним из основных направлений практического использования регрессионной модели является прогнозирование будущего развития исследуемого объекта.

Линейная регрессия позволяет ответить на следующие вопросы:

- Есть ли связь между 2 переменными?
- Насколько прочны отношения?
- Какая переменная вносит наибольший вклад?
- Насколько точно мы можем оценить влияние каждой переменной?
- Насколько точно мы можем предсказать цель?
- Являются ли отношения линейными?
- Есть ли эффект взаимодействия?

Предположим, у нас есть только одна переменная x и одна цель – y. Тогда линейная регрессия выражается как:

$$\boldsymbol{y = a_0 + a_1 x_1}$$

Уравнение для линейной модели с 1 переменной и 1 целью.

В приведенном выше уравнении a_0 и a_1 являются коэффициентами. Эти коэффициенты - то, что нам нужно, чтобы делать прогнозы с нашей моделью.

Итак, как мы можем найти эти параметры?

Чтобы найти параметры, нам нужно минимизировать **сумму квадратов ошибок**. Конечно, линейная модель не идеальна, и она не будет точно предсказывать все данные, а это означает, что существует разница между фактическим значением и прогнозом. Ошибка легко вычисляется с помощью:

$$\boldsymbol{e_i = y_i - \hat{y}_i}$$

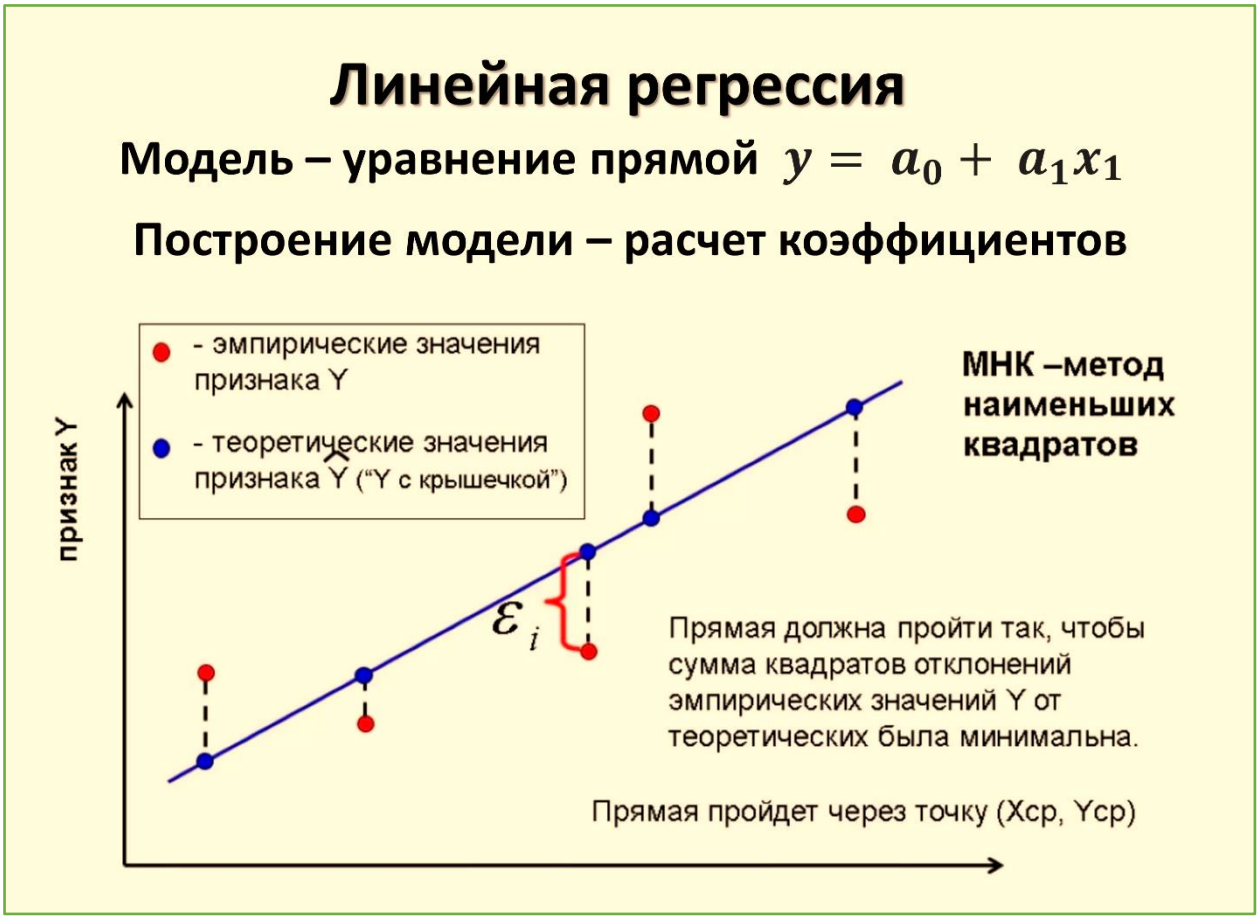
т.е. из истинного значения y_i вычитается прогноз $\hat{y}_i$
Но почему ошибки возводятся в квадрат?

Принято ошибку возводить в квадрат, потому что прогноз может быть выше или ниже истинного значения, что приводит к отрицательной или положительной

разнице соответственно. Если бы мы не возводили в квадрат ошибки, сумма ошибок могла бы уменьшиться из-за отрицательных различий, а не потому, что модель хорошо подходит.

Кроме того, возведение в квадрат ошибок учитывает большие различия, поэтому минимизация квадратов ошибок «гарантирует» лучшую модель.

Рассмотрим график линейной регрессии чтобы лучше понять.



На приведенном выше графике красные точки — это истинные данные, а синяя линия - линейная модель. Прерывистые черные линии иллюстрируют ошибки между предсказанными и истинными значениями. Таким образом, синяя линия - это та, которая минимизирует сумму квадратов длины прерывистых черных линий.
Математический вывод коэффициентов определяет следующие выражения:

$$a_i = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \hat{x})(y_i - \hat{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \hat{x})^2}$$

$$a_0 = \hat{y} - a_1\hat{x}$$

Где $\hat{x}$ и $\hat{y}$ представляют собой среднее.

Как определить, что коэффициенты актуальны для нашего прогнозирования? Для этого необходимо оценить корреляцию.

Коэффициент детерминации

Предположим, что есть ряд наблюдений y_i, рассчитали среднее значение $\bar{y}$. Реальные значения отклоняются от этой средней, можно измерить отклонение суммированием всех возведенных в квадрат погрешностей:
Вся SSE (сумма всех возведенных в квадрат погрешностей, или **СКП) =** $\sum(\boldsymbol{y_i} - \bar{\boldsymbol{y}})^{\boldsymbol{2}}$
Полученное выражение суммы квадратических погрешностей (СКП), можно разделить на различные компоненты

Модель регрессии объясняет *некоторые* отклонения реальных наблюдений от средней:

Объяснимая часть СКП = $\sum(\hat{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{i}} - \bar{\boldsymbol{y}})^{\boldsymbol{2}}$

Но есть еще то, что модель регрессии не объясняет всех отклонений, и кое-какие *остатки* так и останутся необъясненными:

Необъяснимая часть СКП = $\sum(\boldsymbol{y_i} - \bar{\boldsymbol{y}})^{\boldsymbol{2}}$**.**

Найдем, что:

Вся СКП = Объяснимые СКП + Необъяснимые СКП.

Чем больше отклонение, объяснимое регрессией, тем точнее прямая наилучшего соответствия. Отсюда показатель наилучшего соответствия прямой данным — это отношение суммарных **СКП,**

которое *объясняется* моделью регрессии. Это и есть **коэффициент детерминации:**

$$\textbf{коэффициент детерминации} = \frac{\text{Объяснимые СКП}}{\text{Вся СКП}}$$

Этот показатель принимает значения от 0 до 1. Если он близок к 1, тогда большая часть отклонений объяснена регрессией, необъяснимое отклонение невелико, и прямая идеально подходит к данным. Если значение около 0, то, наоборот, большая часть отклонений необъяснима, и прямая, хотя и лучший из вариантов, но тем не менее она все равно «низкого качества».

Математическое выражение для **коэффициента детерминации** следующее:

$$\textbf{коэффициента детерминации} = \left[\frac{n\sum xy - \sum x \sum y}{\sqrt{[n\sum x^2 - (\sum x)^2] * [n\sum y^2 - (\sum y)^2]}}\right]^2$$

Коэффициент детерминации обозначается r^2 или R^2, и лучше всего доверить расчет компьютеру.

Обычно любое значение коэффициента детерминации свыше 0,5 считается хорошим. При более низком коэффициенте, скажем близком к 0,2 , большая часть отклонения необъяснима с помощью регрессии, и зависимость несильная. Однако не следует забывать о единичных крайних, далеко отстоящих данных наблюдений. Даже случайное значение такого рода может сказаться на регрессии и снизить коэффициент детерминации, так что всегда есть искушение допустить, что они — ошибки, и проигнорировать их. Этого делать ни в коем случае нельзя! Такую точку можно отбросить, только если есть настоящая причина - ошибка или потому, что точка абсолютно не сопоставима с другими данными. Решение произвольно отбросить некоторые наблюдения, потому что они портят рисунок, приводят к потере самом цели анализа — оценить, есть ли некая линия и степень зависимости.

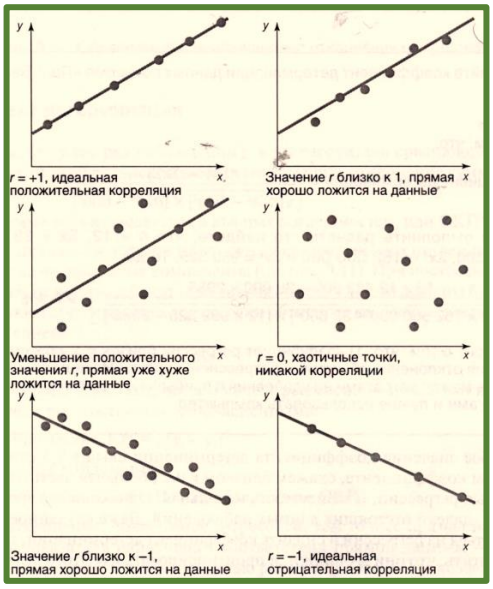
Коэффициент корреляции

Вторым показателем регрессии выступает **коэффициент корреляции,** который отвечает на основной вопрос: связаны ли x и y линейно? Коэффициенты корреляции и детерминации, очевидно, отвечают на очень схожие вопросы, и типичный результат показывает, что:

$$\text{Коэффициент корреляции} = \sqrt{\text{Коэффициент детерминации}}$$

Теперь понятно, почему мы обозначили коэффициент детерминации как r^2 - чтобы можно было обозначить коэффициент корреляции как r. Его называют еще коэффициентом Пирсона, и он принимает значения между +1 и - 1.

Значение r = 1 показывает, что две переменные идеально связаны линейной зависимостью при полном отсутствии помех: когда одна растет, то же самое происходит и с другой. Интерпретация коэффициента корреляции показана на следующем рисунке:



При коэффициенте корреляции, близком к +1 или -1, между двумя переменными будет сильная зависимость. Однако, когда r падает до 0,7 или -0,7, коэффициент детерминации равен 0,49, т. е. становится очень низким. Можно заключить, что при значениях *r* от 0,7 до -0,7 зависимость достаточно слабая.

Пример – 15 наблюдений

Рассчитать коэффициенты детерминации и корреляции данных в таблице. Какой можно сделать из них вывод? Какова наилучшая прямая?

x	4	17	3	21	10	8	4	9	13	12	2	6	15	8	19
y	13	47	24	41	29	33	28	38	46	32	14	22	26	21	50

Y = 15,376 + 1,545x
$r^2 = 0{,}6348$
R=0,7967

Ранговая корреляция

Коэффициент Пирсона — наиболее широко используемый показатель корреляции, но он работает только с количественными данными (числовыми значениями). Иногда нам необходимо замерить силу зависимости между порядковыми данными (данные ранжированы в определенном порядке, но их значения неизвестны). Представьте рыночное исследование, в котором людей просят указать порядок предпочтений по предложенным им альтернативам. Например, исследование может содержать предложение расставить всех интернет-провайдеров в порядке качества их услуг. Также можно предложить проранжировать цены за их услуги. Поэтому полезный анализ мог бы установить, есть ли связь между двумя списками, т. е между качеством и ценой. Это можно сделать, используя **коэффициент ранговой корреляции Спирмена,** обозначаемый как r_s.

Коэффициент Спирмена = $r_s = 1 - \frac{6\sum D^2}{n(n^2-1)}$

где *n* — число парных наблюдений;

D — разница в порядковых номерах (рангах);

D — Место(значение ранга) в первом списке – Место(значение ранга) во втором списке.

Пример – 5 услуг.

Услуга	*V*	И/	*X*	*Y*	*Z*
Ранжирование по качеству	2	5	13	3	4
Ранжирование по цене	1	3	2	4	5

Решение

По формуле Спирмена:

D = Место в списке качества - Место в списке цен.

В этом случае 5 мест, значит, n = 5 и сумма D^2 такова:
$(2 - 1)^2 + (5 - 3)^2 + (1 - 2)^2 + (3 - 4)^2 + (4 - 5)^2 = 1 + 4 + 1 + 1 + 1 = 8.$

Коэффициент Спирмена: $r_s = 1 - \frac{6\sum D^2}{n(n^2-1)} = 1 - \frac{6*8}{5*(25-1)} = 0{,}6$

Хотя он выглядит совершенно отличным от коэффициента Пирсона, тем не менее коэффициент Спирмена использует тот же принцип и интерпретируется совершенно аналогично. То есть значение 0,6 говорит о том, что между ценой и качеством есть некоторая зависимость, но она не очень сильная.

Стоит помнить, что порядковые данные гораздо менее точны, чем количественные. То есть место 1 может быть чуть лучше места 2 по качеству, но может быть и намного лучше. Отсюда и результаты регрессии более условны. Для повышения точности следует использовать метод парных сравнений, позволяющий указать небольшие отличия в сравнение. Составляется матрица всевозможных парных сравнений. Поясним на предыдущем примере. Исследуются 5 услуг - V, W,X,Y,Z. Составляем матрицу

	V	W	*X*	*Y*	Z
V	1	2/10	2/3	1/2	3/4
W		1	3/5	3/7	1/2
X			1	5/6	4/2
Y				1	4/5
Z					1

Значимость (важность) каждой пары указывается в виде отношения двух, целых чисел из заранее выбранного диапазона. В нашем примере 1…10. Заполняется только над диагональная часть. Под диагональная содержит обратные отношения. Получили так называемую матрицу предпочтений. Ранги (вместо порядковых номеров) вычисляются по следующим формулам:

$$r_{ij} = \frac{2P_{ij}}{P_{ij} + 1}$$

$$r_{ji} = \frac{2}{P_{ij} + 1}$$

Согласованность (компетентные участники) участников определяется коэффициентом конкордации W, изменяется от 0 до 1. Интерпретация как у коэффициента детерминации.

$$W = \frac{12\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{r=1}^{m} r_{ik} - \frac{m(n+1)}{2}\right)^2}{m^2 n(n^2-1)}$$

n – количество сравниваемых целей (объектов);
м – количество сравниваемых показателей;
к – количество участников оценки.

Если W имеет низкое значение, можно определить коэффициенты парной корреляции

для каждой пары участников опроса по Спирмену и найти не компетентных участников.

Коэффициент по Спирмену = 1 - $\frac{6\sum_{i=1}^{n}(r_{i1}-r_{i2})^2}{n(n^2-1)}$ для первого и второго участника (эксперта).

Множественная регрессия

Есть ряд продолжений метода линейной регрессии, самое популярное из которых привязывает к зависимой переменной несколько независимых. Поясним: допустим, у вас есть объем продаж, который можно «привязать» к бюджету рекламы, цене, уровню безработицы, среднему доходу граждан, к продажам у конкурентов и т. д. Иными словами, зависимая переменная *y* задается не одним параметром, независимой переменной *x,* а целым рядом независимых переменных x_i Запишем эту зависимость в таком виде:

$y = a + b_1x_1 + b_{21}x_2 + b_3x_3 + \ldots\ldots..$

Поясним на словах:

Продажи = a + b_1 ∗ Бюджет рекламы + b_2 ∗ Цена + b_3 ∗ Ставка безработицы + b_4 ∗ Доход + b_5 ∗ Продажи у конкурентов.

Добавляя новые независимые переменные, мы стремимся получить более точную модель. Тогда мы сможем установить, что реклама объясняет 60% отклонений в продажах, но с новым членом, ценой уже 75% отклонений будет объяснено, а при добавлении сюда еще и уровня безработицы мы получим еще больший показатель — 85% и т. д.

Поскольку мы ищем линейную зависимость между зависимой переменной и множеством независимых, мы на самом деле должны обозначить этот тип связи как множественную линейную регрессию, которую сокращенно называют **«множественная регрессия».**

Множественная регрессия — это тоже линия, которая наилучшим образом ложится на множество зависимых переменных.
Она определяет наилучшие значения для a и b_i в уравнении

$$\boldsymbol{y = a + b_1x_1 + b_{21}x_2 + b_3x_3 + \ldots\ldots..}$$

Множественную регрессию никогда не считают вручную, а пользуются специальными функциями в компьютерных программах.