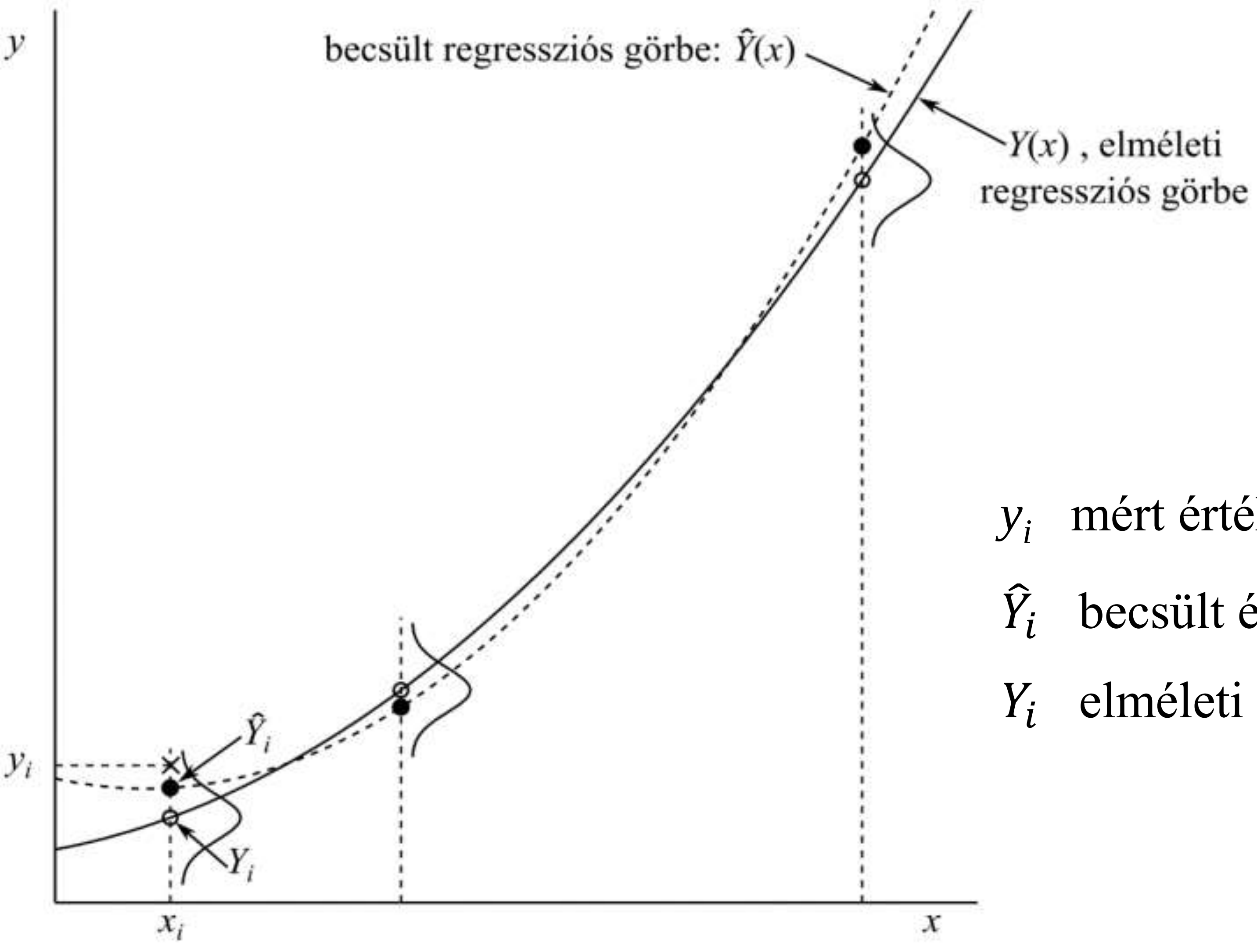
REGRESSZIÓANALÍZIS

Lineáris regresszió

Jelölések



y_i mért érték

$\hat{Y}_i$ becsült érték

Y_i elméleti érték

A regresszióanalízis feladatai

- a függvénykapcsolat ($Y(x)$ elméleti regressziós függvény) paramétereinek becslése,
- a függvény alkalmasságának vizsgálata,
- a paraméterekre vonatkozó hipotézisek vizsgálata (pl. átmegy-e az elméleti regressziós egyenes az origón, ill. meredeksége szignifikánsan különbözik-e zérustól),
- konfidencia-intervallum ill. konfidencia-sáv számítása a függvény paramétereire és az $Y(x)$ tapasztalati vagy empirikus regressziós görbére (a becsült függvényre).

Modell

Valamely (pl. fizikai) törvényszerűség értelmében az x független változó bizonyos értékénél a függő változó értéke $Y = \varphi(x)$.

A mérési pontatlanságok vagy a függvénykapcsolatban nem szereplő, de a jelenséget befolyásoló tényezők miatt Y helyett y értéket mérünk, melyre ha az ingadozások véletlenszerűek és kis hatásúak:

$E(y \mid x) = Y,$ vagy

$y = Y + \varepsilon$ és $E(\varepsilon) = 0$ $Var(\varepsilon) = \sigma^2$

A regresszióanalízis feltételei

- $Y(x) = f(x;\alpha,\beta,\gamma,...)$ az ismert vagy feltételezett függvénykapcsolat alakja, ahol α, β, γ a függvény konstansai (paraméterei)
- y az x minden értékénél normális eloszlású, vagyis az ε_i mérési hibák $N(0,\sigma^2)$ normális eloszlásúak
- Var(y) = konstans, illetve y-nak vagy x-nek ismert függvénye;
- a különböző i mérési pontokban elkövetett mérési hibák egymástól függetlenek
- x (független változó) hibamentes

Egyváltozós lineáris regresszió
ismétlés nélküli mérések esetén, $\sigma_{y_i}^2$ konstans

A függvénykapcsolat (*Y*(*x*) elméleti regressziós függvény) alakja

Elméleti függvény: $Y_i = \alpha + \beta\left(x_i - \bar{x}\right)$ $\alpha' = \alpha - \beta\bar{x}$

Becsült függvény: $\hat{Y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta}\left(x_i - \bar{x}\right)$ $\hat{\alpha}' = \hat{\alpha} - \hat{\beta}\bar{x}$

$\hat{Y}_i = a + b\left(x_i - \bar{x}\right)$ $a' = a - b\bar{x}$

Egyenes meredeksége: β

Egyenes tengelymetszete: α’

A függvénykapcsolat (*Y*(*x*) elméleti regressziós függvény) paramétereinek becslése

A becslési kritérium a legkisebb négyzetek módszere elv alapján:

$$\phi = \sum_i \left(y_i - \hat{Y}_i \right)^2 = \min.$$

$$\phi = \sum \left[y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}\left(x_i - \bar{x} \right) \right]^2 = \min.$$

A normálegyenletek:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\hat{\alpha}} = -2\sum\left[y_i-\hat{\alpha}-\hat{\beta}\left(x_i-\bar{x}\right)\right]=0$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\hat{\beta}} = -2\sum\left[y_i-\hat{\alpha}-\hat{\beta}\left(x_i-\bar{x}\right)\right]\left(x_i-\bar{x}\right)=0$$

Átrendezve:

$$\sum y_i = n\hat{\alpha}+\hat{\beta}\sum\left(x_i-\bar{x}\right) \longrightarrow \hat{\alpha}\equiv a=\frac{\sum y_i}{n}=\bar{y}$$

$$\sum y_i\left(x_i-\bar{x}\right)=\hat{\alpha}\sum\left(x_i-\bar{x}\right)+\hat{\beta}\sum\left(x_i-\bar{x}\right)^2 \longrightarrow \hat{\beta}\equiv b=\frac{\sum y_i\left(x_i-\bar{x}\right)}{\sum\left(x_i-\bar{x}\right)^2}$$

Az $\hat{\alpha}$ és $\hat{\beta}$ becslések egymástól függetlenek!

$$\boxed{\hat{\alpha}'\equiv a'=\hat{\alpha}-\hat{\beta}\bar{x}}$$

1. példa

Kísérletileg vizsgálták a koncentráció (*x*, független változó) és az abszorbancia (*y*, függő változó) közötti összefüggést.
x értéke pontosan beállítható,
y értéke az *Y* valódi érték körül ingadozik.

sorrend	x	y
9	0,102	4,141
1	0,200	6,715
5	0,311	9,202
2	0,398	11,526
7	0,508	14,775
4	0,603	17,642
8	0,715	20,554
3	0,804	23,363
6	0,920	26,000

1. példára: az egyenes paramétereinek becslése

sorrend	**x**	**y**	**xi-xátlag**	**(xi-xátlag)^2**	**yi(xi-xátlag)**
9	0,102	4,141	-0,405	0,164	-1,676
1	0,200	6,715	-0,307	0,094	-2,060
5	0,311	9,202	-0,196	0,038	-1,802
2	0,398	11,526	-0,109	0,012	-1,254
7	0,508	14,775	0,001	0,000	0,018
4	0,603	17,642	0,096	0,009	1,698
8	0,715	20,554	0,208	0,043	4,280
3	0,804	23,363	0,297	0,088	6,944
6	0,920	26,000	0,413	0,171	10,744
szumma	4,561	133,918		0,620	16,892
átlag	0,5068	14,880			

$$\hat{\alpha} \equiv a = \frac{\sum y_i}{n} = \bar{y}$$

$$a = \frac{133{,}918}{9} = 14{,}880$$

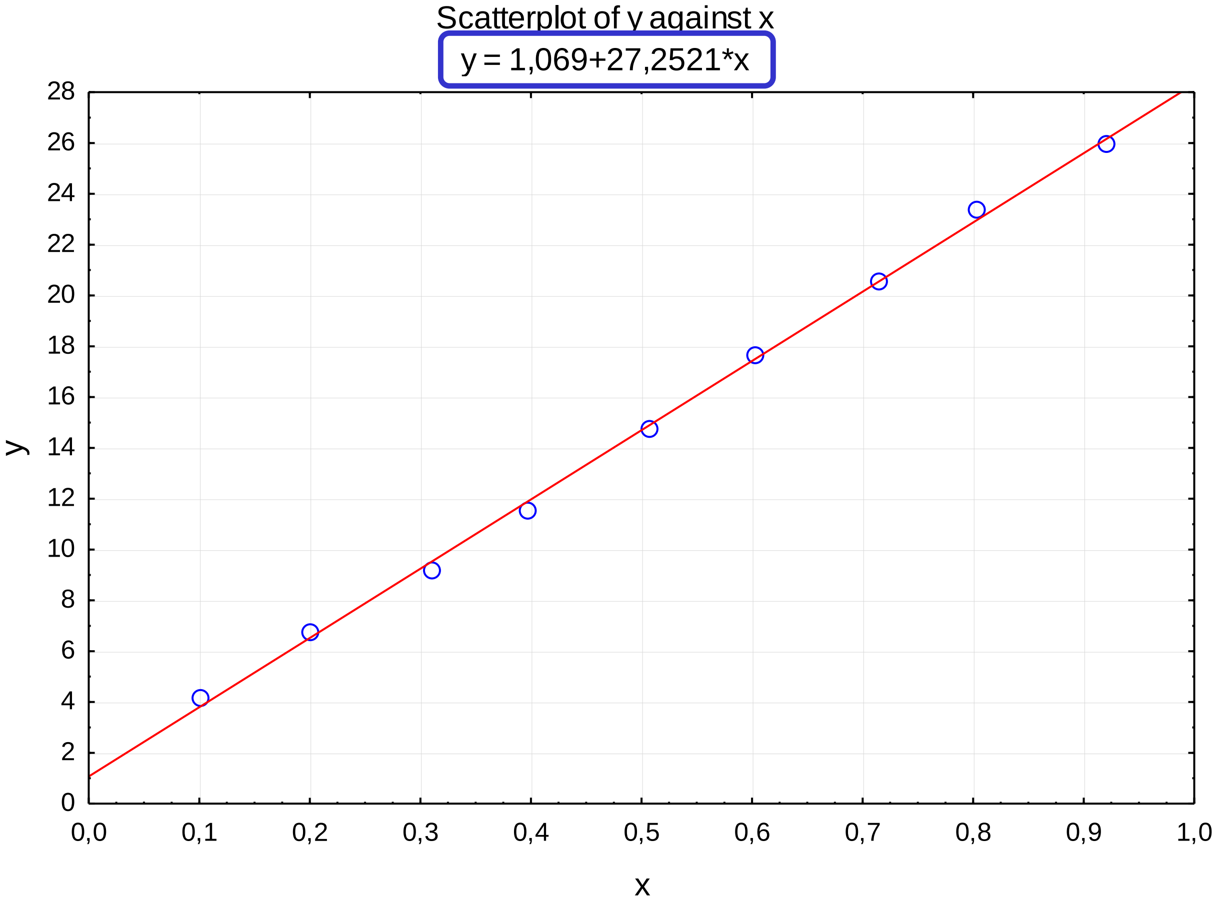
$$\hat{\beta} \equiv b = \frac{\sum y_i\left(x_i - \bar{x}\right)}{\sum \left(x_i - \bar{x}\right)^2}$$

$$b = \frac{16{,}892}{0{,}620} = 27{,}252$$

$$\hat{\alpha}' \equiv a' = a - b\bar{x}$$

$$a' = 14{,}880 -$$
$$-27{,}252 * 0{,}5068 = 1{,}069$$

Graphs > Scatterplots



$$\boxed{\begin{aligned} Y_i &= \alpha + \beta(x_i - \bar{x}) \\ \hat{Y}_i &= \hat{\alpha} + \hat{\beta}(x_i - \bar{x}) \end{aligned}}$$

A becslések tulajdonságai

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\alpha} &= \frac{\sum y_i}{n} = \bar{y} \\ \hat{\beta} &= \frac{\sum y_i (x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \end{aligned}}$$

$$E(\hat{\alpha}) \equiv E\left(\frac{\sum y_i}{n}\right) = \frac{1}{n}\sum E(y_i) = \frac{1}{n}\sum E(\alpha + \beta(x_i - \bar{x}) + \varepsilon_i) =$$

$$= \frac{1}{n}\sum(\alpha + \beta(x_i - \bar{x}) + E(\varepsilon_i)) = \frac{1}{n}\left(n\alpha + \beta\sum(x_i - \bar{x})\right) = \alpha$$

torzítatlan

$$Var(\hat{\alpha}) = Var\left(\frac{\sum y_i}{n}\right) = \frac{1}{n^2}Var(\sum y_i) = \frac{1}{n^2} * n * \sigma_y^2 = \frac{\sigma_y^2}{n}$$

konzisztens

Hasonlóan levezethető:

$$E\left(\hat{\beta}\right) = \beta$$

torzítatlan

$$Var(\hat{\beta}) = \frac{\sigma_y^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$$

konzisztens

Reziduális szórásnégyzet

hiba = a mért érték és az elméleti érték különbsége

reziduum = a mért érték és a becsült érték különbsége

$$\boxed{\hat{\sigma}_y^2 = s_r^2 = \frac{\sum_i \left(y_i - \hat{Y}_i\right)^2}{n-2}}$$

1. példára:

- reziduális szórásnégyzet számítása

- az egyenes paramétereinek bizonytalanságának számítása

				reziduum	reziduum^2
sorrend	x	y	y_becsült	(y-y_becsült)	(y-y_becsült)^2
9	0,102	4,141	3,849	0,292	0,085
1	0,200	6,715	6,519	0,196	0,038
5	0,311	9,202	9,544	-0,342	0,117
2	0,398	11,526	11,915	-0,389	0,152
7	0,508	14,775	14,913	-0,138	0,019
4	0,603	17,642	17,502	0,140	0,020
8	0,715	20,554	20,554	0,000	0,000
3	0,804	23,363	22,980	0,383	0,147
6	0,920	26,000	26,141	-0,141	0,020
				szumma:	$SS_{error} = 0{,}598$
				SS/(n-2)=	$MS_{error} = 0{,}0854$

$$s_r^2 = \frac{\sum_i \left(y_i - \hat{Y}_i\right)^2}{n-2} = \frac{0{,}598}{9-2} = 0{,}0854$$

$$s_a^2 = \frac{s_r^2}{n} = \frac{0{,}0854}{9} = 0{,}0095$$

$$s_b^2 = \frac{s_r^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} = \frac{0{,}0854}{0{,}620} = 0{,}1377$$

Konfidencia-intervallum
az elméleti regressziós egyenes meredekségére

Általánosan:

$$P\left(\hat{\beta} - t_{\alpha/2} s_{\hat{\beta}} < \beta \leq \hat{\beta} + t_{\alpha/2} s_{\hat{\beta}}\right) = 1 - \alpha$$

1. példa adataival:

$$P\left(27{,}252 - 2{,}365 \cdot 0{,}371 < \beta \leq 27{,}252 + 2{,}365 \cdot 0{,}371\right) = 0{,}95$$

$$P\left(26{,}374 < \beta \leq 28{,}130\right) = 0{,}95$$

Konfidencia-intervallum
az elméleti regressziós egyenes tengelymetszetére 1.

Tengelymetszet: az *x*=0 pontban vett függvényérték

$$\boxed{a' = \widehat{\alpha'} = \hat{Y}(x = 0)}$$

Általánosan:

$$P\left(\hat{\alpha}' - t_{\alpha/2} s_{\hat{\alpha}'} < \alpha' \leq \hat{\alpha}' + t_{\alpha/2} s_{\hat{\alpha}'}\right) = 1 - \alpha$$

Az elméleti regressziós egyenes egy pontjának bizonytalansága

$$E\left(\hat{Y}_x\right) = E\left[\hat{\alpha} + \hat{\beta}\left(x - \bar{x}\right)\right] = \alpha + \beta\left(x - \bar{x}\right) = Y_x$$

$$\boxed{Var\left(\hat{Y}_x\right) = Var\left(\hat{\alpha}\right) + \left(x - \bar{x}\right)^2 Var\left(\hat{\beta}\right) = \sigma_y^2\left[\frac{1}{n} + \frac{\left(x - \bar{x}\right)^2}{\sum_i\left(x_i - \bar{x}\right)^2}\right]}$$

Kísérletből becsülve:

$$s^2_{\hat{Y}_x} = s^2_{\hat{\alpha}} + \left(x - \bar{x}\right)^2 s^2_{\hat{\beta}} = s_r^2\left[\frac{1}{n} + \frac{\left(x - \bar{x}\right)^2}{\sum_i\left(x_i - \bar{x}\right)^2}\right]$$

$$\boxed{a' = \widehat{\alpha'} = \hat{Y}(x=0)}$$

Konfidencia-intervallum
az elméleti regressziós egyenes tengelymetszetére 2.

1. példa adataival:

$$s^2_{\hat{Y}_{x=0}} = s_r^2\left[\frac{1}{n} + \frac{(0-\bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}\right] = 0{,}0854\left[\frac{1}{9} + \frac{(0-0{,}5068)^2}{0{,}620}\right] = 0{,}0449$$

$$P\left(1{,}069 - 2{,}365 \cdot 0{,}212 < \hat{Y}(x=0) \le 1{,}069 + 2{,}365 \cdot 0{,}212\right) = 0{,}95$$

$$P\left(0{,}568 < \hat{Y}(x=0) \le 1{,}570\right) = 0{,}95$$

Hipotézisvizsgálat az elméleti regressziós egyenes meredekségére

Vizsgálja meg 5%-os szignifikanciaszinten, hogy az elméleti egyenes meredeksége 27-e!

$\mathrm{H}_0 : \beta = 27$ $\qquad\qquad$ $\mathrm{H}_0 : \beta \neq 27$

$$t_0 = \frac{\hat{\beta} - E\left[\hat{\beta}\right] \Vert \mathrm{H}_0}{s_{\hat{\beta}}} = \frac{27{,}252 - 27}{0{,}371} = 0{,}679$$

$$t_0 = t_{0,025} = 2{,}365$$

Döntés?

Hipotézisvizsgálat az elméleti regressziós egyenes tengelymetszetére

Vizsgálja meg 5%-os szignifikanciaszinten, hogy az elméleti egyenes tengelymetszete nulla-e!

$\mathrm{H}_0 : \alpha' = 0$ $\mathrm{H}_0 : \alpha' \neq 0$

$$t_0 = \frac{\hat{\alpha}' - E\left[\hat{\alpha}' \middle| \mathrm{H}_0\right]}{s_{\hat{\alpha}'}} = \frac{1{,}069 - 0}{0{,}212} = 5{,}04$$

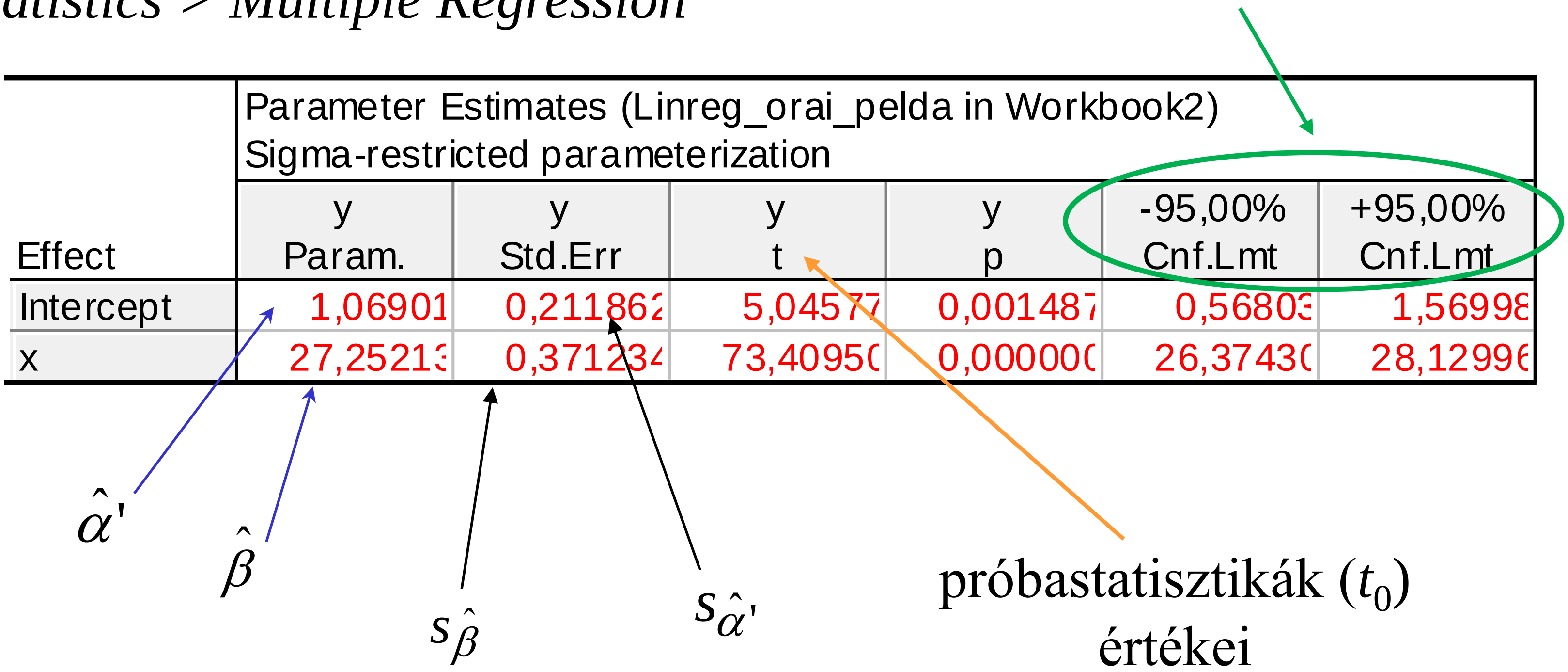
$$t_0 = t_{0{,}025} = 2{,}365$$

Döntés?

A lineáris regresszió eredménytáblázata a STATISTICA programban – 1.

Statistics > Multiple Regression

95%-os konfidencia-intervallumok



Parameter Estimates (Linreg_orai_pelda in Workbook2)
Sigma-restricted parameterization

Effect	y Param.	y Std.Err	y t	y p	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt
Intercept	1,06901	0,21186	5,0457	0,00148	0,5680	1,5699
x	27,2521	0,37123	73,4095	0,00000	26,3743	28,1299

$\hat{\alpha}'$

$\hat{\beta}$

$s_{\hat{\beta}}$

$s_{\hat{\alpha}'}$

próbastatisztikák (t_0) értékei

$$H_0 : \alpha' = 0 \longrightarrow t_0 = \frac{\hat{\alpha}' - 0}{s_{\hat{\alpha}'}}$$

$$H_0 : \beta = 0 \longrightarrow t_0 = \frac{\hat{\beta} - 0}{s_{\hat{\beta}}}$$

Konfidencia-intervallum
az elméleti regressziós egyenes egy pontjának (várható) értékére

Milyen intervallumban található 95%-os valószínűséggel az elméleti függvényérték az *x*=0,3 helyen?

Azaz adjunk 95%-os konfidencia-intervallumot az analitikai jel (*y*) várható értékére az *x*=0,3 helyen!

$$s^2_{\hat{Y}_{x=0,3}} = s_r^2\left[\frac{1}{n}+\frac{\left(0,3-\bar{x}\right)^2}{\sum\limits_i\left(x_i-\bar{x}\right)^2}\right] = 0,0854\left[\frac{1}{9}+\frac{\left(0,3-0,5068\right)^2}{0,620}\right] = 0,0154$$

$$P\left(9,245-2,365\cdot 0,124 < \hat{Y}(x=0,3) \le 9,245+2,365\cdot 0,124\right) = 0,95$$

$$P\left(8,952 < \hat{Y}(x=0,3) \le 9,538\right) = 0,95$$

Konfidencia-sáv

Kiszámítjuk különböző *x* értékeknél az elméleti függvényérték konfidencia-intervallumát, s az így kapott pontokat összekötjük.

Ez az a sáv, amin belül az **elméleti egyenes** 1-α valószínűséggel megtalálható.

$$P\left(\hat{Y} - t_{\alpha/2} s_{\hat{Y}} < Y \le \hat{Y} + t_{\alpha/2} s_{\hat{Y}}\right) = 1 - \alpha$$

$$s_{\hat{Y}} = s_y \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\left(x - \bar{x}\right)^2}{\sum_i \left(x_i - \bar{x}\right)^2}}$$

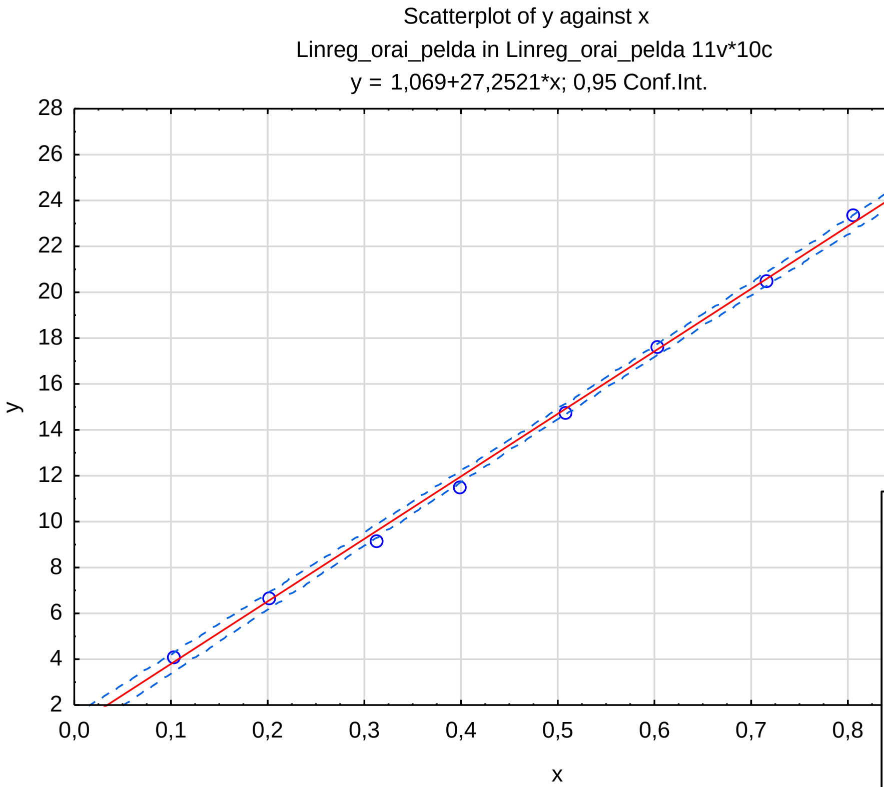
Mitől függ a konfidencia-sáv szélessége?

$$P\left(\hat{Y} - t_{\alpha/2} s_{\hat{Y}} < Y \le \hat{Y} + t_{\alpha/2} s_{\hat{Y}}\right) = 1 - \alpha$$

$$Var\left(\hat{Y}_x\right) = \sigma_y^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\left(x - \bar{x}\right)^2}{\sum_i \left(x_i - \bar{x}\right)^2}\right]$$

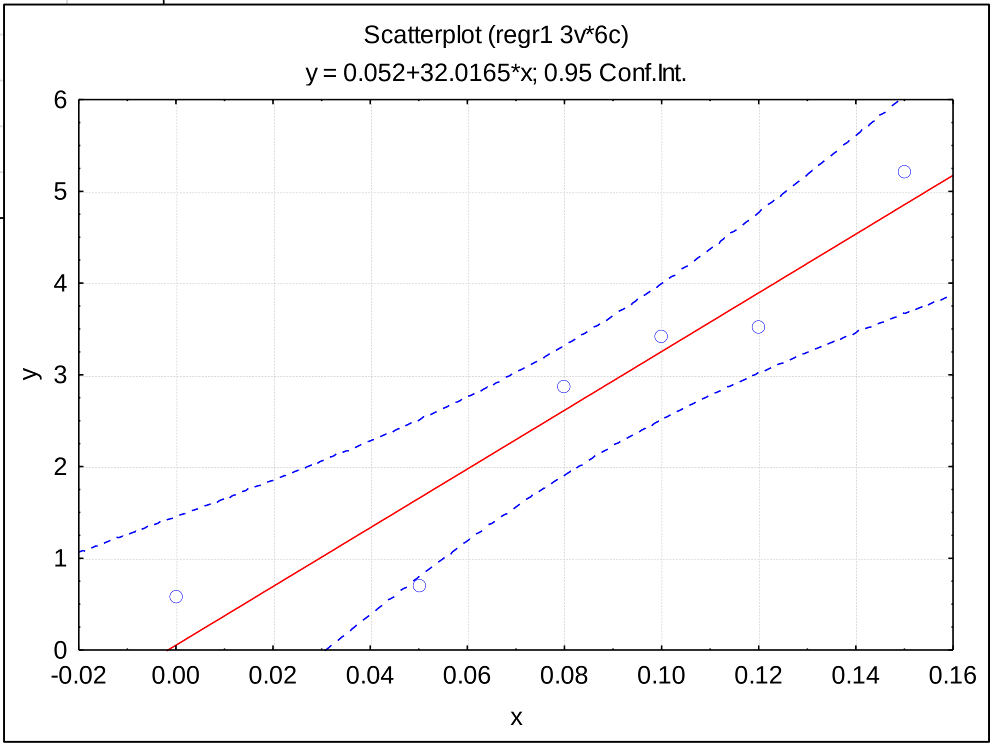
- mérések számától (n)
- mérési hibától (σ_y^2): milyen precízen mérünk
- x_i értékek elhelyezkedése
- milyen x értéknél kérdezzük

Konfidencia-sáv



1. példa adataira

egy másik adatsorra



Jóslási intervallum, jóslási sáv

A jóslási intervallum megmutatja hogy hol helyezkedik el egy újonnan mérendő *y** érték adott valószínűséggel.

$$P\left(\hat{Y} - t_{\alpha/2} s_{y^*-\hat{Y}} < y^* \le \hat{Y} + t_{\alpha/2} s_{y^*-\hat{Y}}\right) = 1-\alpha$$

$$s_{y-\hat{Y}} = s_r \sqrt{\boxed{1+}\frac{1}{n} + \frac{\left(x-\bar{x}\right)^2}{\sum_i \left(x_i-\bar{x}\right)^2}}$$

Számoljuk ki az 1. példára a jóslási sáv szélességét az *x*=0,3 helyen!

$$s^2_{\hat{Y}_{x=0,3}} = s_r^2\left[1+\frac{1}{n}+\frac{\left(0,3-\bar{x}\right)^2}{\sum\limits_i\left(x_i-\bar{x}\right)^2}\right] = 0,0854\left[1+\frac{1}{9}+\frac{\left(0,3-0,5068\right)^2}{0,620}\right] = 0,1$$

$$P\left(9,245-2,365\cdot 0,3175 < y^*_{x=0,3} \le 9,245+2,365\cdot 0,3175\right) = 0,95$$

$$P\left(8,494 < y^*_{x=0,3} \le 9,996\right) = 0,95$$

Gyakorló feladatok az 1. példához

1. Alátámasztják-e a mérési adatok 5%-os szignifikancia-szinten, hogy a 0,3-es koncentrációnál az abszorbancia (várható értéke) legfeljebb 9,5?

2. A kalibrációs egyenes felvétele után a 0,3-es koncentrációnál egy új mérést végeztek, s az abszorbanciára 8,8 adódott. Lehetséges ez? A vizsgálatot 5%-os szignifikanciaszinten végezze!

Determinációs együttható (R^2)

Megadja, hogy az ingadozás hányadrészét magyarázza a választott modell.

modell

illeszkedési hiba (reziduum)

$$R^2=\frac{\sum_i\left(\hat{Y}_i-\bar{y}\right)^2}{\sum_i\left(y_i-\bar{y}\right)^2}=1-\frac{\sum_i\left(y_i-\hat{Y}_i\right)^2}{\sum_i\left(y_i-\bar{y}\right)^2}$$

teljes

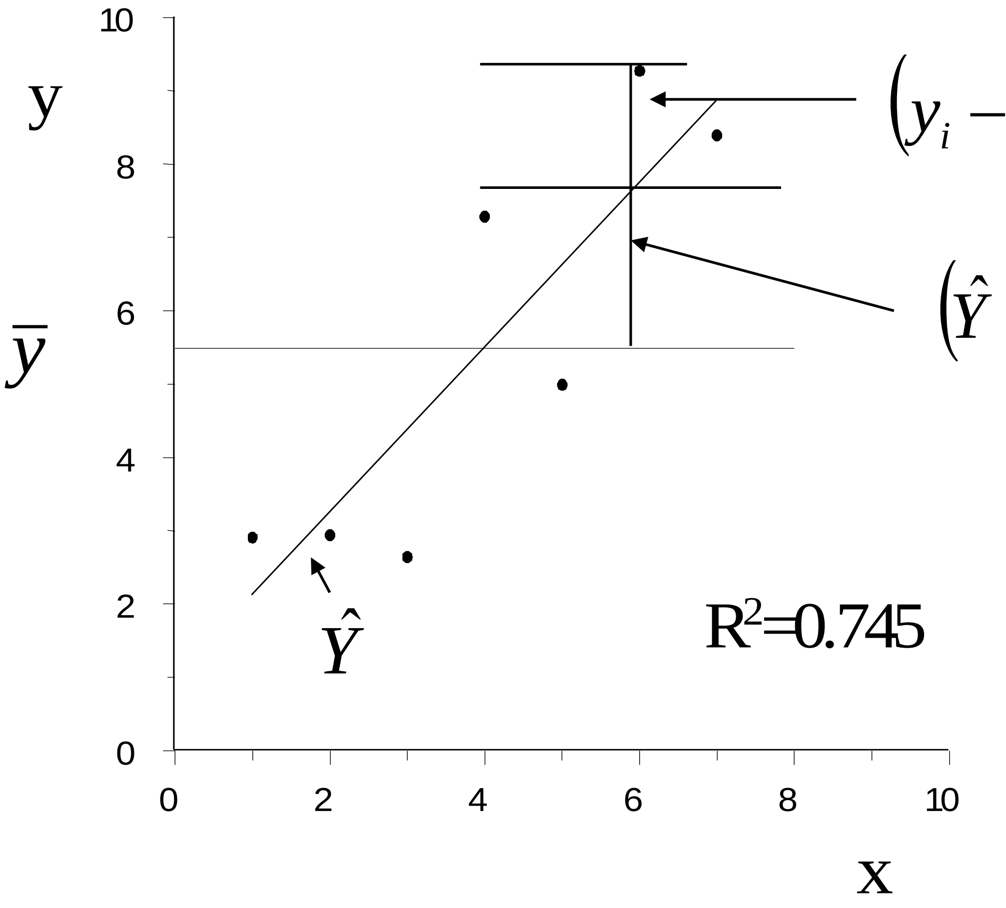
$$R^2_{adj}=1-\frac{\dfrac{\sum_i\left(y_i-\hat{Y}_i\right)^2}{n-p}}{\dfrac{\sum_i\left(y_i-\bar{y}\right)^2}{n-1}}=1-\frac{s_r^2}{s_T^2}$$

Determinációs együttható

$$R^2 = \frac{\overset{\text{“Regression”}}{SSR}}{\underset{\text{“Total”}}{SST}} = \frac{SST - \overset{\text{“Residual”}}{SSE}}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$$

$$R^2\_adj = 1 - \frac{SSE/(n-2)}{SST/(n-1)}$$

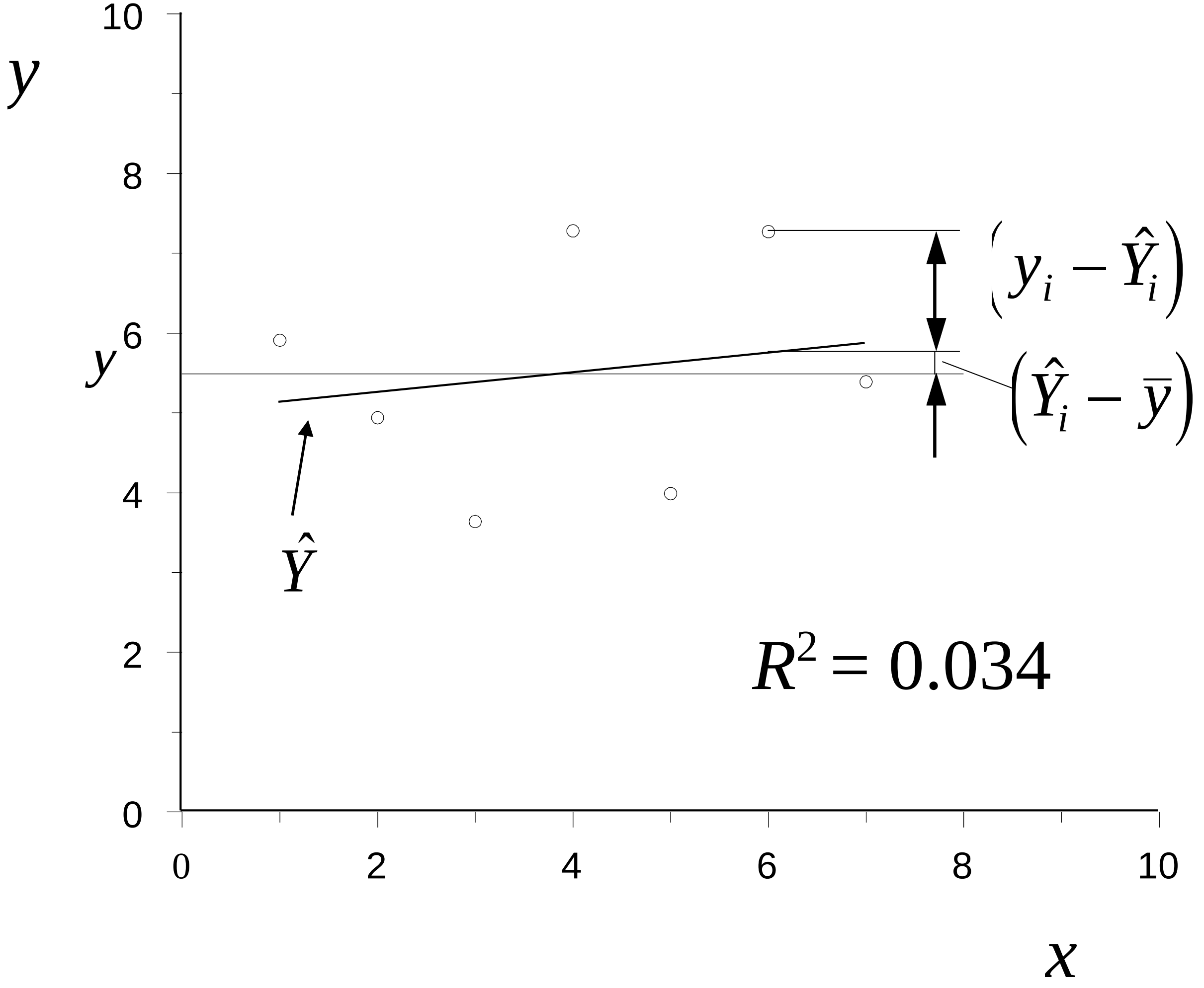
$$\underbrace{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}_{\text{teljes}} = \sum_i \left(y_i - \hat{Y}_i\right)^2 + \sum_i \left(\hat{Y}_i - \bar{y}\right)^2$$



$\left(y_i - \hat{Y}\right)$ a teljes változás nem magyarázott része

$\left(\hat{Y} - \bar{y}\right)$ az egyenes magyarázta rész

$$\underbrace{\sum_i \left(y_i-\bar{y}\right)^2}_{\text{teljes}}=\sum_i\left(y_i-\hat{Y}_i\right)^2+\sum_i\left(\hat{Y}_i-\bar{y}\right)^2$$



$R^2 = 0.034$

a teljes változás nem magyarázott része

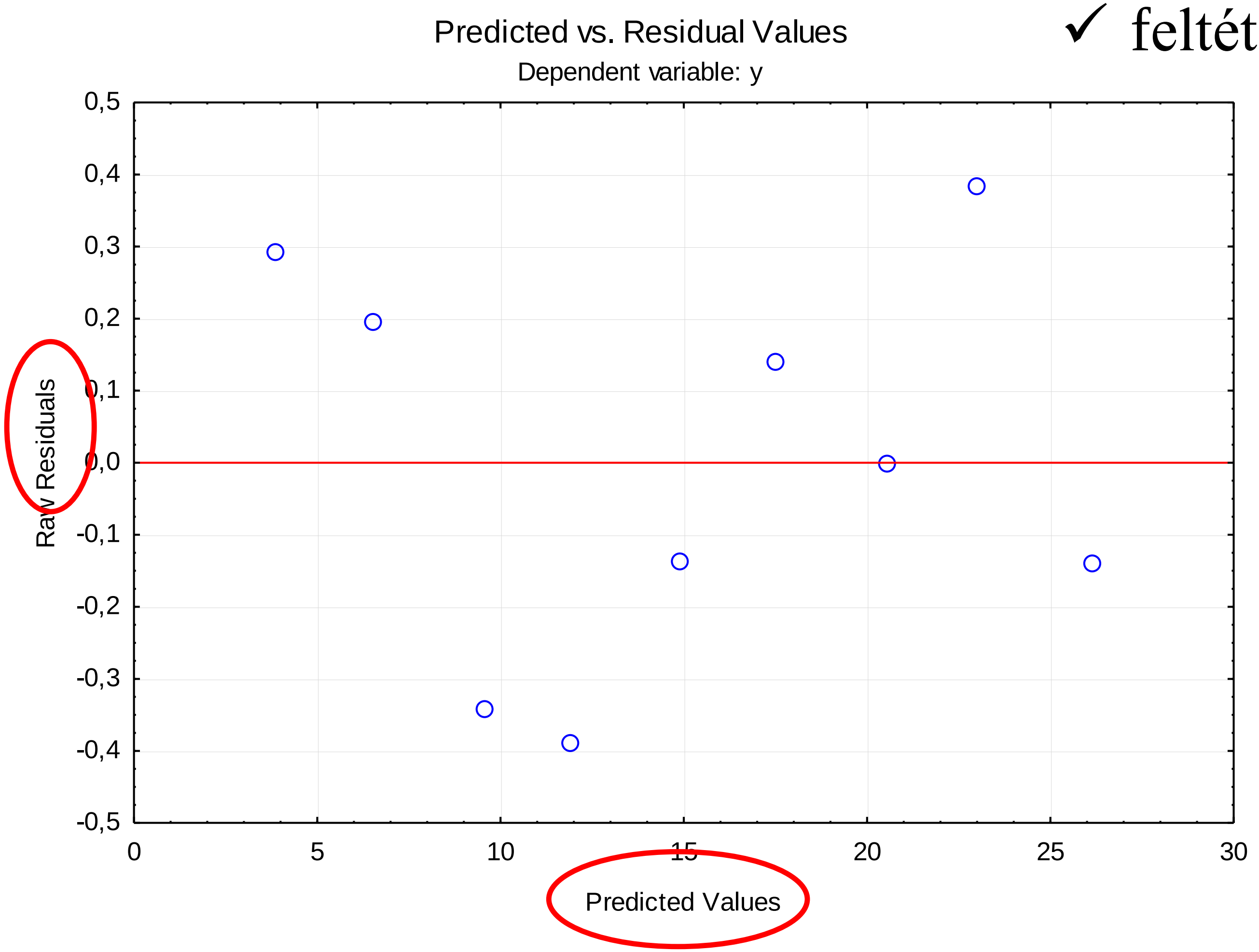
az egyenes magyarázta rész

A regresszió feltételeinek ellenőrzése: a reziduumok vizsgálata, reziduumábrák

1. példa adataival készült ábra

1. Var(*y*) = Var(ε) konstans ellenőrzése

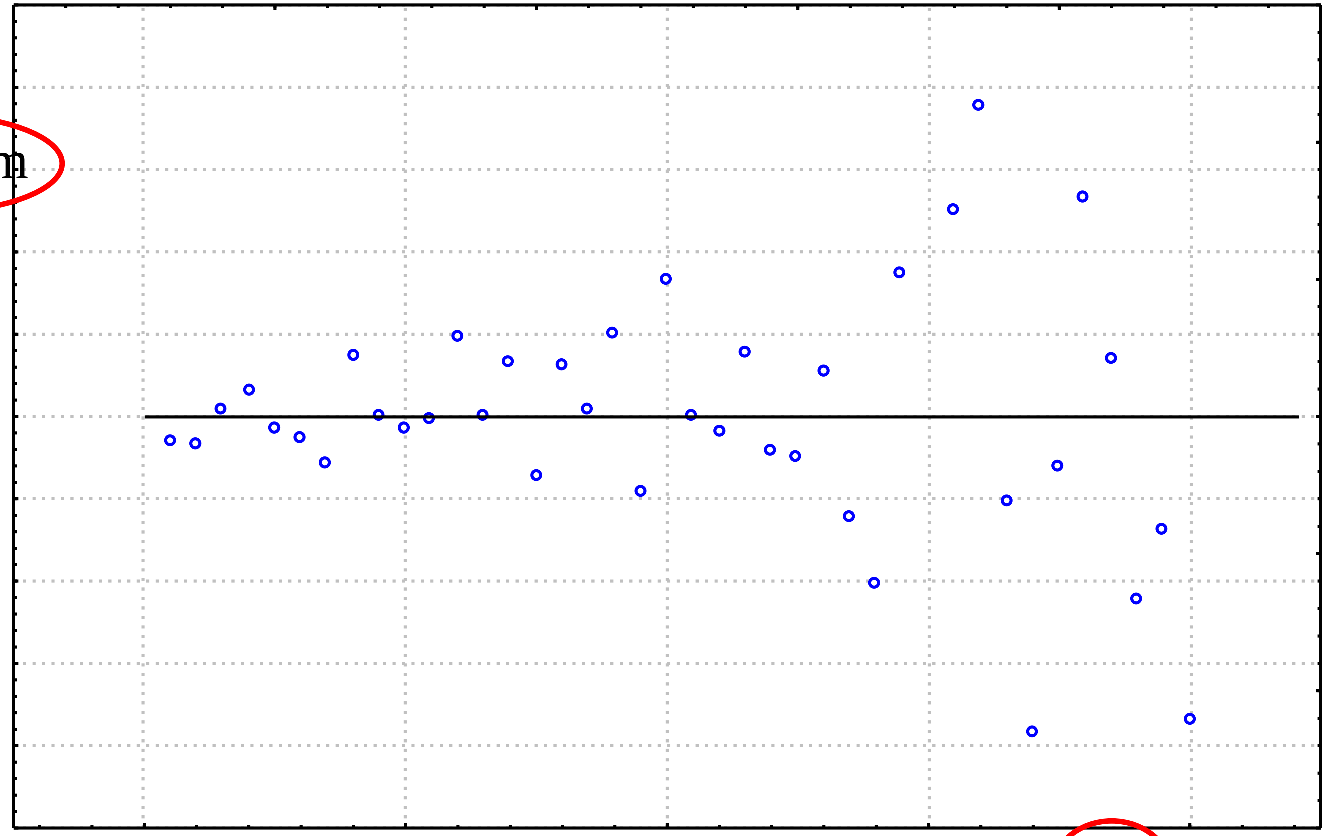
✓ feltétel teljesül



1. Var(*y*) = Var(ε) konstans ellenőrzése

másik adatsorra készült ábra

feltétel NEM teljesül



$y_i - \hat{Y}_i$

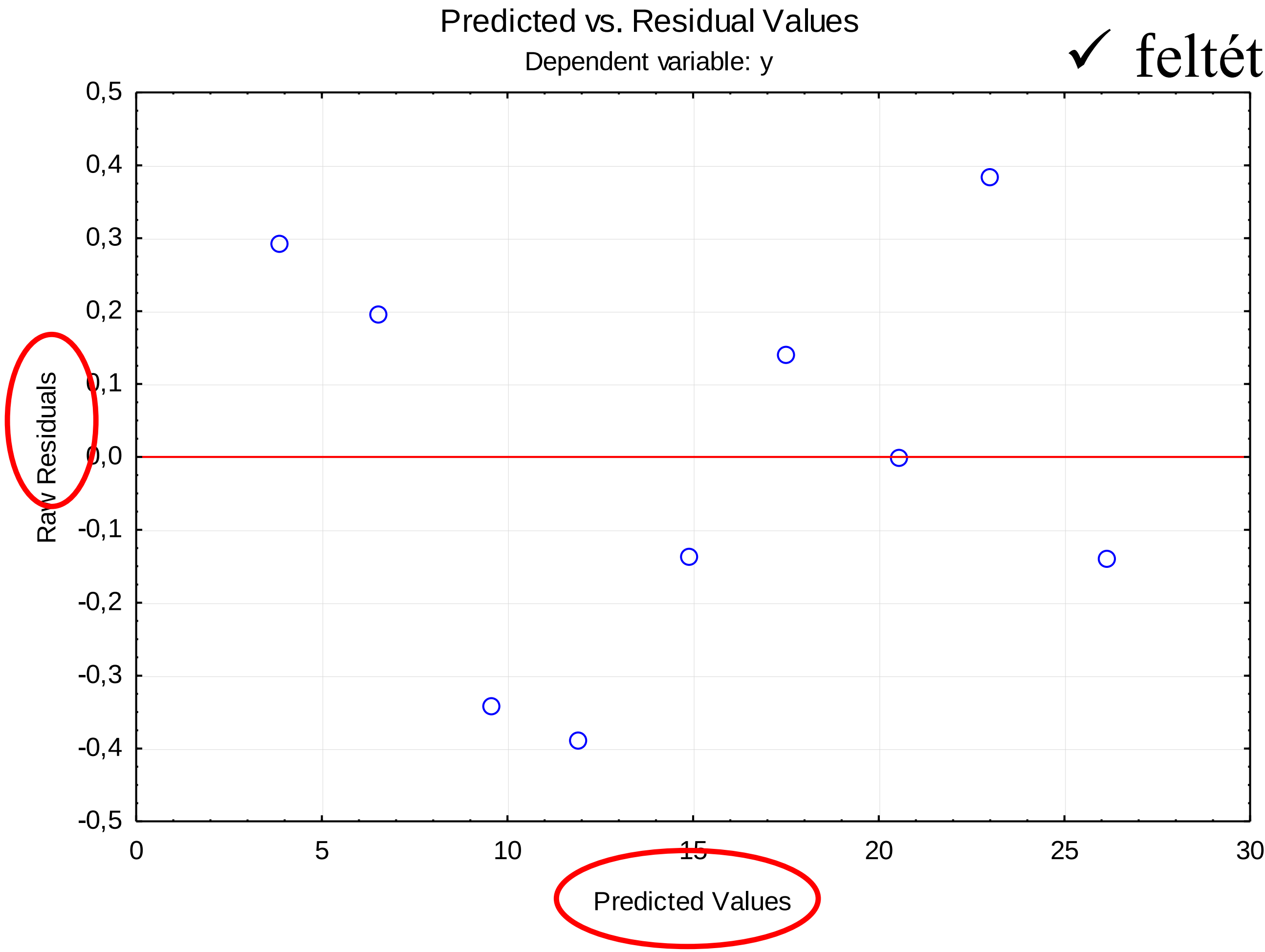
reziduum

becsült függvényérték $\hat{Y}$

1. példa adataival
készült ábra

2. A lineáris függvény adekvát-e

(az illesztett függvény megfelelően írja-e le a változást)



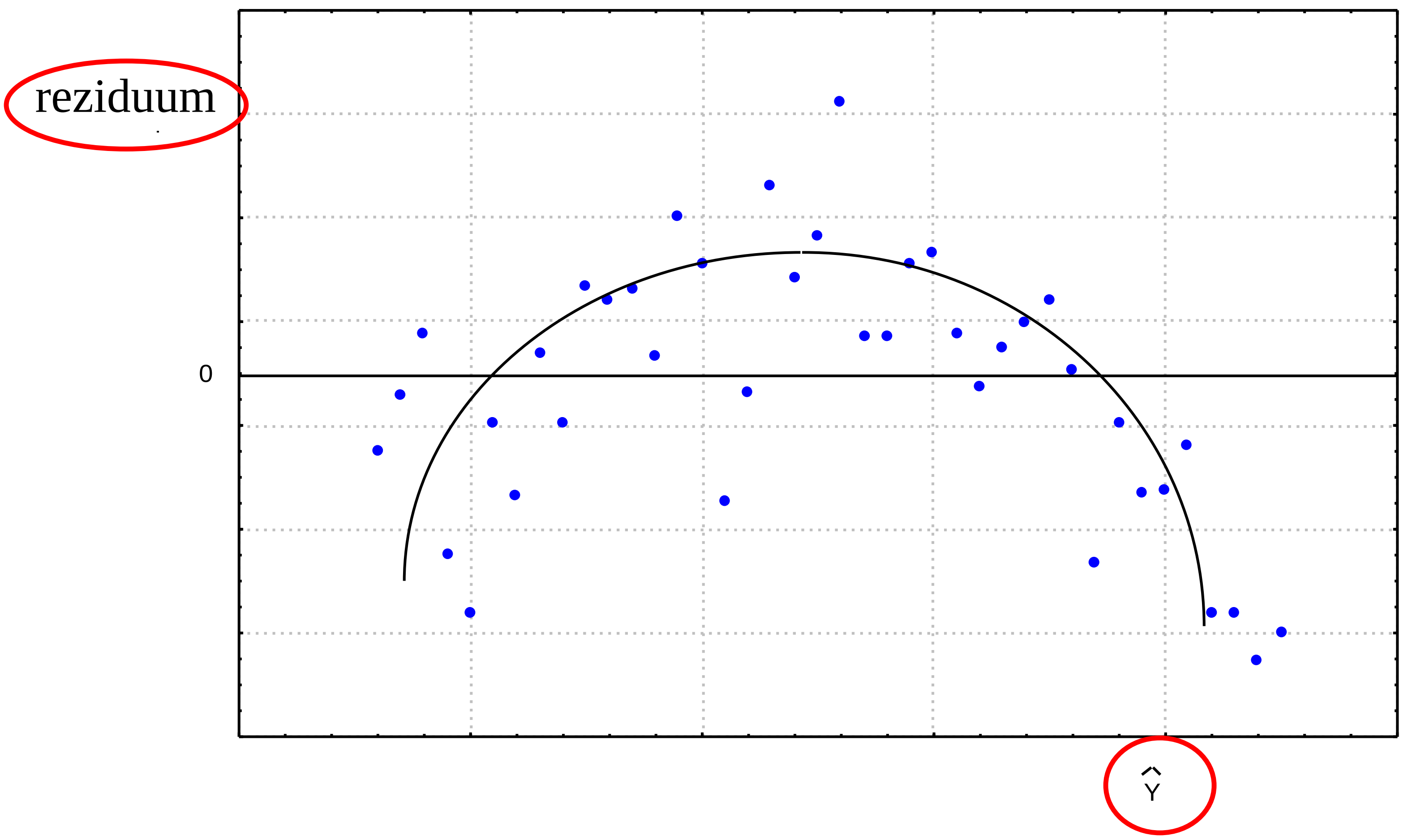
✓ feltétel teljesül

másik adatsorra
készült ábra

2. A lineáris függvény adekvát-e

(az illesztett modell megfelelő-e)

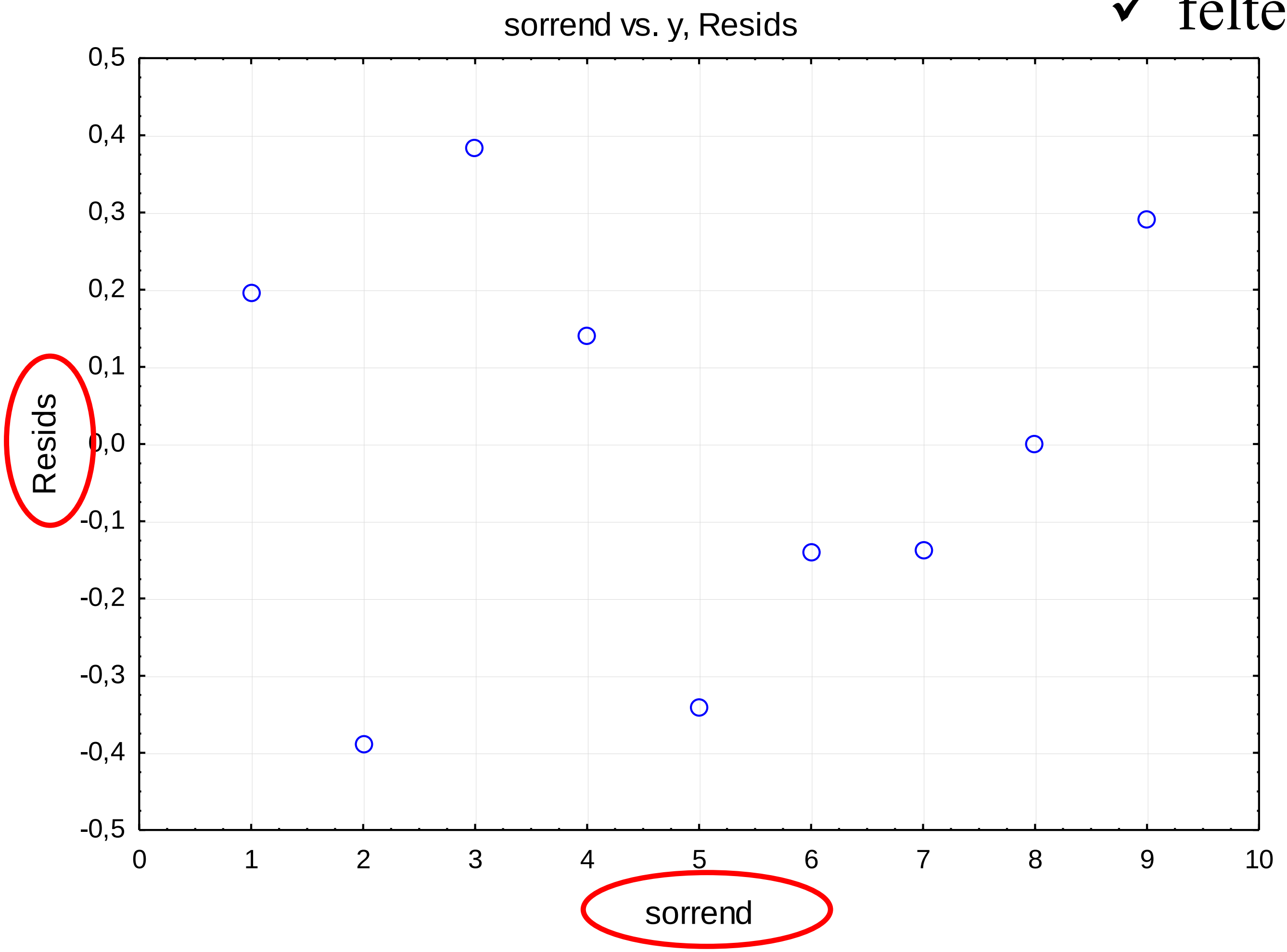
feltétel NEM teljesül



1. példa adataival
készült ábra

3. mérési hibák függetlenek-e egymástól

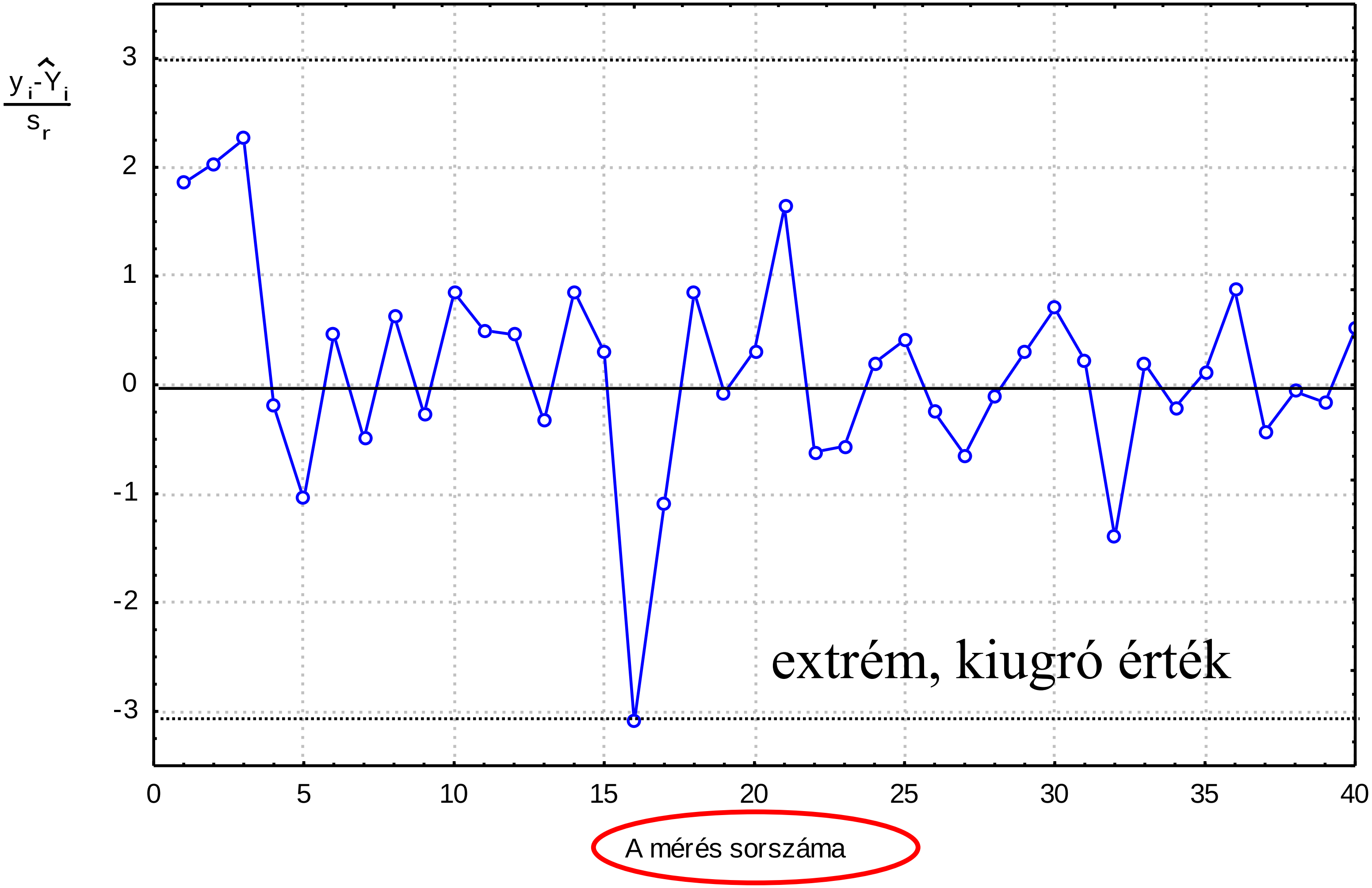
✓ feltétel teljesül



3. mérési hibák függetlenek-e egymástól

másik adatsorra
készült ábra

feltétel NEM teljesül

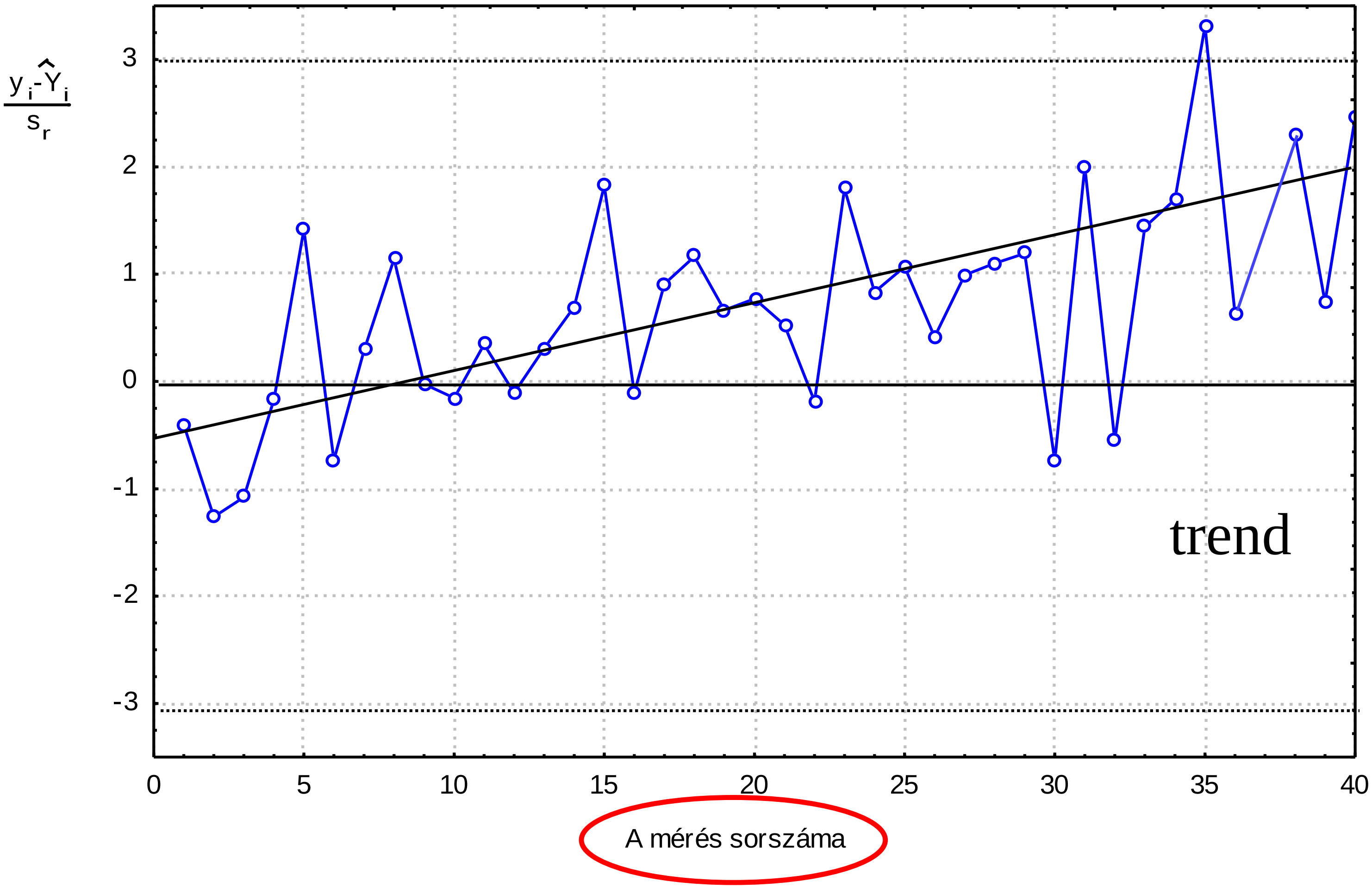


extrém, kiugró érték

másik adatsorra
készült ábra

3. mérési hibák függetlenek-e egymástól

feltétel NEM teljesül

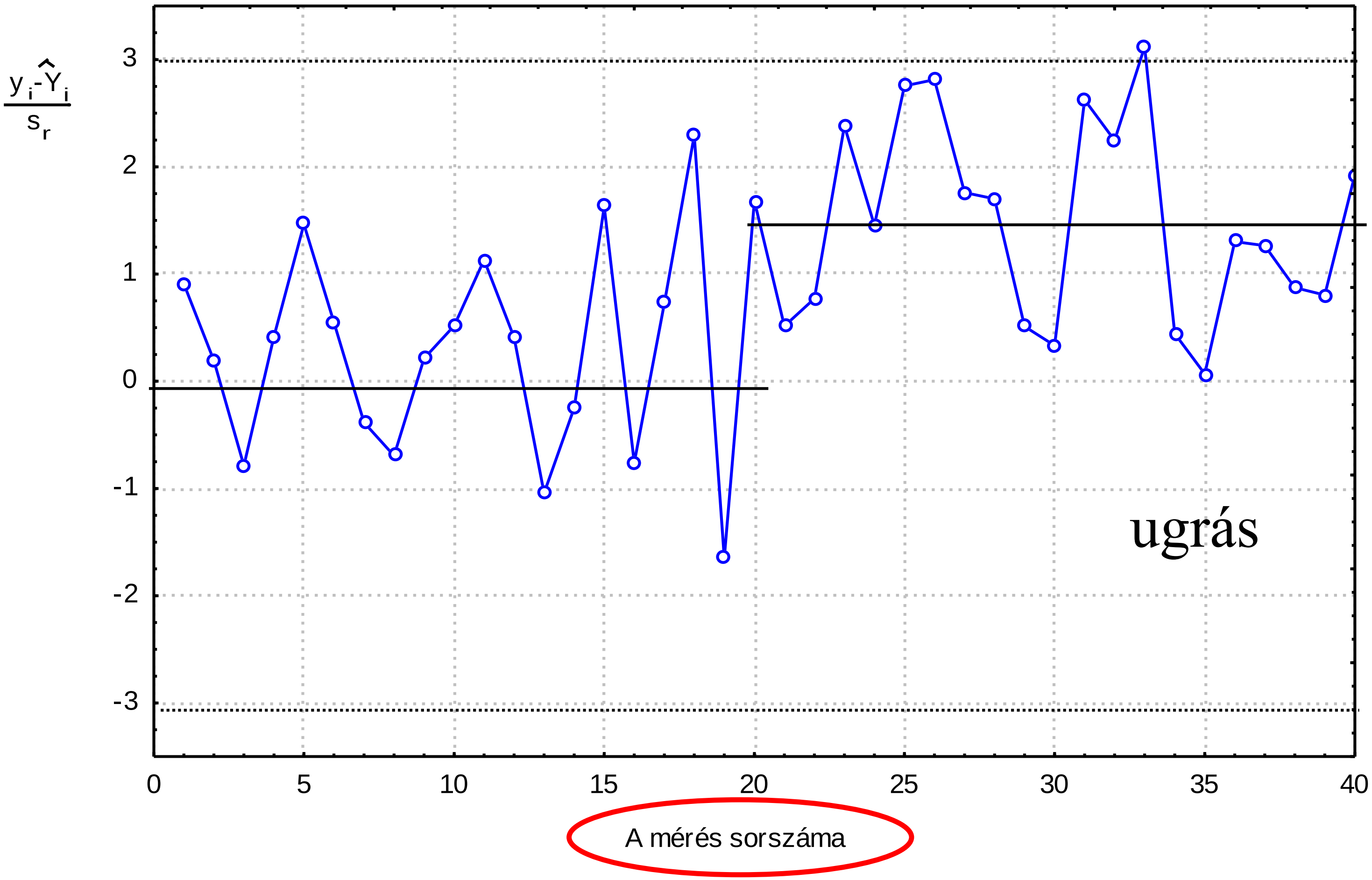


trend

3. mérési hibák függetlenek-e egymástól

másik adatsorra
készült ábra

feltétel NEM teljesül



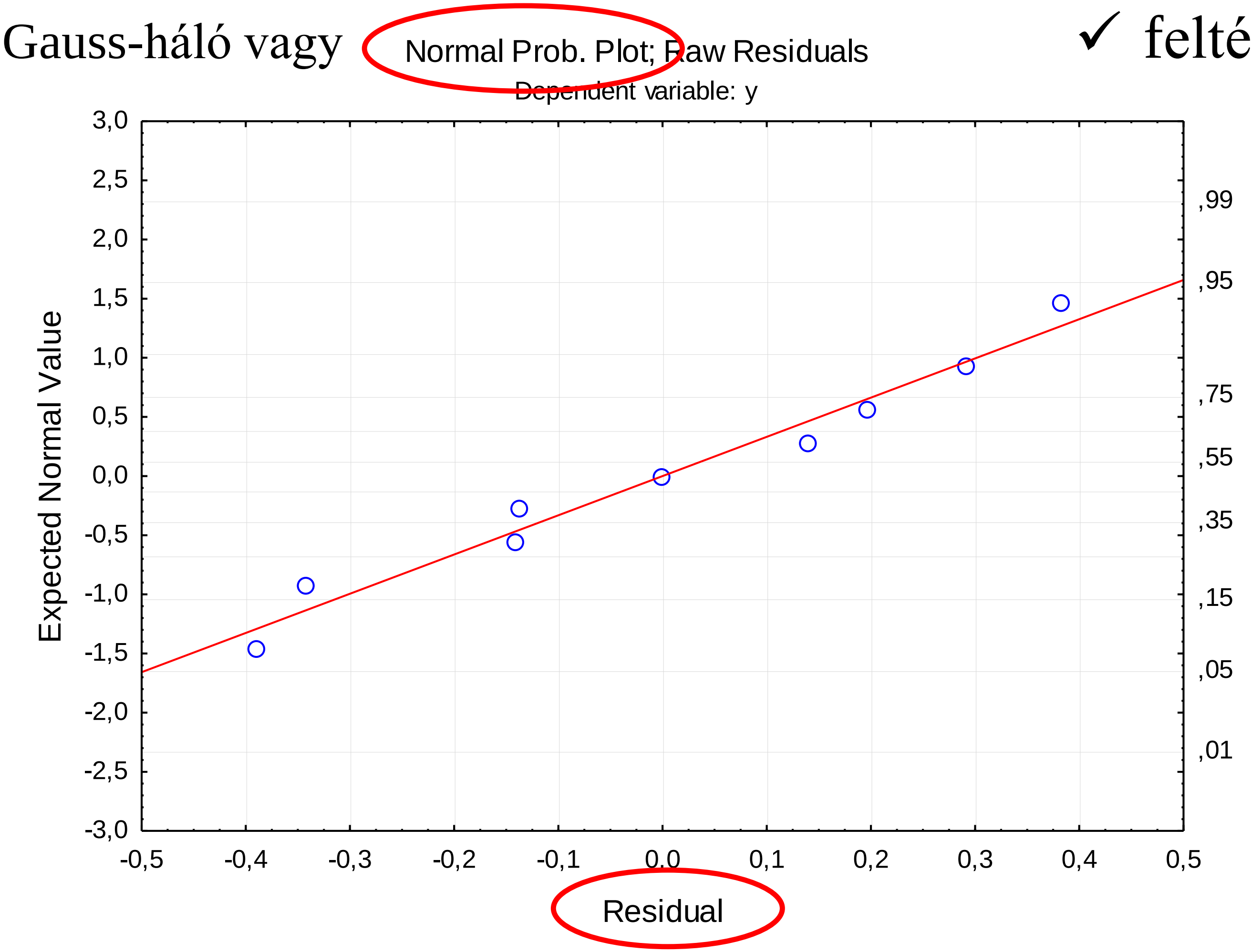
ugrás

1. példa adataival készült ábra

4. mérési hibák normális eloszlásúak-e

✓ feltétel teljesül

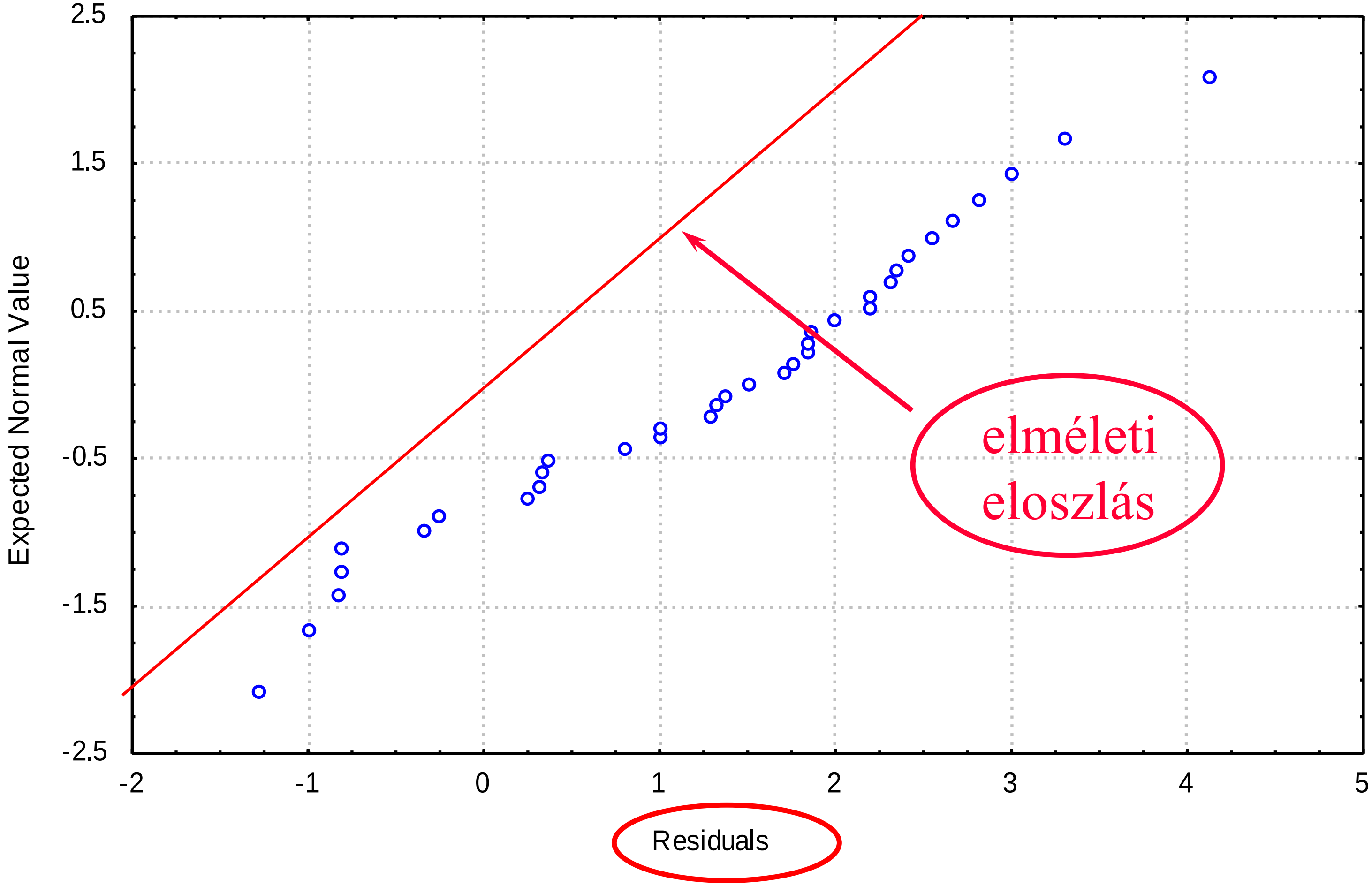
Gauss-háló vagy



másik adatsorra
készült ábra

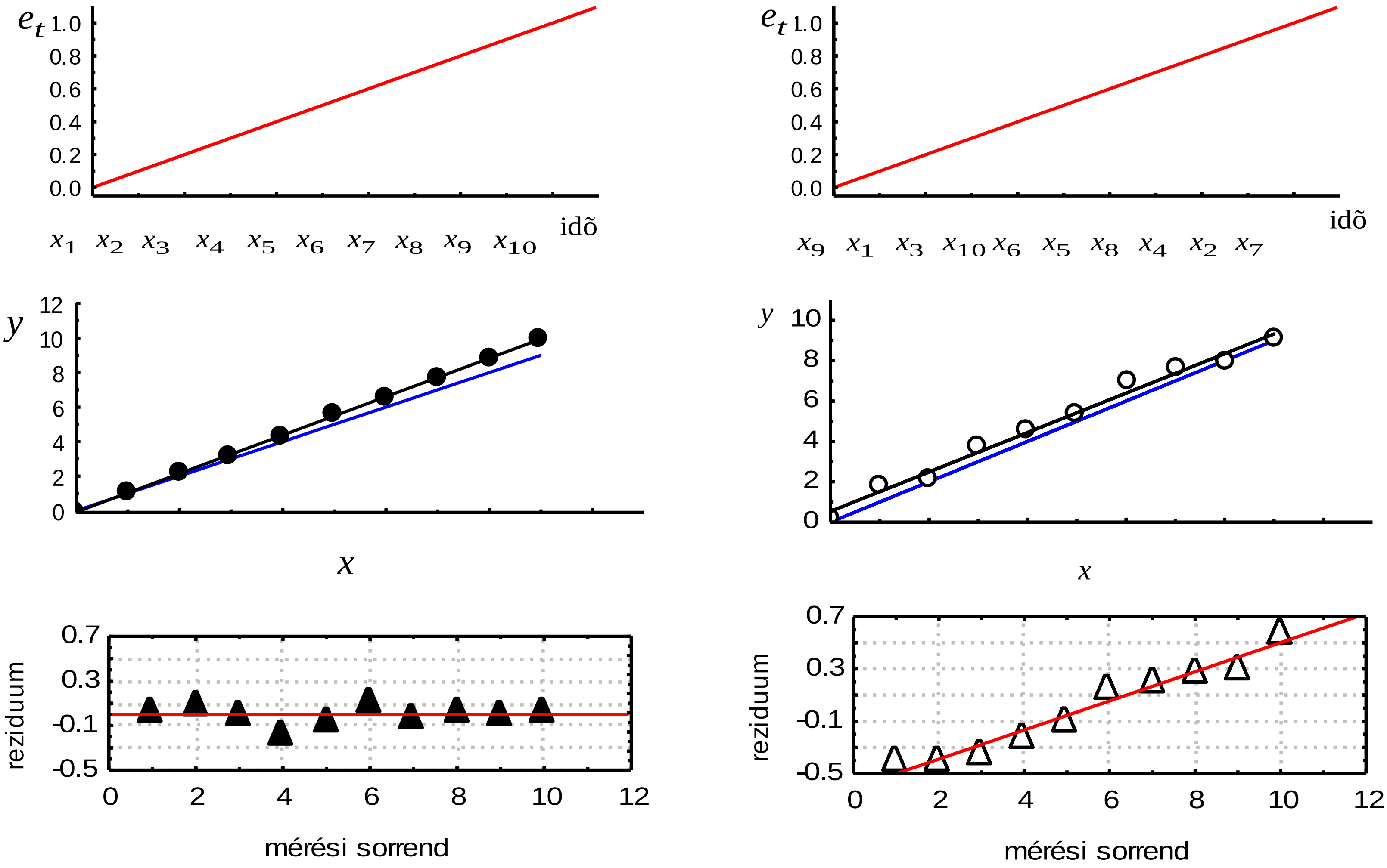
4. mérési hibák normális eloszlásúak-e

feltétel NEM teljesül



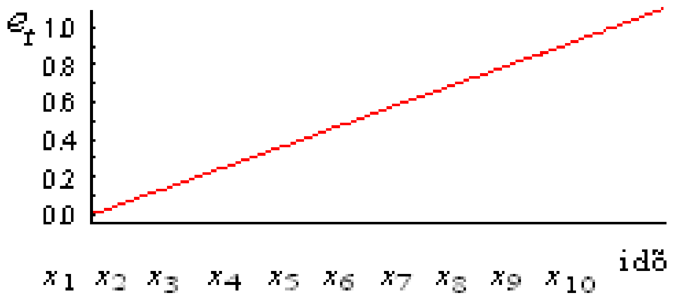
elméleti
eloszlás

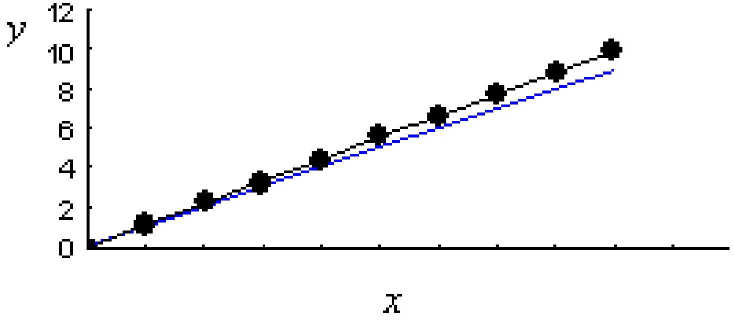
A mérések sorrendjének hatása



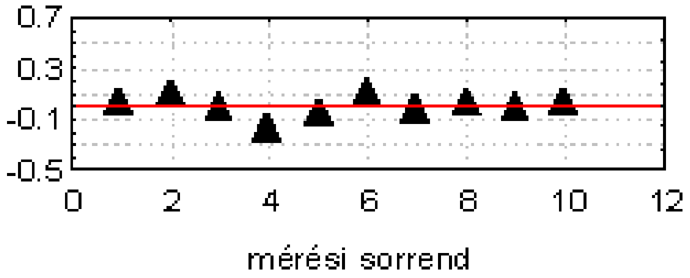
Kézenfekvő lenne, hogy *x* növekvő sorrendjében mérünk

ekkor *y* az *x* hatása + a mérési ingadozás + az idő hatása (sorrend): az illesztett függvény az *x* és az idő hatásának összegét becsüli





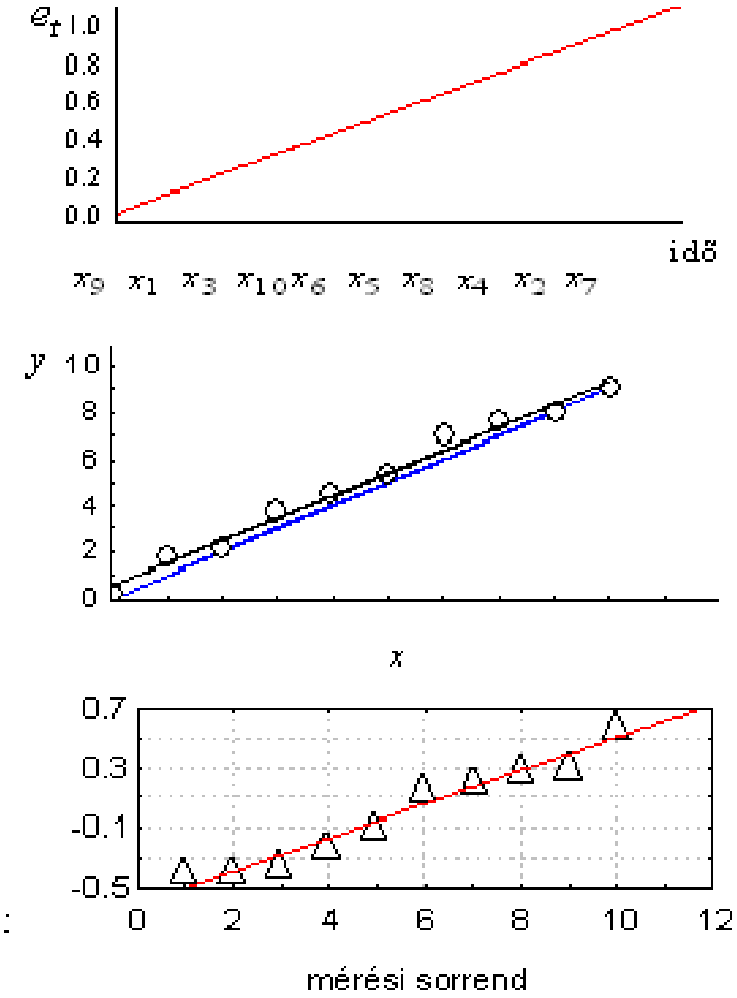
Ha a reziduumokat a mérések sorszáma függvényében ábrázoljuk, nem látunk rendszerességet, mert a két hatás összegét leíró egyenes körül véletlenszerű az ingadozás.



Vagyis nem szerzünk tudomást arról, hogy az *y* *x*-től való függésébe egy zavaró tényező (az idő) hatását is belemértük és beleszámoltuk: hamis az összefüggés.

Ha <u>véletlenszerű sorrendben mérünk</u>, az egyre nagyobb *x* értékekhez nem tartozik egyre hosszabb eltelt idő.

Itt is a két hatás összegét mérjük, de a két hatás nem mutat egy irányba, az idő járuléka nem nő monoton módon az *x* értékével. Az időbeliség egyrészt eltorzítja az összefüggést (nagyjából párhuzamosan fölfelé tolja el az egyenest), másrészt nagyobb szóródást okoz.



Ha a mérések sorszáma függvényében ábrázoljuk a reziduumokat, azok rendszerességet mutatnak, mert az *y*-nak az időtől való függéséről az illesztett egyenes nem ad számot, azt az egyenestől való eltérésként észleljük.