Тема 4. Оценка качества подгонки линии регрессии к имеющимся данным

Темы лекции.

- Коэффициент детерминации.
- Свойства коэффициента детерминации.
- Скорректированный коэффициент детерминации.
- Свойства скорректированного коэффициента детерминации.

Как понять, насколько наша модель «хороша»

Первое, что приходит на ум – «похожесть» реальных и прогнозных значений, качество подгонки.

Второе – наша модель должна хорошо объяснять имеющиеся данные, мы должны понять, как образуются значения переменной *Y*.

Первое и второе не одно и тоже.

Модель может обладать хорошим качеством подгонки и совсем не обладать объясняющей способностью

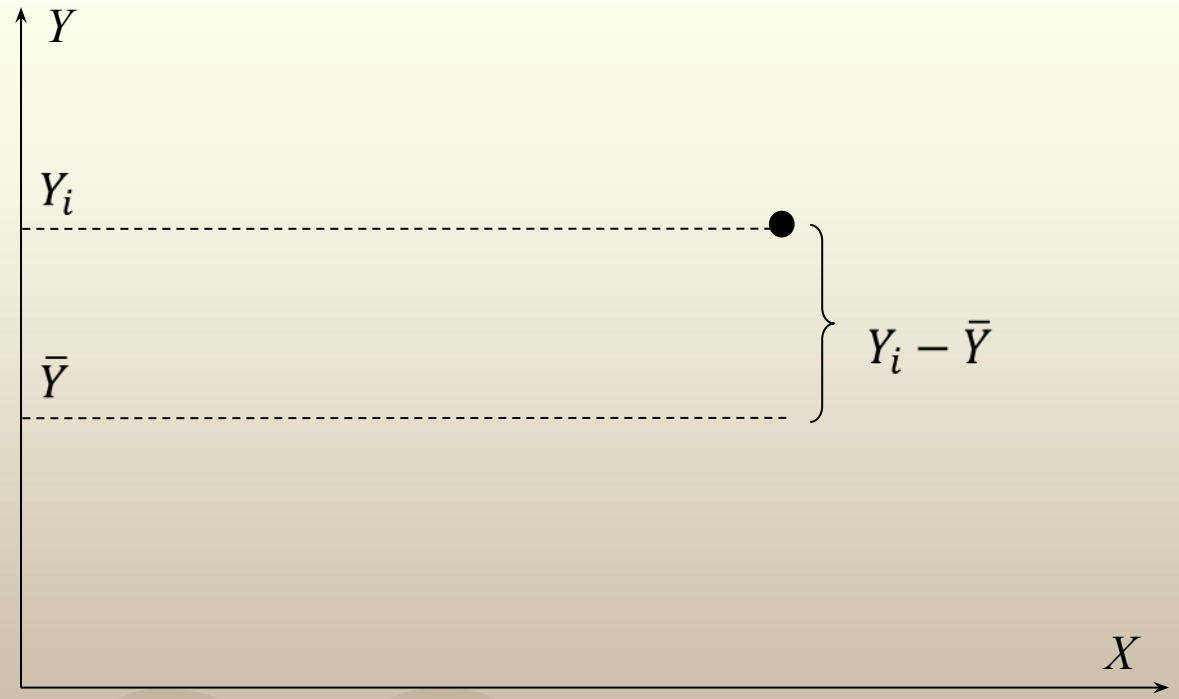
$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \ldots + \beta_k X_k + \varepsilon$$

0011 0010 1010 1101 0001 0100 1011

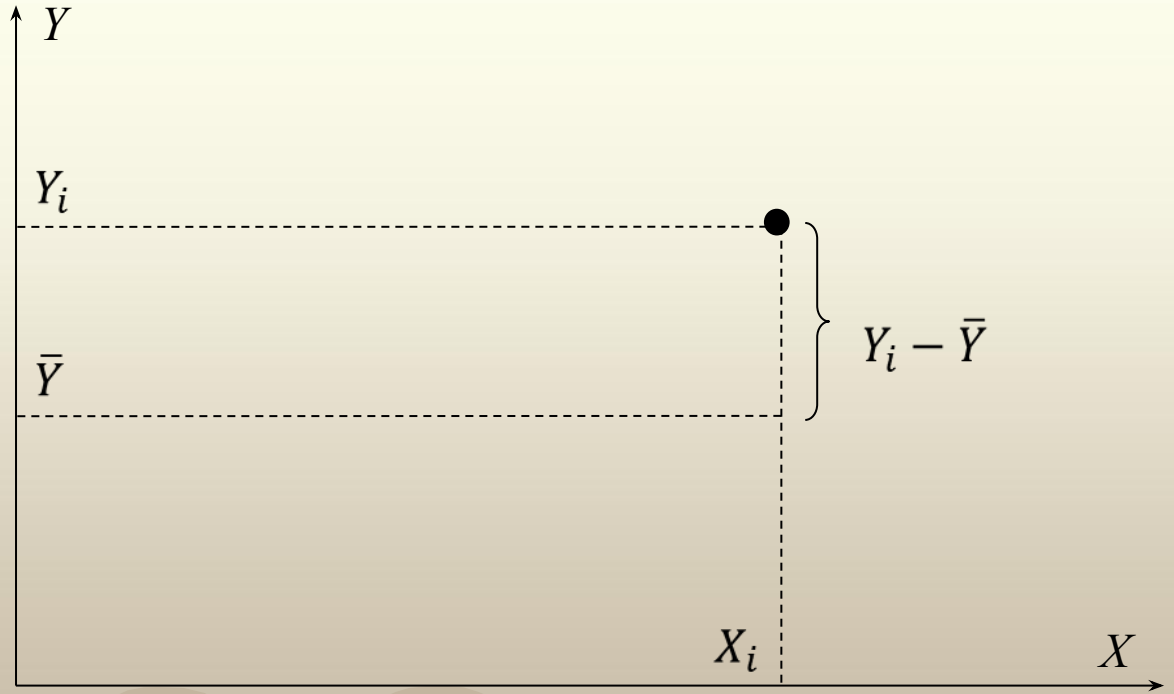
Насколько хорошо нам удалось объяснить изменение переменной *Y* нашей моделью.

Разложим вариацию *Y* на две части. Насколько наше уравнение объясняет вариацию *Y* и какова часть *Y*, которую мы не можем объяснить нашим уравнением.

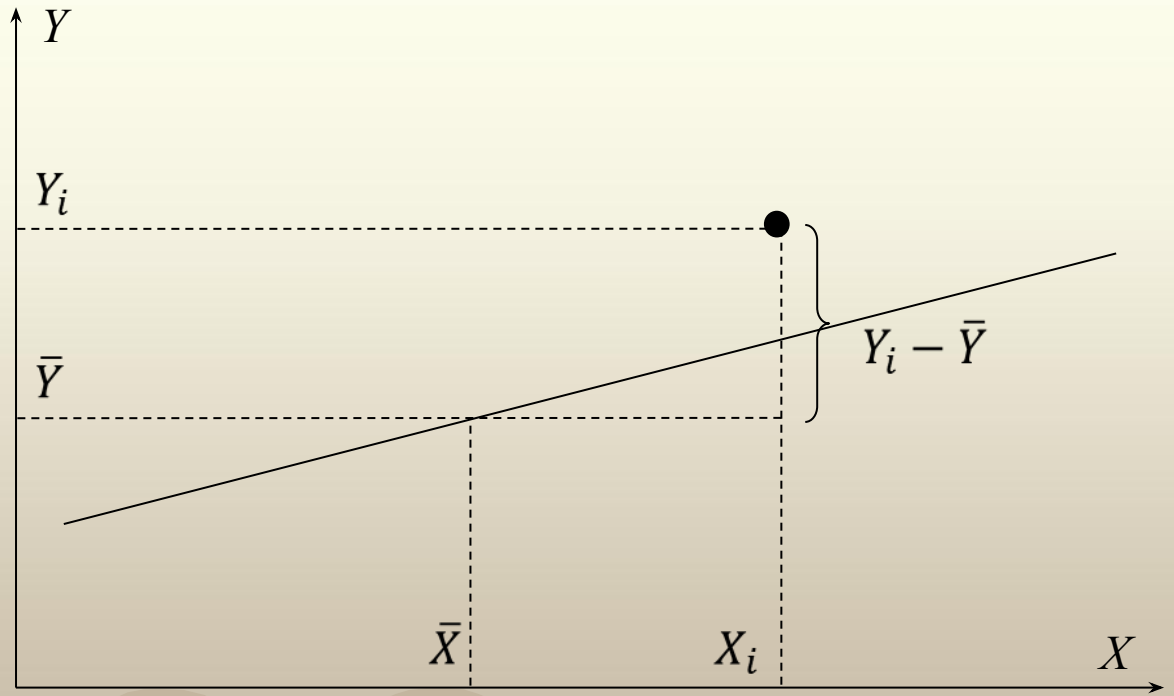
Почему не все Y_i одинаковые?



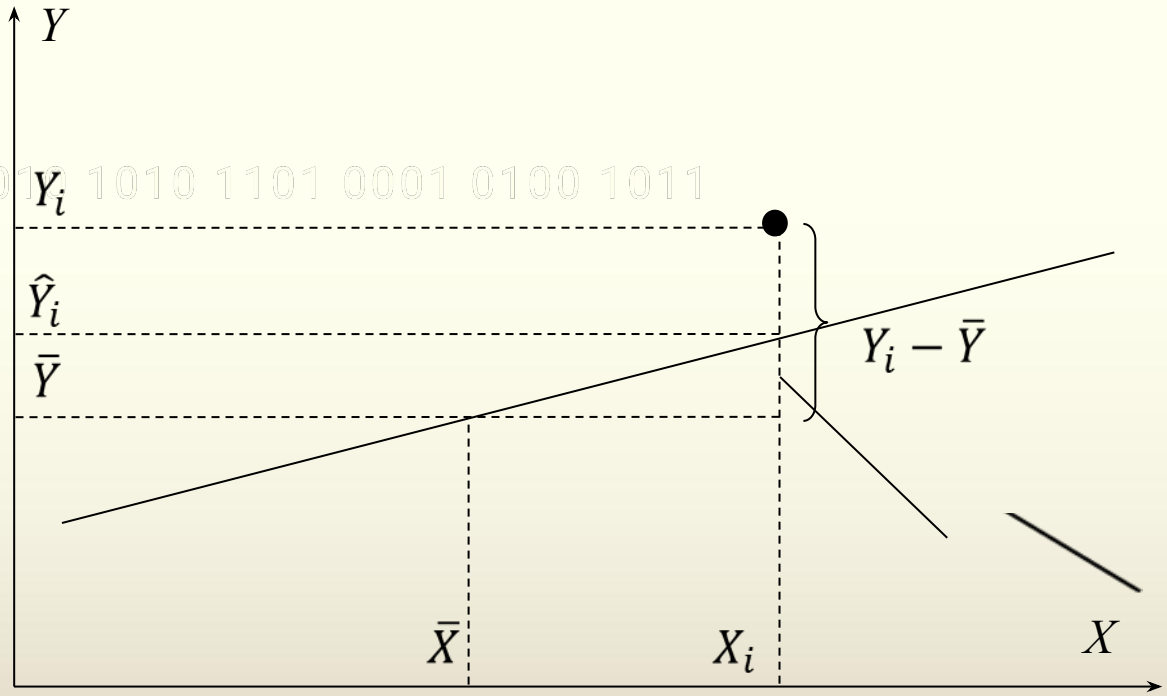
Может Y зависит от X?



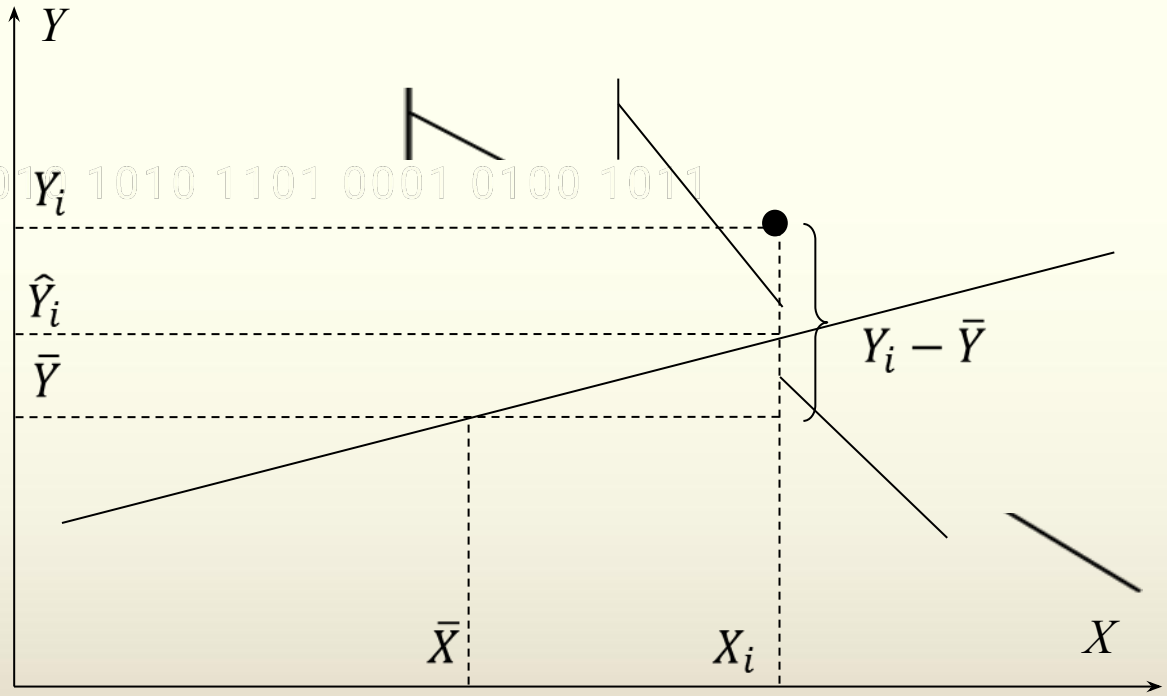
И эта зависимость линейная?



Модель $Y = \alpha + \beta X + \varepsilon$



Согласно модели, для данного значения переменной X переменная Y должна быть равна $\hat{Y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta} X_i$ и отклонение от среднего должно быть $\hat{Y}_i - \bar{Y}$



Согласно модели, для данного значения переменной X переменная Y должна быть равна $\hat{Y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta} X_i$ и отклонение от среднего должно быть $\hat{Y}_i - \bar{Y}$

Модель знает не все.
Ошибка модели для данного наблюдения $e_i = Y_i - \hat{Y}_i$

Отклонение значения переменной Y от среднего

$$Y_i - \overline{Y}$$

Раскладывается на две части

$$Y_i - \overline{Y} = (\hat{Y}_i - \overline{Y}) + (Y_i - \hat{Y}_i)$$

объясненная рассматриваемой моделью +
необъяснённая часть (остаток)

чем модель лучше, тем остаток меньше.

$$Y_i - \bar{Y} = (\hat{Y}_i - \bar{Y}) + (Y_i - \hat{Y}_i)$$

Возведем обе части в квадрат и просуммируем по всем наблюдениям

$$\sum_{i=1}^{N} (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{N} \left((\hat{Y}_i - \bar{Y}) + (Y_i - \hat{Y}_i) \right)^2$$

Раскроем скобки

$$\sum_{i=1}^{N} (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{N} (Y_i - \hat{Y}_i + \hat{Y}_i - \bar{Y})^2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} (Y_i - \hat{Y}_i)^2 - 2\sum_{i=1}^{N} (Y_i - \hat{Y}_i)(\hat{Y}_i - \bar{Y}) + \sum_{i=1}^{N} (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$$

I II III

В этой сумме II = 0, если в уравнении есть свободный коэффициент

Разложение общей вариации переменной Y

$$\sum_{i=1}^{N}(Y_i-\bar{Y})^2=\sum_{i=1}^{N}(\hat{Y}_i-\bar{Y})^2+\sum_{i=1}^{N}(Y_i-\hat{Y}_i)^2$$

TSS ESS RSS

$$TSS = ESS + RSS$$

$$\sum_{i=1}^{N}(Y_i-\bar{Y})^2=\sum_{i=1}^{N}(Y_i-\hat{Y}_i)^2+\sum_{i=1}^{N}(\hat{Y}_i-\bar{Y})^2$$

TSS RSS ESS

- TSS – total sum of squares – вся дисперсия или вариация *Y*, характеризует степень случайного разброса значений функции регрессии около среднего значения *Y*
- RSS – residual sum of squares – есть сумма квадратов остатков регрессии, та величина, которую мы минимизируем при построении прямой, часть дисперсии, которая нашим уравнением не объясняется
- ESS – equation sum of squares – объясненная часть общей вариации

Коэффициент детерминации

Коэффициентом детерминации или долей объясненной нашим уравнением дисперсии называется величина

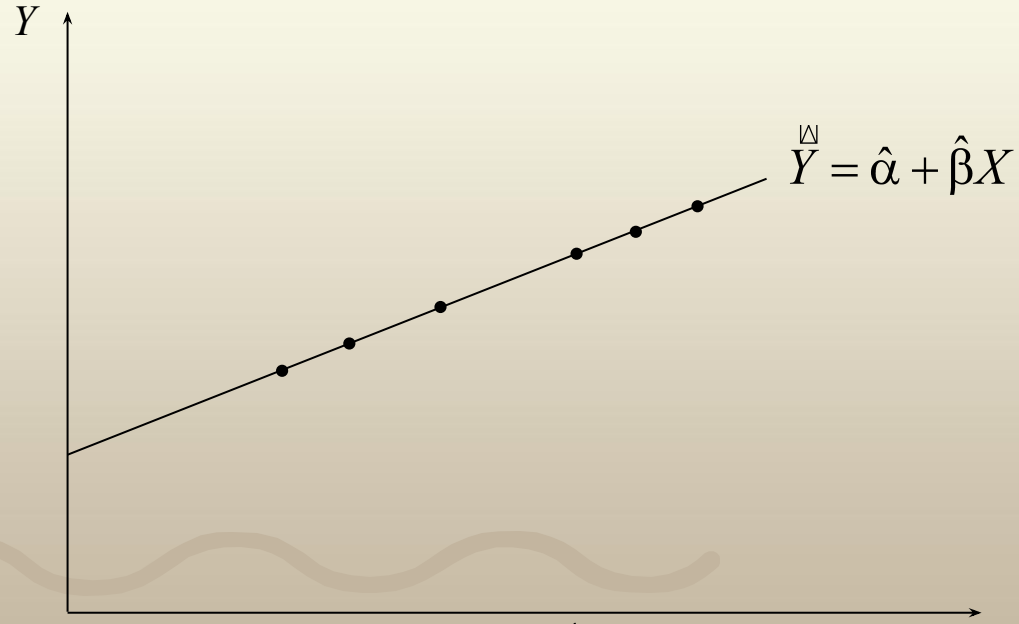
$$R^2 = \frac{\mathrm{ESS}}{\mathrm{TSS}} = 1 - \frac{\mathrm{RSS}}{\mathrm{TSS}}$$

Свойства коэффициента детерминации

$0 \le R^2 \le 1$ в силу определения

$$R^2 = 1$$

в этом случае все точки (X_i, Y_i) лежат на одной прямой (RSS = 0).



Новые точки будут лежать на этой прямой?

$$R^2 = 0$$

0011 0010 1010 1101 0001 0100 1011

в этом случае ESS = 0,

$$\sum_{i=1}^{N} (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 = 0$$

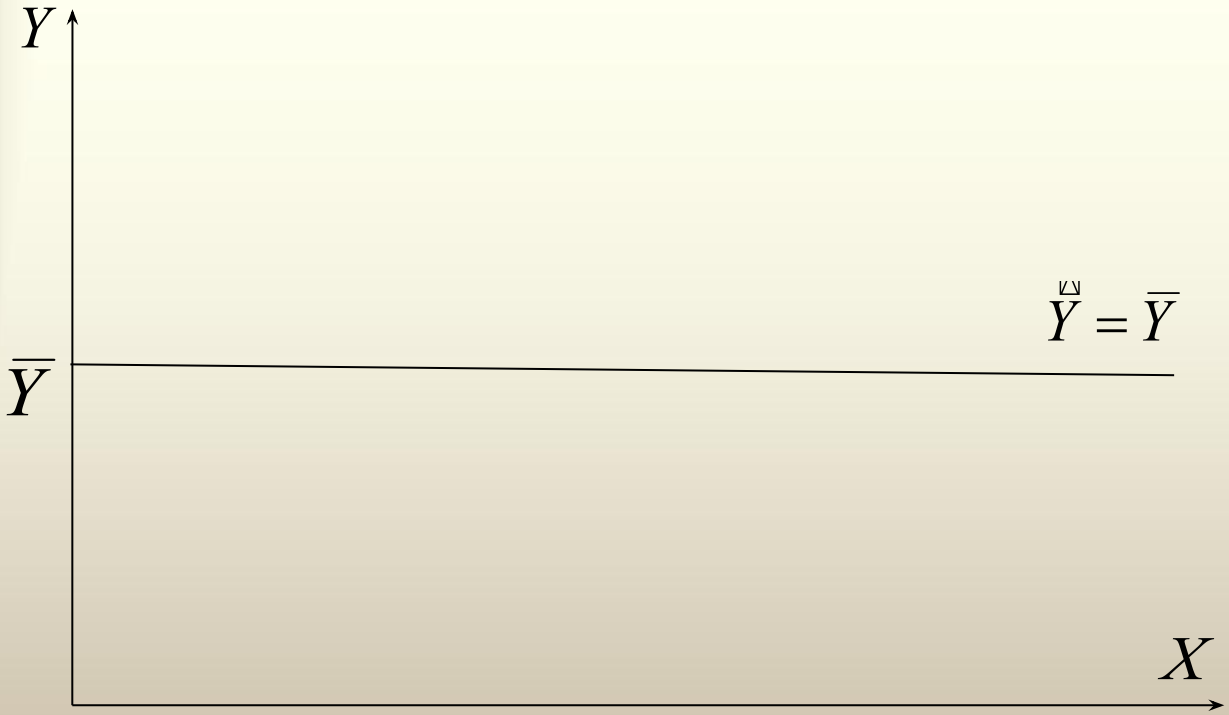
$$\forall i = 1 \ldots N \qquad \hat{Y}_i - \bar{Y} = 0$$

$$\hat{Y}_i = \bar{Y}$$

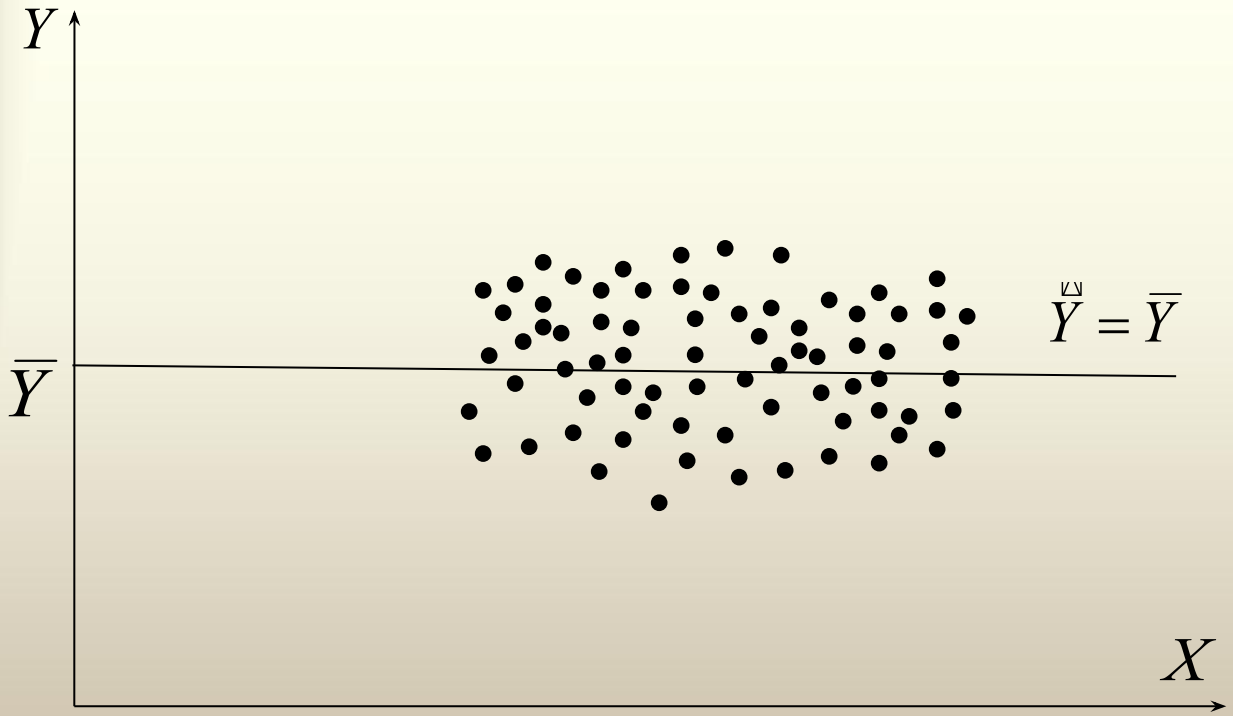
наша регрессия ничего не объясняет, ничего не дает по сравнению с тривиальным прогнозом

$R^2 = 0$

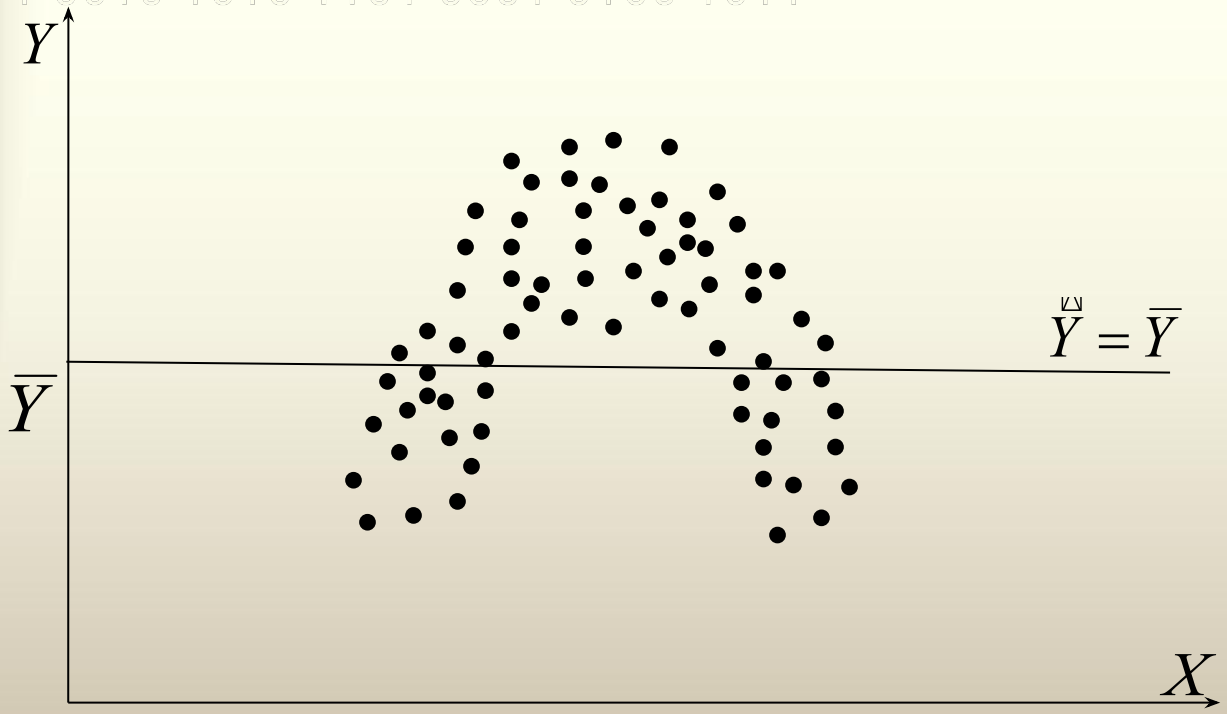
0011 0010 1010 1101 0001 0100 1011



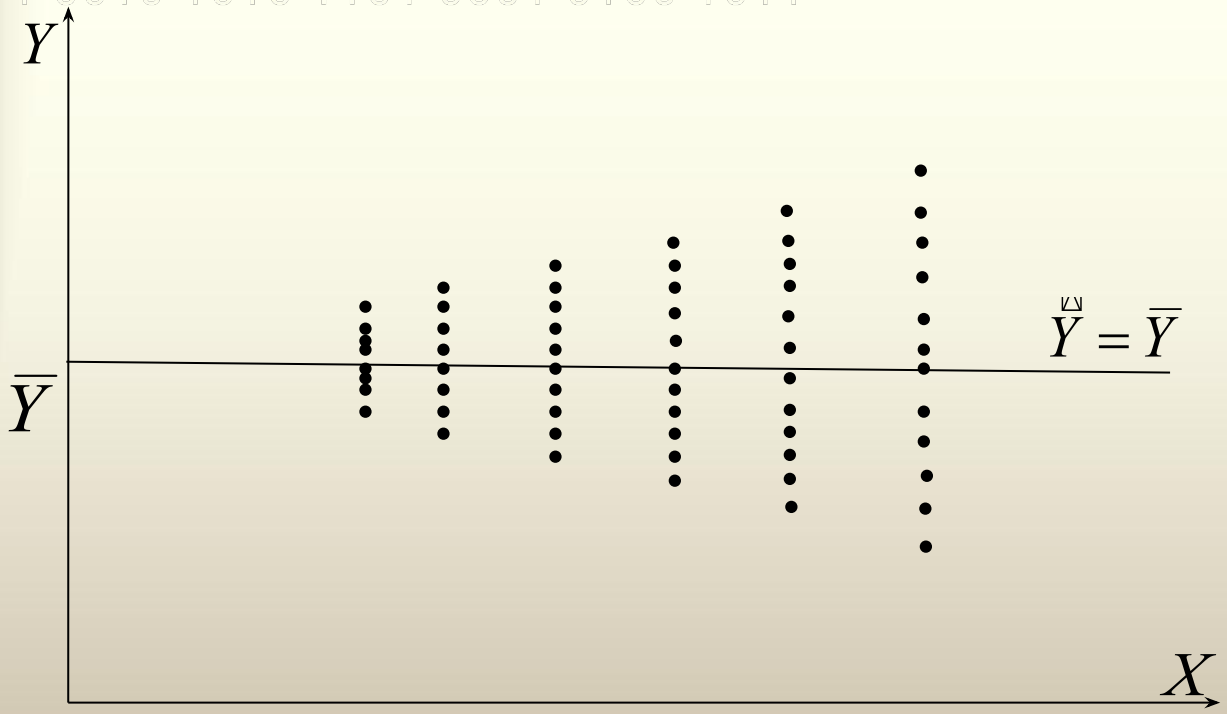
X и Y независимы



Нелинейная корреляция



Другая статистическая связь



$$0 < R^2 < 1$$

0011 0010 1010 1101 0001 0100 1011

в этом случае чем ближе R^2 к 1, тем лучше качество подгонки кривой к нашим данным, тем точнее аппроксимирует Y

Недостаток коэффициента детерминации

R^2, вообще говоря, возрастает при добавлении еще одного регрессора, поэтому для выбора между несколькими регрессионными уравнениями не следует полагаться только на R^2

Скорректированный коэффициент детерминации

Попыткой устранить эффект, связанный с ростом R^2 при увеличении числа регрессоров, является коррекция R^2 на число регрессоров - наложение "штрафа" за увеличение числа независимых переменных.

Скорректированный коэффициент детерминации

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{RSS / (N - k - 1)}{TSS / (N - 1)}$$

Свойства скорректированного коэффициента детерминации

$$R^2_{adj} = 1 - (1 - R^2)\frac{N-1}{N-k-1}$$

$$R^2 > R^2_{adj}$$

$R^2_{adj} \le 1$, но может быть и < 0

Упражнение

Показать, что статистика увеличится при добавлении новой переменной тогда и только тогда, когда *t*-статистика коэффициента при этой переменной по модулю больше 1.

Следовательно, если в результате регрессии с новой переменной R^2_{adj} увеличился, это еще не означает, что коэффициент при этой переменной значимо отличается от нуля, поэтому мы не можем сказать, что спецификация модели улучшилась

Вопросы для самопроверки

- Для чего нужен коэффициент детерминации.
- Основная идея построения характеристики качества подгонки линии регрессии к имеющимся данным.
- Как связаны между собой коэффициент детерминации и коэффициент корреляции в парной модели.
- В каком случае коэффициент детерминации имеет смысл.
- Докажите, что второе слагаемое в разложении общей вариации равно нулю.
- Какие вы знаете свойства коэффициента детерминации
- В каких случаях нельзя использовать коэффициент детерминации для сравнения моделей.
- Что такое скорректированный коэффициент детерминации.
- Всегда ли скорректированный коэффициент детерминации увеличивается при добавлении новых переменных.
- Перечислите свойства скорректированного коэффициента детерминации