Статистический анализ данных. MADE 7. Регрессионный анализ

Михаил Хальман khalman.m@yandex.com

12 декабря 2019 г.

•00000000000

 $1, \ldots, n$ — объекты: x_1, \dots, x_k, y — признаки, значения которых измеряются на объектах; $x_1, ..., x_k$ — объясняющие переменные (предикторы, регрессоры, факторы, признаки); y — зависимая переменная, отклик.

Хотим найти такую функцию f, что $y \approx f(x_1, \ldots, x_k)$;

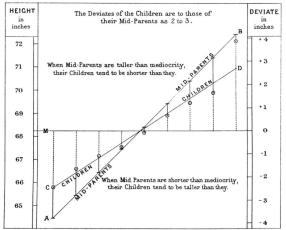
$$\underset{f}{\operatorname{argmin}} \mathbb{E} \left(y - f \left(x_1, \dots, x_k \right) \right)^2 = \mathbb{E} \left(y | x_1, \dots, x_k \right).$$

$$\mathbb{E}\left(y\,|x_1,\ldots,x_k\,
ight)=f\left(x_1,\ldots,x_k
ight)$$
 — модель регрессии; $\mathbb{E}\left(y\,|x_1,\ldots,x_k\,
ight)=eta_0+\sum\limits_{j=1}^keta_jx_j$ — модель линейной регрессии.

Здесь и далее n > k $(n \gg k)$.

Первое появление

Впервые такая постановка появляется в работе Гальтона 1885 г. «Регрессия к середине в наследственности роста».



$$y - \bar{y} \approx \frac{2}{3} (x - \bar{x})$$
.

Метод наименьших квадратов (МНК)

Матричные обозначения:

$$X = \begin{pmatrix} x_{10} = 1 & x_{11} & \dots & x_{1k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n0} = 1 & x_{n1} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix}; \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}; \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}.$$

Метод наименьших квадратов:

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=0}^{k} \beta_j x_{ij} \right)^2 \to \min_{\beta};$$

$$\|y - X\beta\|_2^2 \to \min_{\beta};$$

$$2X^T (y - X\beta) = 0,$$

$$\hat{\beta} = \left(X^T X \right)^{-1} X^T y,$$

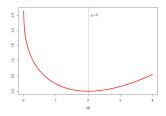
$$\hat{y} = X \left(X^T X \right)^{-1} X^T y.$$

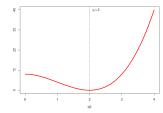
Анализ моделей Метод наименьших квадратов (МНК)

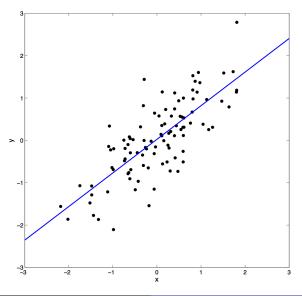
МНК в линейной регрессии даёт выборочную оценку линейной аппроксимации условного матожидания $\mathbb{E}\left(y\left|x\right.\right)$ Кроме $\|\cdot\|_{2}^{2}$ это делает любая дивергенция Брегмана:

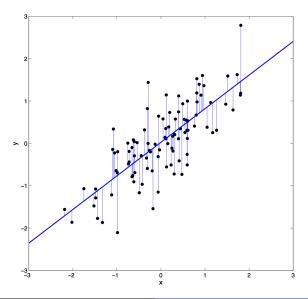
$$D(y, X\beta) = \sum_{i=1}^{n} (\phi(y_i) - \phi(x_i\beta) - \phi'(x_i\beta)(y_i - x_i\beta)),$$

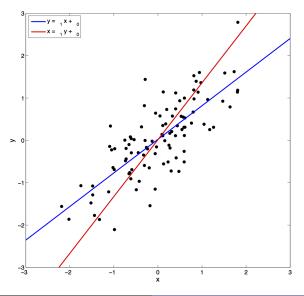
где ϕ — произвольная непрерывно дифференцируемая выпуклая функция.

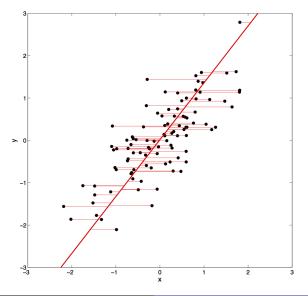


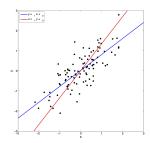












- ullet Две прямые пересекаются в точке $(ar{x},ar{y})$.

$$\hat{\theta}_1 = \frac{n\sum xy - \sum x\sum y}{n\sum x^2 - (\sum x)^2}, \quad \hat{\phi}_1 = \frac{n\sum xy - \sum x\sum y}{n\sum y^2 - (\sum y)^2},$$

$$\hat{r}_{xy} = \frac{n\sum xy - \sum x\sum y}{\sqrt{\left(n\sum x^2 - (\sum x)^2\right)\left(n\sum y^2 - (\sum y)^2\right)}}.$$

$$TSS = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \bar{y}\right)^2 \quad \text{(Total Sum of Squares)};$$

$$ESS = \sum_{i=1}^{n} \left(\hat{y}_i - \bar{y}\right)^2 \quad \text{(Explained Sum of Squares)};$$

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i\right)^2 \quad \text{(Residual Sum of Squares)};$$

$$TSS = ESS + RSS.$$

Коэффициент детерминации:

Анализ моделей

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

 $R^2 = r_{y\hat{y}}^2$ — квадрат коэффициента множественной корреляции y с X.

Приведённый коэффициент детерминации

Стандартный коэффициент детерминации всегда увеличивается при добавлении регрессоров в модель, поэтому для отбора признаков его использовать нельзя.

Для сравнения моделей, содержащих разное число признаков, можно использовать приведённый коэффициент детерминации:

$$R_a^2 = \frac{ESS/(n-k-1)}{TSS/(n-1)} = 1 - (1-R^2) \frac{n-1}{n-k-1}.$$

Предположения модели

- **①** Линейность отклика: $y = X\beta + \varepsilon$.
- ② Случайность выборки: наблюдения $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$ независимы.
- ullet Полнота ранга: ни один из признаков не является константой или линейной комбинацией других признаков ни в популяции, ни в выборке $(\operatorname{rank} X = k + 1)$.
- lacktriangle Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(arepsilon\left|X\right.
 ight)=0.$

В предположениях (1-4) МНК-оценки коэффициентов β являются несмещёнными:

$$\mathbb{E}\hat{\beta}_j = \beta_j, \ j = 0, \dots, k,$$

и состоятельными:

$$\forall \gamma > 0 \lim_{n \to \infty} P\left(\left|\beta_j - \hat{\beta}_j\right| < \gamma\right) = 1, \ j = 0, \dots, k.$$

Предположения модели

- **①** Линейность отклика: $y = X\beta + \varepsilon$.
- ② Случайность выборки: наблюдения $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$ независимы.
- ① Полнота ранга: ни один из признаков не является константой или линейной комбинацией других признаков ни в популяции, ни в выборке $(\operatorname{rank} X = k + 1)$.
- lacktriangle Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(arepsilon\left|X\right.
 ight)=0.$

(предположения Гаусса-Маркова).

Теорема Гаусса-Маркова: в предположениях (1-5) МНК-оценки имеют наименьшую дисперсию в классе оценок β , линейных по y.

Неправильное определение модели

Недоопределение: если зависимая переменная определяется моделью

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_{j-1} x_{j-1} + \beta_j x_j + \beta_{j+1} x_{j+1} + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon,$$

а вместо этого используется модель

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_{j-1} x_{j-1} + \beta_{j+1} x_{j+1} + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon,$$

то МНК-оценки $\hat{eta}_0,\dots,\hat{eta}_{j-1},\hat{eta}_{j+1},\dots,\hat{eta}_k$ являются смещёнными и несостоятельными оценками $eta_0,\dots,eta_{j-1},eta_{j+1},\dots,eta_k$.

Переопределение: если признак x_j не влияет на y, т. е. $\beta_j=0$, то МНК-оценка $\hat{\beta}$ остаётся несмещённой состоятельной оценкой β , но дисперсия её возрастает.

0000000000000

В предположениях (1-5) дисперсии МНК-оценок коэффициентов β задаются следующим образом:

$$\mathbb{D}\left(\left.\hat{\beta}_{j}\right|X\right) = \frac{\sigma^{2}}{TSS_{j}\left(1 - R_{j}^{2}\right)},$$

где $TSS_j=\sum_{i=1}^n (x_{ij}-\bar{x}_j)^2\,,\; R_j^2$ — коэффициент детерминации при регрессии x_j на все остальные признаки из X.

- ullet Чем больше дисперсия ошибки σ^2 , тем больше дисперсия оценки \hat{eta}_j .
- Чем больше вариация значений признака x_j в выборке, тем меньше дисперсия оценки \hat{eta}_j .
- ullet Чем лучше признак x_j объясняется линейной комбинацией оставшихся признаков, тем больше дисперсия оценки \hat{eta}_j .



 $R_j^2 < 1$ по предположению (3); тем не менее, может быть $R_j^2 \approx 1.$

В матричном виде:

$$\mathbb{D}\left(\left.\hat{\beta}\right|X\right) = \sigma^2\left(X^TX\right)^{-1}.$$

Если столбцы X почти линейно зависимы, то матрица X^TX плохо обусловлена, и дисперсия оценок $\hat{\beta}_j$ велика.

Близкая к линейной зависимость между двумя или более признаками x_j называется **мультиколлинеарностью**.

Проблема мультиколлинеарности решается с помощью отбора признаков или использования регуляризаторов.

Бинарные признаки

Если x_j принимает только два значения, то они кодируются нулём и единицей. Например, если x_j — пол испытуемого, то можно задать $x_j = [$ пол = мужской] .

Механизм построения регрессии не меняется.

Категориальные признаки

Как кодировать дискретные признаки x_j , принимающие более двух значений?

Пусть y — средний уровень заработной платы, x — тип должности (рабочий / инженер / управляющий). Допустим, мы закодировали эти должности следующим образом:

Тип должности	x
рабочий	1
инженер	2
управляющий	3

и построили регрессию $y=\beta_0+\beta_1x$. Тогда для рабочего, инженера и управляющего ожидаемые средние уровни заработной платы определяются следующим образом:

$$y_{bc} = \beta_0 + \beta_1,$$

$$y_{pr} = \beta_0 + 2\beta_1,$$

$$y_{wc} = \beta_0 + 3\beta_1.$$

Согласно построенной модели, разница в средних уровнях заработной платы рабочего и инженера в точности равна разнице между зарплатами инженера и управляющего.

Фиктивные переменные

Верный способ использования категориальных признаков в регрессии — введение бинарных фиктивных переменных (dummy variables). Пусть признак x_i принимает m различных значений, тогда для его

Пусть признак x_j принимает m различных значений, тогда для его кодирования необходима m-1 фиктивная переменная.

Способы кодирования:

	Dummy		Deviation	
Тип должности	x_1	x_2	x_1	x_2
рабочий	0	0	1	0
инженер	1	0	0	1
управляющий	0	1	-1	-1

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

- При dummy-кодировании коэффициенты β_1, β_2 оценивают среднюю разницу в уровнях зарплат инженера и управляющего с рабочим.
- При deviation-кодировании коэффициенты β_1,β_2 оценивают среднюю разницу в уровнях зарплат рабочего и инженера со средним по всем должностям.

Вопросы

- ① Как найти доверительные интервалы для β_j и проверить гипотезу $H_0\colon \beta_i=0$?
- ② Как найти доверительный интервал для значений отклика на новом объекте $y(x_0)$?
- Как проверить адекватность построенной модели?

- Нормальность ошибок: $arepsilon |X| \sim N\left(0,\sigma^2\right)$. Эквивалентная запись: $y |X| \sim N\left(X\beta,\sigma^2\right)$.
 - В предположениях (1-6) МНК-оценки совпадают с оценками максимального правдоподобия.

ММП:

Линейные модели

$$\begin{split} p\left(\varepsilon_{i}\right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{1}{2\sigma}\varepsilon_{i}^{2}},\\ \ln\prod_{i=1}^{n}p\left(\varepsilon_{i}\right) &\to \max_{\beta},\\ \sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{1}{2}\ln\left(2\pi\sigma\right) - \frac{1}{2\sigma}\varepsilon_{i}^{2}\right) &\to \max_{\beta},\\ \sum_{i=1}^{n}\varepsilon_{i}^{2} &= \sum_{i=1}^{n}\left(y_{i} - \sum_{j=0}^{k}\beta_{j}x_{ij}\right)^{2} &\to \min_{\beta}. \end{split}$$

- МНК-оценки $\hat{\beta}$ имеют наименьшую дисперсию среди всех несмещённых оценок $\beta.$
- ullet МНК-оценки \hat{eta} имеют нормальное распределение $N\left(eta,\sigma^2\left(X^TX
 ight)^{-1}
 ight)$.
- ullet Несмещённой оценкой σ^2 является

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-k-1} RSS;$$

кроме того, $\frac{1}{\sigma^2}RSS \sim \chi^2_{n-k-1}$.

•
$$\forall c \in \mathbb{R}^{k+1}$$

Линейные модели

$$\frac{c^T \left(\beta - \hat{\beta}\right)}{\hat{\sigma} \sqrt{c^T \left(X^T X\right)^{-1} c}} \sim St(n - k - 1).$$

Доверительные и предсказательные интервалы

 $100(1-\alpha)$ % доверительный интервал для σ :

$$\sqrt{\frac{RSS}{\chi^2_{n-k-1,1-\alpha/2}}} \leq \sigma \leq \sqrt{\frac{RSS}{\chi^2_{n-k-1,\alpha/2}}}.$$

Возьмём $c = \left(0\dots010\dots0\right); \quad 100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для β_j :

$$\hat{\beta}_j \pm t_{n-k-1,1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{(X^T X)_{jj}^{-1}}.$$

Для нового объекта x_0 возьмём $c=x_0; \quad 100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для $\mathbb{E}\left(y\mid x=x_0\right)=x_0^T\beta$:

$$x_0^T \hat{\beta} \pm t_{n-k-1,1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{x_0^T (X^T X)^{-1}} x_0.$$

Чтобы построить предсказательный интервал для $y\left(x_{0}\right)=x_{0}^{T}\beta+\varepsilon\left(x_{0}\right),$ учтём ещё дисперсию ошибки:

$$x_0^T \hat{\beta} \pm t_{n-k-1,1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{1 + x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}.$$

t-критерий Стьюдента

нулевая гипотеза: $H_0: \beta_j = 0$

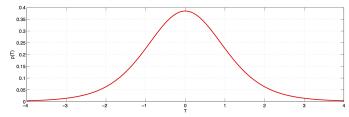
альтернатива: $H_1: \beta_j < \neq > 0$

статистика:

$$T = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\frac{RSS}{n-k-1} \left(X^T X\right)_{jj}^{-1}}}$$

нулевое распределение:

St(n-k-1)



Пример: имеется 12 испытуемых, x — результат прохождения испытуемым составного теста скорости реакции, y — результат его теста на симулятора транспортного средства. Проведение составного теста значительно проще и требует меньших затрат, поэтому ставится задача предсказания y по x, для чего строится линейная регрессия согласно модели

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon.$$

Значима ли переменная x для предсказания y?

$$H_0: \beta_1 = 0.$$

 $H_1: \beta_1 \neq 0 \Rightarrow p = 2.2021 \times 10^{-5}.$

t-критерий Стьюдента

нулевая гипотеза: $H_0: \beta_j = a$

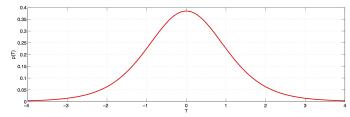
альтернатива: $H_1: \beta_j < \neq > a$

статистика:

$$T = \frac{\hat{\beta}_j - a}{\sqrt{\frac{RSS}{n - k - 1} \left(X^T X\right)_{jj}^{-1}}}$$

нулевое распределение:

St(n-k-1)



Пример: по выборке из 506 жилых районов, расположенных в пригородах Бостона, строится модель средней цены на жильё следующего вида:

$$\ln price = \beta_0 + \beta_1 \ln nox + \beta_2 \ln dist + \beta_3 rooms + \beta_4 stratio + \varepsilon,$$

где nox — содержание в воздухе двуокиси азота, dis — взвешенное среднее расстояние от жилого района до пяти основных мест трудоустройства, rooms — среднее число комнат в доме жилого района, stratio — среднее отношения числа студентов к числу учителей в школах района. Коэффициент β_1 имеет смысл эластичности цены по признаку nox. По экономическим соображениям интерес представляет гипотеза о том, что эластичность равна -1.

$$H_0: \beta_1 = -1.$$

 $H_1: \beta_1 \neq -1 \Rightarrow p = 0.6945.$

$$X_{n \times (k+1)} = \begin{pmatrix} X_1 \\ n \times (k+1-k_1) \end{pmatrix}; \quad \beta^T = \begin{pmatrix} \beta_1^T \\ (k+1-k_1) \times 1 \end{pmatrix}^T;$$

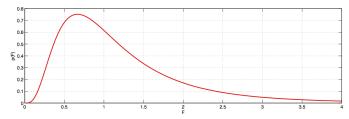
нулевая гипотеза: $H_0 : \beta_2 = 0$

альтернатива: H_1 : H_0 неверна

статистика: $RSS_r = \|y - X_1\beta_1\|_2^2$, $RSS_{ur} = \|y - X\beta\|_2^2$,

 $F = \frac{(RSS_r - RSS_{ur})/k_1}{RSS_{ur}/(n-k-1)}$

нулевое распределение: $F(k_1, n-k-1)$



Критерий Фишера

Пример: для веса ребёнка при рождении имеется следующая модель:

$$weight = \beta_0 + \beta_1 cigs + \beta_2 parity + \beta_3 inc + \beta_4 med + \beta_5 fed + \varepsilon,$$

где cigs — среднее число сигарет, выкуривавшихся матерью за один день беременности, parity — номер ребёнка у матери, inc — среднемесячный доход семьи, med — длительность в годах получения образования матерью, fed — отцом. Данные имеются для 1191 детей. Зависит ли вес ребёнка при рождении от уровня образования родителей?

$$H_0: \beta_4 = \beta_5 = 0.$$

 $H_1: H_0$ неверна $\Rightarrow p = 0.2421$.

Связь между критериями Фишера и Стьюдента

Если $k_1=1$, критерий Фишера эквивалентен критерию Стьюдента для двусторонней альтернативы.

Иногда критерий Фишера отвергает гипотезу о незначимости признаков X_2 , а критерий Стьюдента не признаёт значимым ни один из них. Возможные объяснения:

- отдельные признаки из X_2 недостаточно хорошо объясняют y, но совокупный эффект значим;
- ullet признаки в X_2 мультиколлинеарны.

Иногда критерия Фишера не отвергает гипотезу о незначимости признаков X_2 , а критерий Стьюдента признаёт значимыми некоторые из них. Возможные объяснения:

- ullet незначимые признаки в X_2 маскируют влияние значимых;
- ullet значимость отдельных признаков в X_2 результат множественной проверки гипотез.

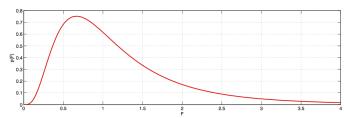
нулевая гипотеза: H_0 : $\beta_1 = \cdots = \beta_k = 0$

альтернатива: H_1 : H_0 неверна

статистика: $F = \frac{R^2/k}{\left(1 - R^2\right)/(n - k - 1)}$

Обобщённые линейные модели

нулевое распределение: F(k, n-k-1)



Пример: имеет ли вообще смысл модель веса ребёнка при рождении, рассмотренная выше?

$$H_0$$
: $\beta_1 = \cdots = \beta_5 = 0$.

$$H_1: H_0$$
 неверна $\Rightarrow p = 6.0331 \times 10^{-9}$.

Пример: имеются две модели:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon, \tag{1}$$

$$y = \gamma_0 + \gamma_1 \log x_1 + \gamma_2 \log x_2 + \varepsilon. \tag{2}$$

Как понять, какая из них лучше?

Пусть \hat{y} — оценка отклика по первой модели, $\hat{\hat{y}}$ — по второй. Подставим эти оценки как признаки в чужие модели:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 \hat{y} + \varepsilon,$$

$$y = \gamma_0 + \gamma_1 \log x_1 + \gamma_2 \log x_2 + \gamma_3 \hat{y} + \varepsilon.$$

При помощи критерия Стьюдента проверим

$$H_{01}: \beta_3 = 0, \ H_{11}: \beta_3 \neq 0,$$

 $H_{02}: \gamma_3 = 0, \ H_{12}: \gamma_3 \neq 0.$

H_{01}	Принята	Отвергнута
Принята	Обе модели хороши	Модель (1) значимо
		лучше
Отвергнута	Модель (2) значимо	Обе модели плохи
	лучше	

Пошаговая регрессия

Линейные модели

- Шаг ${f 0}$. Настраивается модель с одной только константой, а также все модели с одной переменной. Рассчитывается F-статистика каждой модели и достигаемый уровень значимости. Выбирается модель с наименьшим достигаемым уровнем значимости. Соответствующая переменная X_{e1} включается в модель, если этот достигаемый уровень значимости меньше порогового значения $p_E=0.05$.
- Шаг 1. Рассчитывается F-статистика и достигаемый уровень значимости для всех моделей, содержащих две переменные, одна из которых X_{e1} . Аналогично принимается решение о включении X_{e2} .
- Шаг 2. Если была добавлена переменная X_{e2} , возможно, X_{e1} уже не нужна. В общем случае просчитываются все возможные варианты исключения одной переменной, рассматривается вариант с наибольшим достигаемым уровнем значимости, соответствующая переменная исключается, если он превосходит пороговое значение $p_R = 0.1$.

...

Значимость категориальных предикторов

Категориальный предиктор, кодируемый несколькими фиктивными переменными, необходимо включать или исключать целиком. Значимость соответствующих фиктивных переменных лучше проверять в совокупности.

В случае, когда по отдельности какие-то фиктивные переменные не значимы, допустимо объединять уровни категориального предиктора, основываясь на интерпретации.

Проверка предположений Гаусса-Маркова

- **1** Линейность отклика: $y = X\beta + \varepsilon$.
- **2** Случайность выборки: наблюдения $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$ независимы.
- ① Полнота ранга: ни один из признаков не является константой или линейной комбинацией других признаков ни в популяции, ни в выборке $(\operatorname{rank} X = k + 1)$.
- **4** Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(\varepsilon\left|X\right.\right)=0.$
- ① Гомоскедастичность ошибок: дисперсия ошибки не зависит от значений признаков: $\mathbb{D}\left(arepsilon\mid X\right)=\sigma^{2}.$

- Предположения (1-2) проверить нельзя.
- Предположение (3) легко проверяется, без его выполнения построить модель вообще невозможно.
- Предположения (4-6) об ошибке ε необходимо проверять.

Оценивать ошибку ε будем при помощи **остатков**:

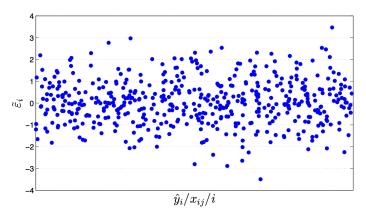
$$\hat{\varepsilon}_i = y_i - \hat{y}_i, \ i = 1, \dots, n.$$

Стандартизированные остатки:

$$\tilde{\varepsilon}_i = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{\hat{\sigma}}, \ i = 1, \dots, n.$$

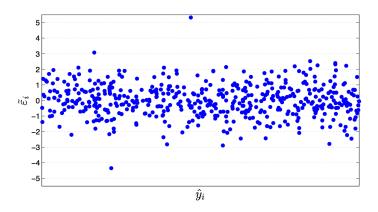
Визуальный анализ

Строятся графики зависимости $\tilde{\varepsilon}_i$ от \hat{y}_i , $x_{ij}, j=1,\ldots,k,$ i.

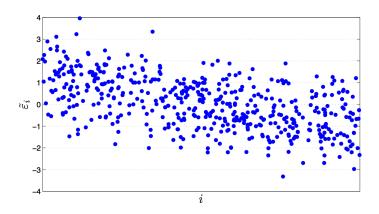


Визуальный анализ

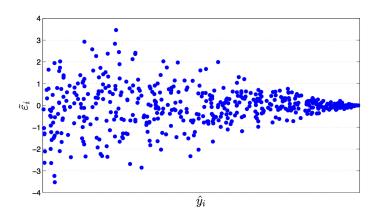
Линейные модели



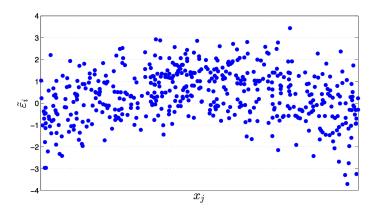
Возможно, присутствуют выбросы



В данных имеется тренд



Гетероскедастичность



Стоит добавить квадрат признака x_j

Формальные критерии

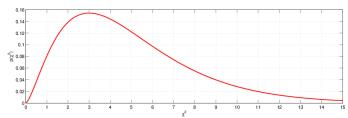
- Проверка нормальности критерий Шапиро-Уилка, qqplot.
- Проверка несмещённости: если остатки нормальны критерий Стьюдента, нет — непараметрический критерий.
- Проверка гомоскедастичности: критерий Бройша-Пагана.

нулевая гипотеза: $H_0 \colon \mathbb{D}\varepsilon_i = \sigma^2$ альтернатива: $H_1 \colon H_0$ неверна

статистика: $LM=nR_{\hat{arepsilon}^2}^2,~R_{\hat{arepsilon}^2}^2$ — коэффициент детерминации

при регрессии квадратов остатков на признаки

нулевое распределение: χ_k^2



Гетероскедастичность может быть следствием недоопределения модели.

Последствия гетероскедастичности:

- ullet МНК-оценки eta и R^2 остаются несмещёнными и состоятельными
- нарушаются предположения критериев Стьюдента и Фишера и методов построения доверительных интервалов для σ и β (независимо от объёма выборки)

Варианты:

- переопределить модель, добавить признаки, преобразовать отклик
- использовать модифицированные оценки дисперсии коэффициентов

Пусть значения отклика y_1, \ldots, y_n положительны. Если $\frac{\max y_i}{\min y_i} > 10$, стоит рассмотреть возможность преобразования y. В каком виде его искать?

Часто полезно рассмотреть преобразования вида y^λ , но оно не имеет смысла при $\lambda=0.$

Вместо него можно рассмотреть семейство преобразований

$$W = \begin{cases} (y^{\lambda} - 1) / \lambda, & \lambda \neq 0, \\ \ln y, & \lambda = 0. \end{cases}$$

но оно сильно варьируется по λ .

Вместо него можно рассмотреть семейство преобразований

$$V = \begin{cases} (y^{\lambda} - 1) / (\lambda \dot{y}^{\lambda - 1}), & \lambda \neq 0, \\ \dot{y} \ln y, & \lambda = 0, \end{cases}$$

где $\dot{y} = (y_1 y_2 \dots y_n)^{1/n}$ — среднее геометрическое наблюдений отклика.

Метод Бокса-Кокса

Процесс подбора λ :

- ① выбирается набор значений λ в некотором интервале, например, (-2,2);
- ② для каждого значения λ выполняется преобразование отклика V, строится регрессия V на X, вычисляется остаточная сумма квадратов $RSS(\lambda)$;
- ② строится график зависимости $RSS(\lambda)$ от λ , по нему выбирается оптимальное значение λ ;
- ullet выбирается ближайшее к оптимальному удобное значение λ (например, целое или полуцелое);
- f o строится окончательная регрессионная модель с откликом y^λ или $\ln y$.

Доверительный интервал для λ определяется как пересечение кривой $RSS\left(\lambda\right)$ с линией уровня $\min_{\lambda}RSS\left(\lambda\right)\cdot e^{\chi_{1,1-\alpha}^{2}/n}.$ Если он содержит единицу, возможно, не стоит выполнять преобразование.

Устойчивая оценка дисперсии Уайта

Если не удаётся избавиться от гетероскедастичности, при анализе моделей (дальше) можно использовать устойчивые оценки дисперсии. White's heteroscedasticity-consistent estimator (HCE):

$$\mathbb{D}\left(\left.\hat{\beta}\right|X\right) = \left(X^TX\right)^{-1}\left(X^T\operatorname{diag}\left(\hat{\varepsilon}_1^2,\ldots,\hat{\varepsilon}_n^2\right)X\right)\left(X^TX\right)^{-1}.$$

Асимптотика устойчивой оценки:

$$\sqrt{n} \left(\beta - \hat{\beta} \right) \xrightarrow{d} N \left(0, \Omega \right),$$

$$\hat{\Omega} = n \left(X^T X \right)^{-1} \left(X^T \operatorname{diag} \left(\hat{\varepsilon}_1^2, \dots, \hat{\varepsilon}_n^2 \right) X \right) \left(X^T X \right)^{-1}.$$

Другие устойчивые оценки дисперсии

Линейные модели

Элементы диагональной матрицы могут задаваться разными способами:

$$\begin{array}{lll} \text{const} & \hat{\sigma}^2 \\ \text{HC0} & \hat{\varepsilon}_i^2 \\ \text{HC1} & \frac{n}{n-k} \hat{\varepsilon}_i^2 \\ \text{HC2} & \frac{\hat{\varepsilon}_i^2}{1-h_i} \\ \text{HC3} & \frac{\hat{\varepsilon}_i^2}{(1-h_i)^2} \\ \text{HC4} & \frac{\hat{\varepsilon}_i^2}{(1-h_i)^{\min} \left(4, \frac{nh_i}{k}\right)} \end{array}$$

const — случай гомоскедастичной ошибки,

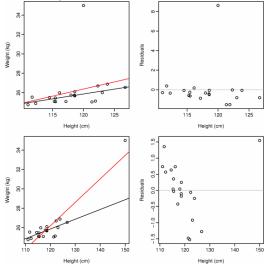
HC0 — оценка Уайта,

НС1-НС3 — модификации МакКиннона-Уайта,

НС4 — модификация Крибари-Нето.

B python: $model.get_robustcov_results()$

Регрессия сильно подстраивается под далеко стоящие наблюдения.



Расстояние Кука — мера воздействия i-го наблюдения на регрессионное уравнение:

$$D_{i} = \frac{\sum_{j=1}^{n} (\hat{y}_{j} - \hat{y}_{j(i)})^{2}}{RSS(k+1)} = \frac{\hat{\varepsilon}_{i}^{2}}{RSS(k+1)} \frac{h_{i}}{(1 - h_{i})^{2}},$$

 $\hat{y}_{j(i)}$ — предсказания модели, настроенной по наблюдениям $1,\dots,i-1,i+1,\dots,n,$ для наблюдения j; h_i — диагональный элемент матрицы $H=X\left(X^TX\right)^{-1}X^T$ (hat matrix).

Варианты порога на D_i :

- $D_i = 1$;
- $D_i = 4/n$;
- $D_i = 3\bar{D}$;
- ullet визуально по графику зависимости D_i от \hat{y}_i .

$$1, \dots, n$$
 — объекты; x_1, \dots, x_k — предикторы; y — отклик;

$$X = \begin{pmatrix} x_{10} = 1 & x_{11} & \dots & x_{1k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n0} = 1 & x_{n1} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix}; \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix};$$

регрессионная модель:

$$\mathbb{E}\left(y\left|X\right.\right) \equiv \mu = f\left(x_1, \dots, x_k\right);$$

линейная регрессионная модель:

$$\mu = X\beta;$$

обобщённая линейная регрессионная модель (GLM):

$$g(\mu) = X\beta, \quad \mu = g^{-1}(X\beta),$$

g(x) — связующая функция — позволяет ограничить диапазон предсказываемых для μ значений.

Обобщённая линейная модель

В обычной линейной модели используется предположение о нормальности отклика:

$$y | X \sim N(X\beta, \sigma^2)$$
.

В обобщённой линейной модели распределение y берётся из экспоненциального семейства:

$$f(y, \theta, \phi) = \exp\left(\frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y, \phi)\right).$$

	$Pois(\lambda)$	Bin(N,p)	$N\left(\mu,\sigma^2\right)$
$a\left(\phi\right)$	1	1	σ^2
$b\left(heta ight)$	e^{θ}	$n \ln \left(1 + e^{\theta}\right)$	$\theta^2/2$
$c\left(y,\phi\right)$	$\ln y!$	$\ln C_n^y$	$\frac{1}{2}\left(\frac{y^2}{\phi} + \ln\left(2\pi\phi\right)\right)$
$g\left(x\right)$	$\ln x$	$\ln \frac{x}{1-x}$	x
$g^{-1}\left(x\right)$	$e^x \in [0, \infty)$	$\frac{e^x}{1+e^x} \in [0,1]$	$x \in \mathbb{R}$

$\hat{\beta}$:

Линейные модели

- оценивается методом максимального правдоподобия;
- существует и единственна,
- находится численно
 - методом Ньютона-Рафсона (Newton-Raphson method)
 - методом оценок Фишера (Fisher scoring method)
- состоятельна, асимптотически эффективна, асимптотически нормальна.

Итерационный процесс вычисления $\hat{\beta}$ может не сойтись, если k слишком велико относительно n.

$$\mathbb{D}\hat{\beta} = I^{-1}\left(\hat{\beta}\right),\,$$

 $I\left(eta
ight)\in\mathbb{R}^{(k+1) imes(k+1)}$ — информационная матрица Фишера — матрица вторых производных логарифма правдоподобия $L\left(eta
ight)$.

Для отдельного коэффициента β_j :

$$\hat{\beta}_{j} \pm z_{1-\alpha/2} \sqrt{\left(I^{-1}\left(\hat{\beta}\right)\right)_{jj}}.$$

Для $g\left(\mathbb{E}\left(y\left|x_{0}\right.\right)\right)$ — преобразованного матожидания отклика на новом объекте x_{0} :

$$x_0^T \hat{\beta} \pm z_{1-\alpha/2} \sqrt{x_0^T I^{-1} \left(\hat{\beta}\right) x_0}.$$

Для матожидания отклика на новом объекте x_0 :

$$\left[g^{-1}\left(x_{0}^{T}\hat{\beta}-z_{1-\alpha/2}\sqrt{x_{0}^{T}I^{-1}\left(\hat{\beta}\right)x_{0}}\right),g^{-1}\left(x_{0}^{T}\hat{\beta}+z_{1-\alpha/2}\sqrt{x_{0}^{T}I^{-1}\left(\hat{\beta}\right)x_{0}}\right)\right].$$

Критерий Вальда

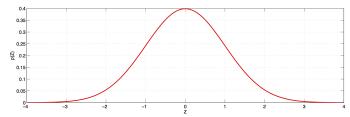
Линейные модели

нулевая гипотеза: $H_0: \beta_j = 0$

альтернатива: $H_1: \beta_j < \neq >0$ статистика: $T=\frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\left(I^{-1}(\hat{\beta})\right)_{jj}}}$

нулевое распределение:

N(0,1)



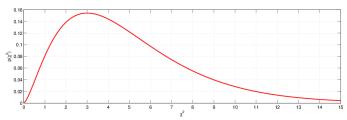
$$X_{n \times (k+1)} = \begin{pmatrix} X_1 \\ n \times (k+1-k_1) \end{pmatrix}; \quad \beta^T = \begin{pmatrix} \beta_1^T \\ (k+1-k_1) \times 1 \end{pmatrix}^T;$$

нулевая гипотеза: H_0 : $\beta_2 = 0$

альтернатива: $H_1: H_0$ неверна

статистика: $G = 2(L_r - L_{ur})$

нулевое распределение: $\chi^2_{k_1}$



Связь между критериями Вальда и отношения правдоподобия

При $k_1=1$ критерии Вальда и отношения правдоподобия не эквивалентны, в отличие от случая линейной регрессии, когда в этом случае достигаемые уровни значимости критериев Стьюдента и Фишера совпадают.

При больших n разница между критериями невелика, но в случае, когда их показания расходятся, рекомендуется смотреть на результат критерия отношения правдоподобия.

Меры качества моделей

Остаточная аномальность (residual deviance):

$$D_{res} = 2(L_{sat} - L_{fit})$$

Где L_{sat} – насыщенная (saturated) модель, имеющая число параметров равное числу объектов.

Аномальность — аналог RSS в линейной регрессии; при добавлении признаков она не может убывать.

Для сравнения моделей с разным числом признаков можно использовать информационные критерии:

4 AIC — информационный критерий Акаике:

$$AIC = -2L + 2(k+1);$$

 $oldsymbol{Q}$ AICc — он же с поправкой на случай небольшого размера выборки;

$$AICc = -2L + \frac{2k(k+1)}{n-k-1};$$

3 BIC (SIC) — байесовский (Шварца) информационный критерий:

$$BIC = -2L + \ln n (k+1).$$

- \bullet AIC < AICc
- ullet BIC > AIC при $n \geq 8$
- выбор модели по BIC приводит к состоятельным оценкам с ростом n вероятность выбора верного подмножества признаков стремится к 1
- ullet минимизация AIC асимптотически даёт модель с наименьшей среднеквадратичной ошибкой предсказания
- модели со значением информационного критерия на расстоянии двух единиц от значения лучшей модели можно считать неотличимыми от лучшей

Задача: оценить влияние одного или нескольких признаков на наступление какого-либо события и оценить его вероятность.

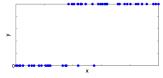
$$1,\dots,n$$
 — объекты; x_1,\dots,x_k — предикторы; y — отклик, $y_i\in\{0,1\}.$

Хотим найти такой вектор β , что

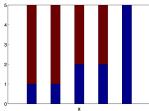
$$\mu = \mathbb{E}(y|X) = P(y = 1|X) \equiv \pi(x) \approx X\beta.$$

Примеры

Неповторяемый эксперимент со случайными уровнями фактора: построение кривой спроса, x_i — цена товара, y_i — согласие купить товар.



Повторяемый эксперимент с фиксированными уровнями фактора: разработка пестицидов, x_i — доза пестицида, y_i — смерть вредителя.



 \Longrightarrow логистическая регрессия может также использоваться для моделирования $y\in [0,1]$.

Линейная регрессия:

$$\pi\left(x\right) = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon.$$

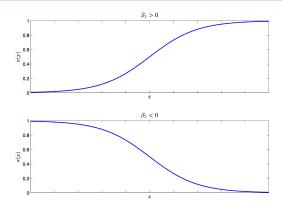
- ullet Оценка вероятности может выходить за [0,1].
- ullet В линейной регрессии $y=\mathbb{E}\left(y\left|x
 ight)+arepsilon$, и МНК-оценка eta хороша, когда $arepsilon\sim N\left(0,\sigma
 ight)$. Здесь же, если $y=\pi\left(x
 ight)+arepsilon$, то $arepsilon=1-\pi(x)$ или $arepsilon=\pi(x)$, и МНК-оценка будет плохой.

Логит:

$$g(x) = g(\pi(x)) = \ln \frac{\pi(x)}{1 - \pi(x)} = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon,$$
$$\hat{\pi}(x) = \frac{e^{\hat{g}(x)}}{1 + e^{\hat{g}(x)}} = \frac{e^{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x}}{1 + e^{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x}}.$$

Обобщённые линейные модели

Параметризация



- $\hat{\pi}(x) = q^{-1}(\beta_0 + \beta_1 x)$ принимает значения из [0, 1];
- ullet изменения на краях диапазона значений x приводят к меньшим изменениям $\pi(x)$: x годовой доход, y покупка автомобиля,

$$\pi \left(10\,000\,000 + 200\,000\right) - \pi \left(10\,000\,000\right) < \pi \left(500\,000 + 200\,000\right) - \pi \left(500\,000\right).$$

Отношение шансов

Линейные модели

Пусть $y \sim Ber(p)$, тогда шансы (odds) события y = 1:

$$ODDS = \frac{p}{1 - p}.$$

Если $y_1 \sim Ber(p_1), \ y_2 \sim Ber(p_2)$, то отношение шансов (odds ratio) события $y_1=1$ по сравнению с событием $y_2=1$:

$$OR = \frac{p_1/(1-p_1)}{p_2/(1-p_2)}.$$

Серд. заболевания	Возраст	≥ 55	< 55
есть		21	22
нет		6	51

$$OR = \frac{21/6}{22/51} \approx 8.1.$$

$$\hat{g}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x \iff \frac{p}{1-p} = e^{\hat{\beta}_0} (e^{\hat{\beta}_1})^x$$

Пусть x=[возраст $\geq 55]$, y=[есть сердечные заболевания] . По \hat{eta}_1 легко оценить отношение шансов получения заболевания пожилыми людьми:

$$\widehat{OR} = e^{\hat{\beta}_1}.$$

Пусть x= возраст, y= [есть сердечные заболевания] . $e^{\hat{eta}_1}$ имеет смысл мультипликативного прироста риска получения заболевания при увеличении возраста на 1 год.

ММП:

Линейные модели

$$P(x_{i}, 1) = \pi(x_{i}),$$

$$P(x_{i}, 0) = 1 - \pi(x_{i}),$$

$$l(\beta) = \prod_{i=1}^{n} \pi(x_{i})^{y_{i}} (1 - \pi(x_{i}))^{1-y_{i}},$$

$$L(\beta) = \ln l(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_{i} \ln \pi(x_{i}) + (1 - y_{i}) \ln (1 - \pi(x_{i}))),$$

$$\hat{\beta} = \beta L(\beta).$$

Информационная матрица Фишера:

$$I\left(\hat{\beta}\right) = X^{T}VX,$$

$$V = \operatorname{diag}\left(\hat{\pi}\left(x_{i}\right)\left(1 - \hat{\pi}\left(x_{i}\right)\right)\right).$$

Проблемы настройки параметров

Если матрица X вырождена, некоторые коэффициенты модели не будут определены.

Если наблюдения y=0 и y=1 линейно разделимы в пространстве X, то:

- в теории коэффициенты бесконечно возрастают
- на практике коэффициенты и их дисперсии получаются большими, а почти все вероятности в обучающей выборке близки к 0 или 1.

Можно использовать регуляризацию Фирта. Функция меток исходной модели для коэффициента β_j :

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \pi(x_i)) x_{ij}.$$

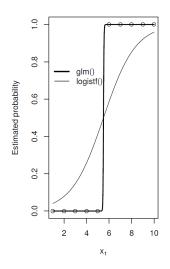
Регуляризованная версия:

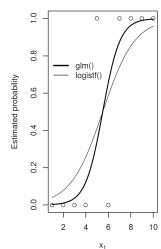
$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \pi(x_i) + h_i (0.5 - \pi(x_i))) x_{ij},$$

 h_i — диагональный элемент hat matrix:

$$H = V^{1/2} X \left(X^T V X \right)^{-1} X^T V^{1/2}.$$

Проблемы настройки параметров





Для отдельного коэффициента β_j :

$$\hat{\beta}_j \pm z_{1-\alpha/2} \sqrt{\left(I^{-1}\left(\hat{\beta}\right)\right)_{jj}}.$$

Для $g(x_0)$ — логита нового объекта x_0 :

$$x_0^T \hat{\beta} \pm z_{1-\alpha/2} \sqrt{x_0^T I^{-1} \left(\hat{\beta}\right) x_0}.$$

Для вероятности y=1 при $x=x_0$:

$$\left[\frac{e^{x_0\hat{\beta}-z_{1-\alpha/2}\sqrt{x_0^TI^{-1}(\hat{\beta})x_0}}}{1+e^{x_0\hat{\beta}-z_{1-\alpha/2}\sqrt{x_0^TI^{-1}(\hat{\beta})x_0}}}, \frac{e^{x_0\hat{\beta}+z_{1-\alpha/2}\sqrt{x_0^TI^{-1}(\hat{\beta})x_0}}}{1+e^{x_0\hat{\beta}+z_{1-\alpha/2}\sqrt{x_0^TI^{-1}(\hat{\beta})x_0}}}\right].$$

Линейность логита

Линейные модели

Проверка линейности логита по признакам — аналог визуального анализа остатков в обычной линейной регрессии.

Методы анализа линейности логита:

- сглаженные диаграммы рассеяния;
- дробные полиномы.

Сглаженные диаграммы рассеяния (smoothed scatterplots)

Рассмотрим оценку логита, полученную ядерным сглаживанием по x_j :

$$\bar{y}_{sm}\left(x_{ji}\right) = \frac{\sum\limits_{l=1}^{n} y_{i} K\left(\frac{x_{ji} - x_{li}}{h}\right)}{\sum\limits_{l=1}^{n} K\left(\frac{x_{ji} - x_{li}}{h}\right)},$$

$$\bar{l}_{sm}\left(x_{ji}\right) = \ln \frac{\bar{y}_{sm}\left(x_{ji}\right)}{1 - \bar{y}_{sm}\left(x_{ji}\right)}.$$

График функции $\bar{l}_{sm}\left(x_{j}\right)$ должен быть похож на прямую.

Если логит нелинеен по признаку, можно попробовать добавлять в модель его осмысленные степени и проверять их значимость.

В автоматическом режиме это можно делать с помощью дробных полиномов.

- $lue{1}$ Настраиваются модели с заменой x_i на допустимые степени признака x_i , например, из множества $S = \{-2, -1, -0.5, 0, 0.5, 1, 2, 3\}$. Выбирается степень, максимизирующая правдоподобие.
- $oldsymbol{2}$ Настраиваются модели с заменой x_i на двухкомпонентный полином x_i вида $\beta_{i_1}x_i^{p_1}+\beta_{j_2}x_i^{p_2}, \quad p_1,p_2\in S$ (если $p_1=p_2$, то берётся $\beta_{i_1} x_i^{p_1} + \beta_{i_2} x_i^{p_1} \ln x_i$). Выбираются степени, максимизирующие правдоподобие.
- Если модель с полиномом второй степени значимо не лучше, чем линейная, используется линейная модель.
- Если модель с полиномом второй степени значимо не лучше, чем с полиномом первой степени, используется модель с полиномом первой степени, иначе — с полиномом второй.

Содержательный отбор признаков

Линейные модели

- ullet Если признаков достаточно много (например, больше 10), желательно сделать их предварительный отбор, основанный на значимости в однофакторной логистической регрессии. Для дальнейшего рассмотрения остаются признаки, достигаемый уровень значимости которых не превышает 0.25.
- Отроится многомерная модель, включающая все отобранные на шаге 1 признаки. Проверяется значимость каждого признака, удаляется небольшая группа незначимых признаков. Новая модель сравнивается со старой с помощью критерия отношения правдоподобия.
- К признакам модели, полученной в результате циклического применения шагов 2 и 3, по одному добавляются удалённые признаки. Если какой-то из них становится значимым, он вносится обратно в модель.

- Для непрерывных признаков полученной модели проверяется линейность логита. В случае обнаружения нелинейности признаки заменяются на соответствующие полиномы.
- Исследуется возможность добавления в полученную модель взаимодействий факторов. Добавляются значимые интерпретируемые взаимодействия.
- **6** Проверяется адекватность финальной модели: близость y и \hat{y} ; малость вклада наблюдений (x_i, y_i) на каждом объекте i в \hat{y} .

Порог классификации

Как по $\pi(x)$ оценить y?

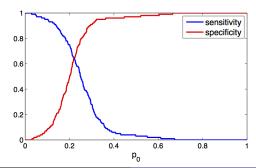
$$y = \left[\pi\left(x\right) \ge p_0\right].$$

Чаще всего берут $p_0=0.5$, но можно выбирать по другим критериям, например, для достижения заданных показателей чувствительности или специфичности.

Пример: эффективность терапии для наркозависимых, $p_0 = 0.5$:

\hat{y}	1	0
1	16	11
0	131	417

Чувствительность: $\frac{16}{16+131} \approx 10.9\%$. Специфичность: $\frac{417}{11+417} \approx 97.4\%$.



Остатки Пирсона:

$$r_i = \frac{y_i - \hat{\pi}(x_i)}{\sqrt{\hat{\pi}(x_i)(1 - \hat{\pi}(x_i))}}.$$

Аналог расстояния Кука:

$$\Delta \hat{\beta}_i = \frac{r_i^2 h_i}{(1 - h_i)^2}.$$

Обобщённые линейные модели

Требования к решению задачи методом линейной регрессии

- визуализация данных, анализ распределения признаков (оценка необходимости трансформации), оценка наличия выбросов;
- оценка необходимости преобразования отклика и его поиск методом Бокса-Кокса;
- визуальный анализ остатков;
- проверка гипотез об остатках: нормальность, несмещённость, гомоскедастичность;
- отбор признаков с учётом множественной проверки гипотез и возможной гетероскедастичности;
- анализ необходимости добавления взаимодействий и квадратов признаков;
- расчёт расстояний Кука, возможное удаление выбросов, обновление модели;
- выводы.

Требования к решению задачи методом логистической регрессии

- визуализация данных, оценка наличия выбросов, анализ таблиц сопряжённости по категориальным признакам;
- содержательный отбор признаков: выбор наилучшей линейной модели, оценка линейности непрерывных признаков по логиту, анализ необходимости добавления взаимодействий, проверка адекватности финальной модели (анализ влиятельных наблюдений, классификация);
- выводы.

Линейные модели

- линейная регрессия в целом Wooldridge (много примеров, без матричной алгебры);
- критерий Давидсона-Маккиннона (Davidson-MacKinnon test) Davidson;
- множественная оценка значимости коэффициентов Bretz, 4.4;
- преобразование Бокса-Кокса (Box-Cox transformation) Дрейпер, гл. 14;
- устойчивые оценки дисперсии White, MacKinnon, Cribari-Neto;
- расстояние Кука (Cook's distance) Cook.

Дрейпер Н.Р., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ, 2007.

Кобзарь А.И. Прикладная математическая статистика, 2006.

Bretz F., Hothorn T., Westfall P. Multiple Comparisons Using R, 2010.

Cook D.R., Weisberg S. Residuals and influence in regression, 1982.

Литература

Cribari-Neto F. (2004). Asymptotic inference under heteroskedasticity of unknown form. Computational Statistics & Data Analysis, 45(2), 215–233.

Davidson R., MacKinnon J. (1981). Several Tests for Model Specification in the Presence of Alternative Hypotheses. Econometrica, 49, 781-793.

Freedman D.A. A Note on Screening Regression Equations. The American Statistician, 37(2), 152-155.

MacKinnon J., White H. (1985). Some heteroskedasticity-consistent covariance matrix estimators with improved finite sample properties. Journal of Econometrics, 29, 305–325.

White H. (1980). A heteroskedasticity-consistent covariance matrix estimator and a direct test for heteroskedasticity. Econometrica: Journal of the Econometric Society, 48(4), 817–838.

Wooldridge J. Introductory Econometrics: A Modern Approach, 2016.