Яндекс

Skoltech
Skolkovo Institute of Science and Technology

Линейная регрессия. Выбор модели.

ПМИ ФКН ВШЭ, 23 ноября 2019 г.

Денис Деркач, Алексей Артёмов

ФКН ВШЭ

Оглавление

Мотивация

Линейная регрессия: основные модели

Мы можем записать основную (общую) линейную модель (General Linear Model):

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

- Y - вектор наблюдаемых зависимых переменных (откликов);
- X - матрица независимых переменных (дизайн эксперимента);
- β - матрица, включающая параметры, представляющие интерес для исследования;
- ε - матрица случайных ошибок.

NB: случайные ошибки распределены нормально и не зависят друг от друга.

Применимость общих линейных моделей

Фактически:

$$y_i \sim N(\mu_i; \sigma)$$ - случайная часть,

$$\mathbb{E}(y_i) = \mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1,i} + \ldots + \beta_{p-1} x_{p-1,i}$$ - фиксированная часть.

Построение обобщённой модели

Что будет, если мы не можем утверждать:

- что случайные ошибки распределены нормально?
- что случайные ошибки не коррелируют?

Пример: регрессия с бинарными откликами

- Местная клиника отправила своим клиентам предложение сделать прививку от гриппа для защиты от ожидаемаой эпидемии.
- Через некоторое время у случайных 50 пациентов спросили сделали ли они прививку, при этом записывае информацию о возрасте и общем отношении к своему здоровью.
- Необходимо построить модель, которая предсказывает привит ли человек в зависимости от его возраста и отношения к здоровью.

Таким образом, мы говорим о модели, где $Y_i = \{0; 1\}$.

Регрессия с бинарными откликами: проблемы

Для каждого ответа у нас получается вероятностное распределение Бернулли с вероятностью успеха π_i:
$\mathbb{P}(Y_i = y_i) = \pi_i^{y_i}(1 - \pi_i)^(1 - y_i)$. То есть:

- среднее $\mu_i = \mathbb{E}(Y_i) = \pi_i$;
- дисперсия $\mathbb{V}ar(Y_i) = \sigma_i^2 = \pi_i(1 - \pi_i)$

Таким образом дисперсия коррелирует со средним, обычные уравнения регрессии не применимы!
Аналогичные выражения мы получим для n испытаний.

Регрессия с бинарными откликами: проблемы

Ещё одна проблема. Очевидная форма регрессии,

$$y_i = x_i\beta,$$

в левой части должна быть ограничена $(0; 1)$, правая часть же может расти неограниченно.

Идея: преобразование Logit

- Введём преобразование:

$$\text{logit}(\pi) = \log\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right) \in (-\infty; \infty);$$

- обратная функция:

$$\text{logit}^{-1}(x) = \frac{e^x}{1+e^x} \in (-1; 1);$$

- производная:

$$\frac{d}{d\pi}\text{logit}(\pi) = \frac{1}{\pi(1-\pi)} \sim \frac{1}{\mathbb{V}ar(\pi)}.$$

Logit, Probit и log-log

Вообще, существуют три популярных преобразования бинарной регрессии:

- Logit: $\text{logit}(\pi) = \log\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right)$;
- Probit: $\text{probit}(\pi) = \Phi^{-1}(\pi_i)$, Φ - функция распределения (cdf) нормальной величины;
- Log-log: $\eta_i = \log(-\log(1-\pi_i))$.

Каждая имеет свою интепретацию и применяется в специальных типах задач.

Logit, Probit и log-log

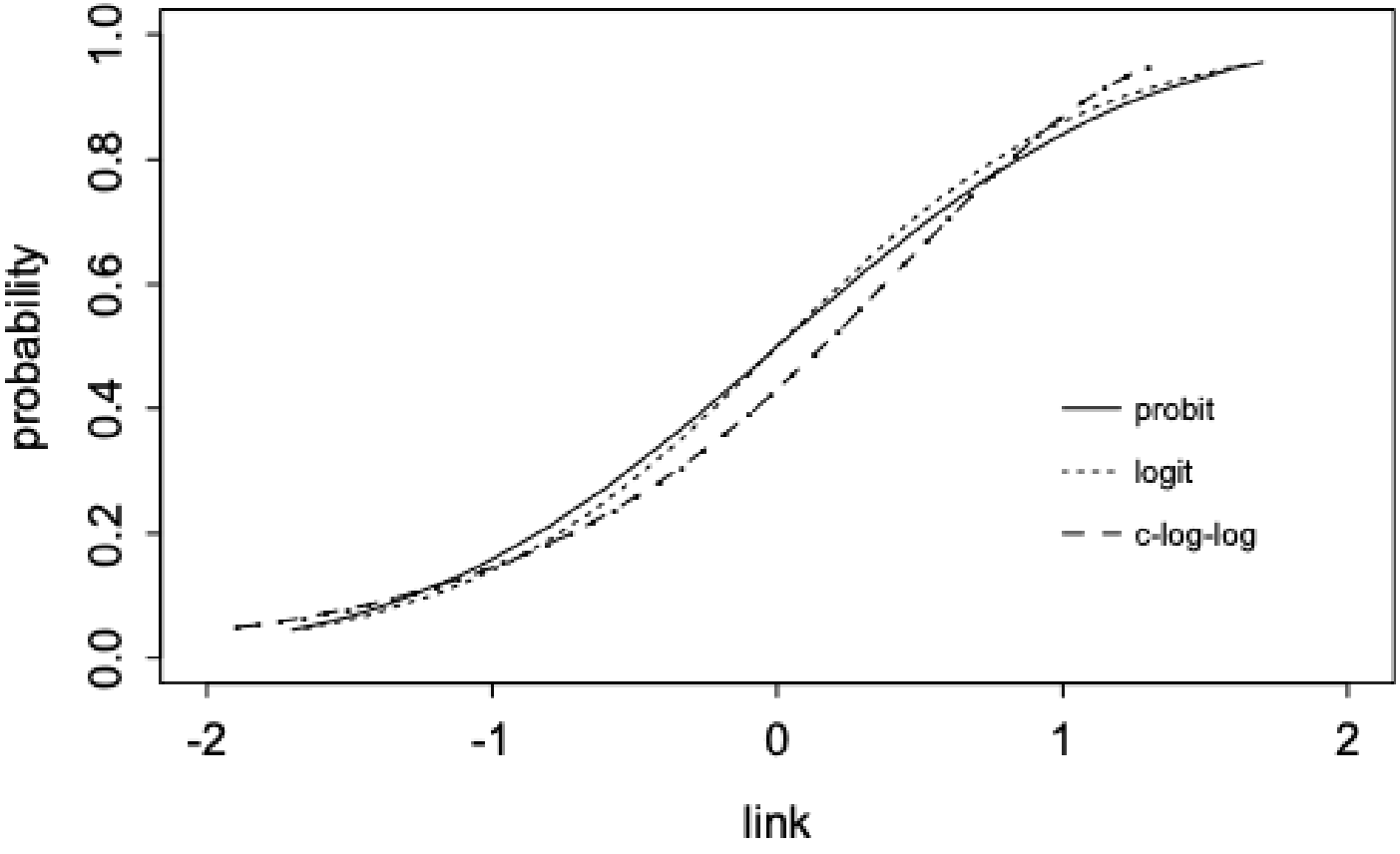


FIGURE 3.7: The Standardized Probit, Logit and C-Log-Log Links

Картинка отсюда.

Итоговая задача

Мы хотим максимизировать:

$$\mathcal{L}(\pi_i; Data) = \prod_{i=1}^{n} \pi_i^{Y_i}(1-\pi_i)^{1-Y_i}$$

При этом, используя logit получаем:

$$\pi_i = \frac{e^{\beta_0+\beta_1 X_i}}{1+e^{\beta_0+\beta_1 X_i}}$$

Подставляя в первое уравнение, получим:

$$\mathcal{L}((\beta_0; \beta_1); Data) = \prod_{i=1}^{n} \left(\frac{(e^{\beta_0+\beta_1 X_i})^{Y_i}}{1+e^{\beta_0+\beta_1 X_i}} \right)$$

К сожалению, прямое нахождение экстремумов у такой функции правдоподобия затруднено, потому приходится использовать итеративные процедуры.

Обобщённые линейные модели

Экспоненциальное семейство распределений

Определение

Семейство распределений $\{P_\theta : \theta \in \Theta\}$, $\Theta \subset \mathbb{R}^k$ называется (k-параметрическим) экспоненциальным семейством на $\mathbb{R}^q$, если существуют такие вещественнозначные функции:

- $\eta_1, \ldots, \eta_k$ и B от θ,
- $T_1, T_2, \ldots, T_k$ и h от $x \in \mathbb{R}^q$,

такие, что плотность вероятности этого семейства записывается:

$$p_\theta(x) = h(x) \exp\left[\sum_{i=1}^{k} (\eta_i(\theta) T_i(x) - B(\theta))\right]$$

Экспоненциальное семейство распределений

Линеаризуя, получим для скалярных x и θ:

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

где ϕ зависит от конкретного распределения.

Пример экспоненциального семейства

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

Нормальное распределение можно переписать в нужной форме:

$$p_{\theta,\phi}(x) = \exp\left[\frac{x\theta - \theta^2/2}{\phi} - \frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\phi} + \ln(2\pi\phi)\right)\right].$$

То есть,

$$a(\phi) = \phi; b(\theta) = \theta^2/2; c(y;\phi) = -\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\phi} + \ln(2\pi\phi)\right).$$

Другие экспоненциальные семейства

Table 15.9 Functions $a(\cdot)$, $b(\cdot)$, and $c(\cdot)$ for Constructing the Exponential Families

Family	$a(\phi)$	$b(\theta)$	$c(y, \phi)$
Gaussian	ϕ	$\theta^2/2$	$-\frac{1}{2}\left[y^2/\phi + \log_e(2\pi\phi)\right]$
Binomial	$1/n$	$\log_e(1+e^\theta)$	$\log_e\binom{n}{ny}$
Poisson	1	e^θ	$-\log_e y!$
Gamma	ϕ	$-\log_e(-\theta)$	$\phi^{-2}\log_e(y/\phi) - \log_e y - \log_e\Gamma(\phi^{-1})$
Inverse-Gaussian	ϕ	$-\sqrt{-2\theta}$	$-\frac{1}{2}\left[\log_e(\pi\phi y^3) + 1/(\phi y)\right]$

NOTE: In this table, n is the number of binomial observations, and $\Gamma(\cdot)$ is the gamma function.

Из John Fox, Applied Regression Analysis and Generalized Linear Models.

Свойства экспоненциальных семейств

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

- θ часто называется каноническим параметром, причём $g_c(\theta)$ — функция матожидания и не зависит от ϕ;
- ϕ называется дисперсионным параметром.

Заметим:

- $\mathbb{E}(X) = b'(\theta) = \mu$.
- $\mathbb{V}ar(X) = b''(\theta)a(\phi) = a(\phi)V(\mu)$, $V(\mu)$ - дисперсионная функция.

Обобщённые линейные модели: компоненты

Для $f(y;\theta)$, принадлежащему экспоненциальному семейству распределений:

- стохастическая (random) компонента:

$$y_i \sim f(y;\theta)$$

- фиксированный линейный предиктор (систематическая компонента):

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1,i} + \ldots + \beta_{p-1} x_{p-1,i}$$

- функция связи

$$g\left(\mathbb{E}(y_i)\right) = \eta_i.$$

Таким образом, вместо двух компонент общей линейной модели, у обобщённой линейной модели есть три компоненты.

Функция связи (link function)

Функция связи $g(\mu)$ используется разная в зависимости от распределения $f(y;\theta)$. Обычно предполагают, что $g(\mu)$ монотонна и дифференциируема в области разрешённых μ.
Количество распределений из экспоненциального семейства довольно мало, для каждого из них есть канонические функции связи.

Определение

Канонической функцией связи для экспонеициального семейства, g, называют функцию, которая связывает среднее μ и канонический параметр θ.

Заметим, так как $\mu = b'(\theta)$, то каноническая $g(\mu) = (b')^{-1}(\mu)$.

Резюме

В общей линейной модели, соотношение между $\mathbb{E}(y_i)$ и параметрами линейно.
В обобощённой линейной модели, соотношение между функцией от $\mathbb{E}(y_i)$ и параметрами линейно.

GLM для нормального распределения

Выпишем три компоненты GLM:

- $y_i \sim \mathcal{N}(\mu; \sigma)$ - случайная компонента.
- $\eta_i = \sum x_{ij}\beta_j$ - линейный предиктор.
- $g(\mu_i) = \mu_i$ - функция связи.

Тогда:

$$\mu_i = g(\mu_i) = \eta_i = \sum x_{ij}\beta_j.$$

Таким образом, общая линейная модель — частный случай обобщённой линейной модели.

Оптимизация в GLM

Метод наименьших квадратов

В общем случае GLM, у нас нет идентичных и одинаково распределённых остатков. Потому метод наименьших квадратов здесь также применять нельзя (вернее, его нужно модифицировать).
Из-за этого используют метод максимального правдоподобия.

Метод максимального правдоподобия

Вернёмся к примеру с бинарной регрессией:

$$\mathbb{E}[Y_i] = \pi_i = g^{-1}(\eta_i) = \frac{1}{1 + e^{-\eta_i}}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}; \mathbf{y}) &= \prod_{i=1}^{n} \exp\left\{ y_i \log\left(\frac{\pi_i}{1-\pi_i}\right) + \log(1-\pi_i) \right\} \\
\log \mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}; \mathbf{y}) &= \sum_{i=1}^{n} y_i \log\left(\frac{\pi_i}{1-\pi_i}\right) + \sum_{i=1}^{n} \log(1-\pi_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} y_i \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j - \sum_{i=1}^{n} \log\left(\exp\left\{ \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j \right\} + 1 \right)
\end{aligned}$$

Наблюдения

- Лог-правдоподобие строго вогнуто для канонической функции связи (в случае, если $\phi > 0$).
- Как следствие, ОМП сходится к единственному глобальному максимуму.
- В случае неканонической функции связи, это не так.

Оценка параметров GLM

$\hat{\beta}$:

- оценивается методом максимального правдоподобия;
- существует и единственна,
- находится численно,
- состоятельна, асимптотически эффективна, асимптотически нормальна.

Способы оптимизации

- метод Ньютона-Рафсона;
- метод IRLS (итерационный взвешенный метод наименьших квадратов);
- метод скоринга Фишера;
- стохастические методы;
- оценка максимального квази-правдободобия.

В случае использования канонической функции связи первые три эквивалентны, иначе сказывается разница в том, какой гессиан используется в методе (см. обсуждение здесь).

IRLS в GLM

Алгоритм:

1. инициализировать значения $\hat{\mu}_i$ и $\hat{\beta}_j$ (для бинарной регрессии необходимо брать значения около 0 или 1 в зависимости от Y_i);
2. оценить значение $Z_i = g(\hat{\mu}_i) + g'(\hat{\mu})(Y_i - \hat{\mu}_i)$;
3. использовать веса $W^{-1} = g^2(\hat{\mu})V(\hat{\mu}_i)$ и применить обычную регрессию Z по X, получить $\hat{\beta}_j$;
4. получить новую оценку $\hat{\mu} = g^{-1}(\sum X_{ij}\beta_j)$;
5. повторить шаги 2-4 до сходимости.

Доверительные интервалы $\hat{\beta}$

Ассимтотически, мы можем использовать:

$$\hat{\beta} \sim \mathcal{N}(\beta, i^{-1}),$$

где $i(\beta) = \phi^{-1} X^T W X$, то есть мы можем использовать последний шаг IRLS для оценки матрицы ковариаций:

$$\widehat{\mathrm{cov}}(\hat{\beta}) = \phi (X^T \hat{W} X)^{-1}.$$

Для некоторых семейств ϕ необходимо оценивать отдельно.

Оценка ϕ

К сожалению, оценка ϕ с помощью ОМП затруднена. Потому мы используем метод моментов, который даёт нам оценку:

$$\hat{\phi} = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{n} \frac{(Y_i - \hat{\mu}_i)^2}{V(\hat{\mu}_i)},$$

где n - количество точек, p - количество параметров.

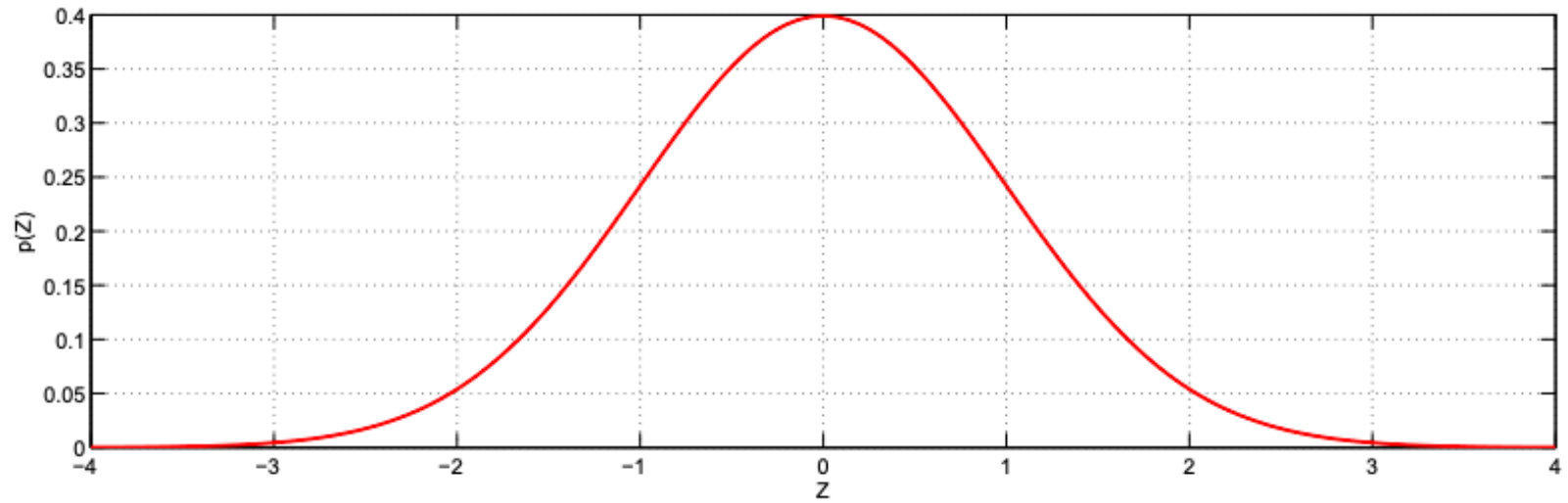
Тест Вальда для коэффициентов GLM

нулевая гипотеза: $H_0 : \beta_j = 0;$

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

статистика: $T = \dfrac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\left(I^{-1}(\hat{\beta})\right)_{jj}}};$

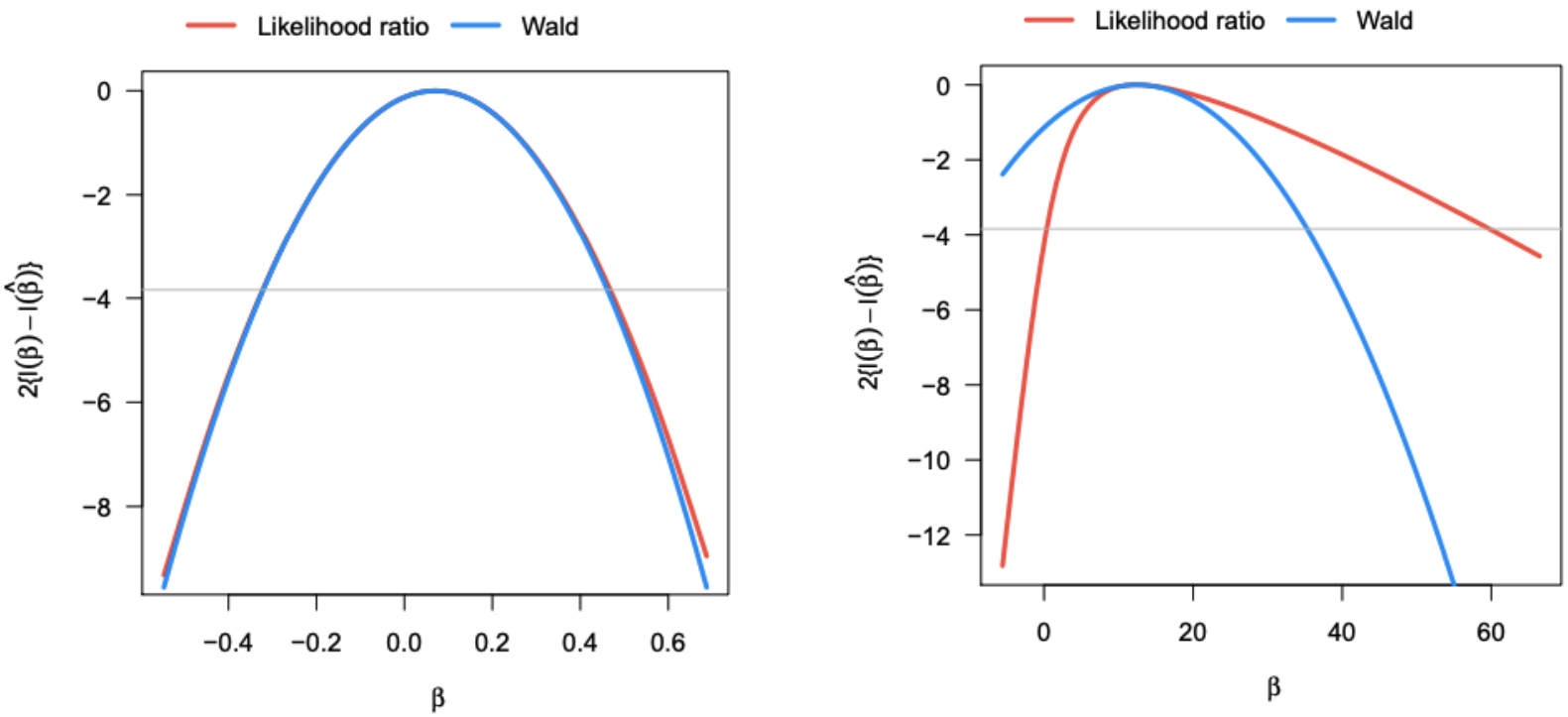
$T \sim N(0,1)$ при H_0.



Тест Вальда и отношение правдопоподобий

- Критерии Вальда и отношения правдоподобия не эквивалентны.
- При больших n разница между критериями невелика, но в случае, когда их показания расходятся.
- Вспомним, что мы в реальности получаем ОМП.

Сравнение Вальдовских интервалов и интервалов из функции правдоподобия



Слева направо увеличение количества примеров в выборке. В правой картинке теста Вальда не искючает 0, а тест отношения правдоподобий исключает.

Оценка качества GLM

Disclaimer: общий тест χ^2

- Часто используется в статпакетах.
- Это тест отношения правдоподобия полученной модели по сравнению с моделью только с постоянным коэффициентом β_0.
- Как и все прочие выводы на основании модельных статистик, тест отношения правдоподобия обоснован в предположении, что модель существует.
- Единственное, что можно сказать при значимом общем χ^2 тесте, что, если модель верна, некоторые из ее коэффициентов ненулевые (насколько это полезно, решайте сами).
- Простое правило: не используйте тест χ^2 для оценки качества.
- Или хотя бы не используйте χ^2 в сравнениях.

Коэффициент детерминации

Очень хочется использовать коэффициент детерминации, который мы использовали для простых линейных моделей. В GLM существуют два подхода:

- через квадрат коэффициента корреляций между Y_i и $\hat{Y}_i$.
- напрямую, по определению.

К сожалению, коэффициент детерминации плохо определяет качество для ненормальных данных (например, R^2 для $Y_i = 0$ и $\hat{Y}_i = 0.9$ или $\hat{Y}_i = 0.99$ почти не отличаются, а $\mathbb{P}(Y_i - 0)$ отличаются в 10 раз).

Девианса (Аномальность)

Это приводит к идее осуществлять оценку качества через правдоподобие.

Определение

Девиансом обобщённой линейной модели является:

$$D(\mu, Y) = -2 \log \mathcal{L}(\mu, Y) + -2 \log \mathcal{L}(Y, Y)$$

где μ - оценка Y.

Девианса строится для оптимизации методом скоринга Фишера.

Анализ девианса: шкала

Для получения шкалы рассматривают два граничных случая:

- Насыщенная модель — каждое уникальное наблюдение (сочетание значений предикторов) описывается одним из n параметров.
- Предложенная модель — модель, подобранная в данном анализе.
- Нулевая модель — все наблюдения описываются одним параметром (средним).

Степени свободы:

$df_{\text{saturated}} = 0;\ df_{\text{model}} = n - p_{\text{model}};\ df_{\text{null}} = n - 1;$

Девианса (deviance)

Девианса - мера различия правдоподобий двух моделей:

- Остаточная девианса

$$D_{\text{residual}} = 2(\log \mathcal{L}_{\text{saturated}} - \log \mathcal{L}_{\text{model}})$$

- Нулевая аномальность

$$D_{\text{null}} = 2 \log \mathcal{L}_{\text{saturated}} - \log \mathcal{L}_{\text{null}}$$

Сравнение нулевой и остаточной аномальности позволяет судить о статистической значимости модели в целом (при помощи теста отношения правдоподобий).

Анализ аномальности

› Для тестирования значимости модели целиком:

$$LRT = 2\log\left(\frac{\log\mathcal{L}_{\text{model}}}{\log\mathcal{L}_{\text{null}}}\right) = D_{\text{null}} - D_{\text{residual}}$$

$$df = df_{\text{null}} - df_{\text{model}} = p_{\text{model}} - 1$$

› Для тестирования значимости предикторов:

$$LRT = 2\log\left(\frac{\log\mathcal{L}_{\text{model}}}{\log\mathcal{L}_{\text{reduced}}}\right) = D_{\text{full}} - D_{\text{residual}}$$

$$df = df_{\text{full}} - df_{\text{model}} = p_{\text{model}} - p_{\text{reduced}}$$

В дальнейшем происходит сравнение с χ^2 с df степенями свободы.
NB: применение похоже на R^2

Эффективная остаточная девианса

По анологии с R^2 можно эффективно учесть количество степеней свободы:

$$D = 1 - \frac{D/(n-p)}{D_{null}/(n-1)} \sim \chi^2_{n-p}$$

Очень приближённо, мы можем сравнить две девиансы с помощью теста Вальда:

$$W = \frac{D(R) - D(F)}{\hat{\phi}} \sim \chi^2_{df\,R - df\,F}$$

В принципе, в анализе мы можем использовать X^2 Пирсона.

Анализ остатков

Для проверки качества регрессий используют также анализ остатков.

- остатки Пирсона (для логрегрессии):

$$r_i = \frac{y_i - \pi_i}{\sqrt{\hat{\pi}_i(1 - \hat{\pi}_i)}}$$

- остатки девианса (для логрегрессии):

$$d_i = s_i \sqrt{-2(y_i \log \hat{\pi}_i + (1 - y_i) \log(1 - \hat{\pi}_i))}$$

  Они составляют общую девиансу $D = \sum d^2$ и Пирсоновский $X^2 = \sum r^2$, которые распределены по χ^2 (если их стандартизовать).

ROC

В специализированном случае бинарной регрессии, мы можем использовать совпадение ROC кривых, построенных по предсказаниям логрегрессии. В таком случае нам необходимо прводить тесты на равенство AUC (см. семинар).

Резюме

- Обобщённые линейные модели добавляют возможность рассматривать данные, в которых зависмые переменные являются ненормальными.
- Важным частным случаем является обобщённая модель для бинарных откликов с канонической функцией связи logit - логистическая регрессия.
- Критерии качества определяются похожим способом с обычной линейной регрессией.
- Лучшим критерием качества всё ещё является визуальный анализ.