Vpliv kršenja predpostavk linearne regresije na njene rezultate Seminarska naloga pri predmetu Računsko zahtevne metode

Anja Žavbi Kunaver in Vesna Zupanc

2021-01-02

Kazalo vsebine

${f Uvod}$
Teoretični del
Posplošeni linearni modeli
Linearna regresija
Metoda najmanjših kvadratov (MNK)
Metoda največjega verjetja (MNV)
Funkcija glm()
Bootstrap?
Ocenjevanje intervalov zaupanja
Generiranje podatkov
Predstavitev rezultatov
Ugotovitve
Viri
Priloge

Uvod

Obravnavana metoda je linearna regresija in zanima nas, kako kršenje predpostavk (konkretneje nenormalna porazdelitev ostankov in močna korelacija med pojasnjevalnimi spremenljivkami) vpliva na njene rezultate. Preverjali bomo vpliv različnih dejavnikov na pristranost in širino intervalov zaupanja regresijskih koeficientov. Za izračun intervalov zaupanja bomo uporabili različne metode, ki smo jih spoznali v poglavjih simulacij in metod samovzorčenja. Tako bomo primerjali pokritosti in širine različno ocenjenih intervalov zaupanja. Poleg tega bomo preverjali, če probleme kršenja predpostavk lahko (vsaj delno) odpravimo z uporabo posplošenih modelov.

Treba je še zapisat, kakšne rezultate pričakujeva. Najbolje, da kar tu narediva še en odstavek. Razmislit je potrebno tudi, kako bi se dalo rezultate izboljšati.

Teoretični del

Tu predstaviva metode, ki jih uporabljava ali primerjava. Poudarek je na predpostavkah in ostalih značilnostih, ki jih preverjava.

Naloga je osredotočena na linearno regresijo, ki spada pod posplošene linearne modele. Najprej so bolj splošno predstavljeni posplošeni linearni modeli, nato pa podrobneje model linearne regresije in metode, s pomočjo katerih lahko ocenjujemo regresijske koeficiente. V zadnjem delu tega poglavja so predstavljeni načini za izračun intervalov zaupanja regresijskih koeficientov.

Posplošeni linearni modeli

Posplošeni linearni mešani model izrazimo kot

$$Y = X\beta + Z\alpha + \epsilon$$
,

kjer je Y opazovani slučajni vektor, X matrika znanih vrednosti pojasnjevalnih spremenljivk, β neznan vektor regresijskih koeficientov (fiksni učinki), Z znana matrika, α vektor naključnih učinkov in ϵ vektor napak. α in ϵ sta neopazovana. Predpostavimo, da sta nekorelirana.

V matrični obliki model izgleda takole:

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & \dots & X_{1,p} \\ X_{2,1} & X_{2,2} & \dots & X_{2,p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ X_{n,1} & 0 & \dots & X_{n,p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Z_{1,1} & Z_{1,2} & \dots & Z_{1,q} \\ Z_{2,1} & Z_{2,2} & \dots & Z_{2,q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Z_{n,1} & Z_{n,2} & \dots & Z_{n,q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_q \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}.$$

Linearni mešani modeli se delijo na Gaussove ali normalne in ne-Gaussove. Pomembna predpostavka pri normalnih linearnih mešanih modelih je normalna porazdeljenost vektorja slučajnih učinkov $\alpha \sim N(0, \sigma^2 I_q)$ in vektorja slučajnih odstopanj $\epsilon \sim N(0, \tau^2 I_n)$, ki nista nujno enakih razsežnosti. Druga pomembna predpostavka je neodvisnost slučajnih vektorjev α in ϵ . Prednost uporabe nenormalnih linearnih mešanih modelov pred normalnimi je v tem, da so bolj fleksibilni za modeliranje (Maver, 2018, str. 6).

Linearna regresija

Linearna regresija je statistični model, ki ga v osnovni obliki lahko zapišemo kot:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i,$$

kjer so ϵ_i med seboj neodvisne slučajne spremenljivke, x_i pa dane vrednosti. Velja $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ za vsak i in tako $Y_i \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$. Model lahko razširimo na več linearnih parametrov:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i,$$

kjer so ϵ_i neodvisne enako porazdeljene slučajne spremenljivke, za $1 \leq i \leq n$.

Lahko ga zapišemo tudi v matrični obliki:

$$Y = X\beta + \epsilon$$
.

Ključne predpostavke linearnega regresijskega modela (Correlation and regression with R, 2016) so naslednje: Ta del o predpostavkah je še malo za uredit.

- 1.) Normalna porazdelitev: za katerokoli vrednost X je Y porazdeljena normalno.
- 2.) Homogenost variance (homoskedastičnost): varianca residualov je enaka za vse vrednosti X.
- 3.) Zveza med pojasnjevalno spremenljivko X in povprečjem odzivne spremenljivke Y je linearna.
- 4.) Opazovanja so med seboj neodvisna. V primeru kršenja te predpostavke je smiselno uporabiti posplošene linearne modele, običajno longitudinalni (vzdolžni) model.
- 5.) Med temeljne predpostavke regresijskega modela spada predpostavka, da med neodvisnimi spremenljivkami ni popolne kolinearnosti ali multikolinearnosti. Najbolj tipičen vzrok za kršenje te predpostavke je, da smo v model kot neodvisni vključili dve spremenljivki, med katerima obstaja močna linearna povezanost. Do multikolinearnosti pride tudi, če v model vključimo več spremenljivk kot je velikost vzorca. Na multikolinearnost posumimo, če se v modelu determinacijski koeficient izkaže za statistično značilnega, od regresijskih koeficientov pa nobeden.
- 6.) Medsebojna neodvisnost vrednosti slučajne spremenljivke ϵ prav tako spada med temeljne predpostavke linearnega regresijskega modela. Pravimo, da spremenljivke niso avtokorelirane oz. da v modelu ni avtokorelacije. To predpostavko zapišemo $Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$ za vsak $i \neq j$ (Pfajfar, 2018).

Pfajfar (2018) navaja naslednje predpostavke metode najmanjših kvadratov:

- linearnost regresijskega modela: $y = \beta_1 + \beta_2 x_i + u_i$
- ničelna povprečna vrednost u_i : $E(u_i) = 0$
- homoskedastičnost: $Var(u_i) = E(u_i^2) = \sigma^2$
- Odsotnost avtokorelacije: $cov(e_i, e_i|x_i, x_i) = 0; i \neq j$
- nekoreliranost med pojasnjevalnimi spremenljivkami in slučajno spremenljivko u: $Cov(x_2, u) = Cov(x_3, u) = \dots = Cov(x_k, u) = 0$
- število opazovanj mora presegati število ocenjenih parametrov oz. pojasnjevalnih spremenljivk: n>k
- Var(X) je končno pozitivno število
- pravilno specificiran regresijski model: vključene vse relevantne pojasnjevalne spremenljivke in izbrana ustrezna funkcijska oblika modela
- odsotnost popolne multikolinearnosti: $\lambda_1 X_1 + \lambda_2 X_2 + ... + \lambda_k X_k = 0$
- slučajna spremenljivka u je normalno porazdeljena: $u_i \sim N(0, \sigma_i^2)$. Posledično je odvisna spremenljivka y tudi normalno porazdeljena s.s.: $y_i \sim N(\beta_1 x_{1i} + ... + \beta_k x_{ki}, \sigma_i^2)$

Metoda najmanjših kvadratov (MNK)

Pri 16 letih jo je odkril nemški matematik Carl F. Gauss. Zaradi svojih lastnosti je najbolj razširjena metoda ocenjevanja regresijskih koeficientov (Pfajfar, 2018, str.53).

Pri MNK na primeru osnovnega regresijskega modela velikosti p=1 iščemo β_0 in $\beta 1$ tako, da bo vsota kvadratov ostankov najmanjša možna. Pri danih (x_i, y_i) torej iščemo

$$\min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2.$$

Metoda največjega verjetja (MNV)

Naj bodo $X_1, ..., X_n$ n.e.p. s.s., porazdeljene z gostoto $f_Y(x; \theta_1, ..., \theta_k)$. Funkcijo

$$L(\theta; x) = L(\theta_1, \dots, \theta_k; x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n f_Y(x_i; \theta_1, \dots, \theta_k)$$

imenujemo funkcija verjetja za vzorec velikosti n.

Za vsak vzorec x naj bo $\hat{\theta}(x)$ vrednost parametra, v katerem funkcija L doseže maksimum. Cenilka po MNV za parameter θ na osnovi vzorca X je $\hat{\theta}(X)$. Ta cenilka je pod ustreznimi predpostavkami dosledna, vendar ne nujno nepristranska.

MNV ima asimptotsko najmanjšo varianco (je učinkovita), kar sledi kot posledica neenakosti Cramer-Raa. V primeru diskretne porazdelitve je verjetje kar produkt verjetnosti:

$$L(x; \theta) = \prod_{i=1}^{n} P(X_i = x_i; \theta).$$

Za izpeljavo cenilke vektorja koeficientov si poglejmo primer osnovnega modela linearne regresije v matrični obliki $Y = X\beta + \epsilon$, kjer so

$$\begin{bmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & \dots & X_{1,p} \\ X_{2,1} & X_{2,2} & \dots & X_{2,p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ X_{n,1} & 0 & \dots & X_{n,p} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}.$$

Tu je matrika X dimenzije $n \times (p+1)$ in p število spremenljivk. Predpostavimo, da je matrika X polnega ranga in velja

$$\epsilon \sim N(0, \sigma^2 I_{n \times n}).$$

Cenilka, dobljena po MNV, je

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

Ta cenilka je nepristranska, saj velja

$$E(\hat{\beta}) = E((X^T X)^{-1} X^T Y) = (X^T X)^{-1} X^T E(Y) = (X^T X)^{-1} X^T X \beta = \beta.$$

Izpeljava variančno-kovariančne matrike:

$$var(\hat{\beta}) = var((X^T X)^{-1} X^T Y) = (X^T X)^{-1} X^T var(Y) X (X^T X)^{-1} =$$
$$= (X^T X)^{-1} X^T \sigma^2 I_{n \times n} X (X^T X)^{-1} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}.$$

Velja

$$\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sqrt{\sigma^2 (X^T X)_{ii}^{-1}}} \sim N(0, 1).$$

V primeru, ko je p=1, je ocena regresijskega koeficienta β_1 po metodah MVN in MNK enaka

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2}.$$

Funkcija glm()

V linearnem modelu $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + ... + \beta_p X_{ip} + \epsilon_i$ velja $E(Y_i) = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + ... + \beta_p X_{ip}$. Slednjo enačbo lahko z uporabo primerno definirane funkcije g posplošimo do

$$g(E(Y_i)) = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \dots + \beta_p X_{ip}.$$

Tu z indeksom i označujemo i-tega posameznika. Prejšnja enačba je poseben primer, kjer je g identiteta. Z uporabo funkcije glm() in znotraj primerno definirane funkcije g lahko generiramo več posplošenih linearnih modelov. Prednost te funkcije je tudi v tem, da lahko poleg normalne porazdelitve nastavimo še katero drugo porazdelitve ostankov (glm iz RDocumentation, 2020).

Bootstrap?

Ocenjevanje intervalov zaupanja

Načini, kako bova ocenjevali IZ. Lahko še prilagodiva, zaenkrat pa predlagam:

- naivni
- na podlagi standardnih napak
- obrnjeni

Na prosojnicah so zapisane glavne značilnosti posameznih IZ. Najbrž je dovoli, če zapiševa zelo na kratko

Generiranje podatkov

Natančen opis generiranja podatkov.

Fiksni parametri pri generiranju podatkov so sledeči:

- porazdelitev pojasnjevalnih spremenljivk: $X_j \sim Gamma(2,5), j=1,2,3,4,5$
- formula za generiranje podatkov:

$$y_i = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + 0x_5 + \epsilon_i$$

Pri generiranju podatkov bomo spreminjali sledeče:

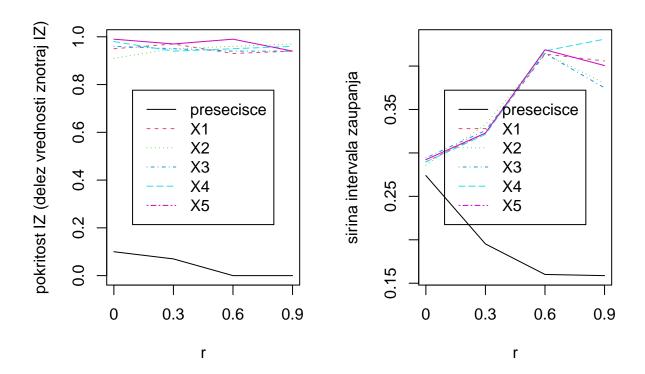
- velikost vzorca $n \in \{10, 20, 30, 50, 100, 500, 1000\}$
- korelacija med odvisnimi spremenljivkami ($cor \in \{0, 0.3, 0.6, 0.9\}$)
- porazdelitev napak $(Gamma(\alpha, \beta))$, kjer bomo parameter α spreminjali tako, da dobimo različno močno asimetrične porazdelitve $((\alpha, \beta) \in \{(1, 5), (2, 5), (2, 2), (5, 5)\}$
- v modelu ne upoštevamo vseh neodvisnih spremenljivk (spreminjamo število spremenljivk, ki jih upoštevamo)

Pri generiranju koreliranih gama spremenljivk uporabimo sledečo lastnost: Če $X_i \sim Gamma(k_i, \theta)$, potem je

$$\sum_{i=1}^{n} X_i \sim Gamma(\sum_{i=1}^{n} k_i, \theta)$$

Predstavitev rezultatov

Predstavitev rezultatov (samo grafično ni dovolj, potrebno je še analizirati varianco na rezultatih).



Slika 1: Grafični prikaz rezultatov za primer n=100, vključene vse spremenljivke, porazdelitev napak=gamma(1,5)

Ugotovitve

Nek povzetek, zaključek.

Viri

Sproti navajaj vsaj linke, da potem na koncu samo urediva in jih pravilno navedeva

- V. Maver, *Normalni linearni mešani modeli*, diplomsko delo, Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani, 2018.
- J. Jiang, Linear and Generalized Linear Mixed Models and Their Applications, Springer Series in Statistics, Springer Science + Business Media, LLC, New York, 2007.
- D. Bates et al., *Package 'lme4'*, v: Linear Mixed-Effects Models using 'Eigen' and S4, [ogled 30.12.2020], dostopno na https://cran.r-project.org/web/packages/lme4/lme4.pdf.
- *lme*, v: RDocumentation, [ogled 30.12.2020], dostopno na https://www.rdocumentation.org/packages/nlme/versions/3.1-137/topics/lme.
- glm, v: RDocumentation, [ogled 30.12.2020], dostopno na https://www.rdocumentation.org/packages/stats/versions/3.6.0/topics/glm.
- M. Raič, O linearni regresijji, 2014. Najdeno na spletnem naslovu: http://valjhun.fmf.uni-lj.si/~raicm/Odlomki/Linearna_regresija.pdf

- L. Pfajfar, Osnovna ekonometrija, učbeniki Ekonomske fakultete, Ljubljana, 2018.
- $\bullet \ \, https://sphweb.bumc.bu.edu/otlt/MPH-Modules/BS/R/R5_Correlation-Regression/R5_Correlation-Regression4. html \\$

Priloge

Rmd datoteka s kodo, ali pa če dava kar povezavo na github repozitorij