Generalized Linear Models

Nguyễn Tư Thành Nhân, Bùi Nguyễn Đức Tân Nguyễn Thị Mai Anh, Châu Thanh Văn

PiMA 2021



Trình bày: Nhóm 7, GLM

August 8, 2021

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Uớc lượng tham số
 - Đánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa

Linear Regression
Dinh nghĩa

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Ước lượng tham số
 - Dánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa

Bài toán mở đầu

Bài toán. Mối quan hệ giữa điểm trung bình với số học sinh, quỹ lớp và số tiết học của một lớp là gì?

Y: điểm trung bình của lớp học.

 X_1 : số học sinh, X_2 : quỹ lớp, X_3 : số tiết học.

Mô hình:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \beta_3 x_{i3} + \epsilon_i, i = 1, 2, ..., n$$

 $y_i, x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}$ là giá trị của Y, X_1, X_2, X_3 khi xét lớp thứ i.

Linear Regression
Dinh nghĩa

Định nghĩa

Y là biến phản hồi, X_1, X_2, \ldots, X_p là các biến giải thích. Trong Linear Regression, ta cần xác định quan hệ tuyến tính giữa Y và X_1, X_2, \ldots, X_p dựa vào bộ dữ liệu $\{y_i, x_{i1}, \ldots x_{ip}\}_{i=1}^n$.

Mô hình Linear Regression

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + ... + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i$$

 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$



Linear Regression

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Uớc lượng tham số
 - Dánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



Ước lượng tham số

Ta quan tâm tới việc chọn β như thế nào thì hợp lí?

- ullet các biến ϵ_i nhận giá trị càng nhỏ càng tốt o Least Square.
- lacksquare biết phân phối ightarrow tối ưu hàm Likelihood (MLE)

Giả sử trong Linear Regression

$$Y \mid X = \mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}, \sigma^2)$$

Linear Regression

Likelihood

Hàm Likelihood:

$$L(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{n} p(y_n | \mathbf{x}_n, \boldsymbol{\beta}, \sigma^2)$$

Likelihood của mô hình Linear Regression

$$\mathrm{L}(oldsymbol{eta}) = \prod_n rac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-rac{1}{2\sigma^2} \left(y_n - oldsymbol{eta}^ op \mathbf{x}_n
ight)^2
ight)$$



Log-likelihood

Hàm Log-likelihood:

$$\mathrm{LL}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{n} \left[\left(\log \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right) - \frac{1}{2\sigma^2} \left(y_n - \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_n \right)^2 \right]$$

Log-likelihood của mô hình Linear Regression

$$\mathrm{LL}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{n} \left(y_n - \boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}_n \right)^2 - \frac{n}{2} \log(2\pi) - n \log \sigma$$

Maximum Likelihood Estimation

Ta cần tính

$$\nabla_{\boldsymbol{\beta}} \mathrm{LL}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = 0$$

Mặt khác

$$abla_{oldsymbol{eta}} \mathrm{LL}(oldsymbol{eta}) = -rac{1}{\sigma^2} \left(\mathbf{X}^ op \mathbf{X} oldsymbol{eta} - \mathbf{X}^ op \mathbf{y}
ight)$$

MLE trong bài toán Linear Regression

$$\hat{oldsymbol{eta}} = \left(oldsymbol{\mathsf{X}}^ op oldsymbol{\mathsf{X}}
ight)^{-1} oldsymbol{\mathsf{X}}^ op oldsymbol{\mathsf{y}}$$



Generalized Linear Models

Motivation

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Ước lượng tham số
 - Dánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa

Motivation

Ví dụ 1

Dự đoán mong muốn học tiếp sau đại học của sinh viên Việt Nam



Motivation

Ví du 1

Dự đoán mong muốn học tiếp sau đại học của sinh viên Việt Nam

Ví dụ 2

Dự đoán số ca dương tính với Covid-19 tại thành phố Hồ Chí Minh

Generalized Linear Models
Component

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Ước lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Ước lượng tham số
 - Dánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



Giới thiêu GLM

Generalized Linear Models └ Component

- Là mô hình thống kê.
- Dùng trong bài toán hồi quy lẫn phân loại.

Mối quan hệ giữa biến phản hồi và biến giải thích

- I Phân phối ? (LR : phân phối chuẩn \rightarrow GLM : ?)
- Biểu thức ? (LR : tuyến tính → GLM : ?)

Thành phần

- I Random Component (Thành phần ngẫu nhiên)
- Linear Predictor (Dự đoán tuyến tính)
- Link Function (Hàm liên kết)

Exponential family

Hàm xác suất

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

Trong đó,

 θ : natural parameter

 $\phi \text{:}\ \text{dispersion parameter}$

 $a(\phi), b(\theta), c(y, \phi)$ là các hàm cố định.

Exponential family

Hàm xác suất

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

Trong đó,

 θ : natural parameter

 $\phi \text{:}\ \text{dispersion parameter}$

 $a(\phi), b(\theta), c(y, \phi)$ là các hàm cố định.

Phân phối chuẩn thuộc họ Exponential

$$f(y; \mu, \sigma^2) = \exp\left(\frac{y\mu - \frac{1}{2}\mu^2}{\sigma^2} - \frac{y^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2)\right)$$



Generalized Linear Models
Component

Random Component

Họ exponential chứa các phân phối quen thuộc

- Phân phối liên tục gồm Phân phối chuẩn, Gamma, ...
- Phân phối rời rạc gồm Phân phối Bernoulli, Poisson, ...

Trong GLM, $Y|X = \mathbf{x}$ có phân phối thuộc họ exponential.

Linear Predictor

Dự đoán tuyến tính

$$\eta_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij}, i = 1...n$$

Generalized Linear Models
Component

Link function

Hàm liên kết

$$\eta_i = \mathsf{g}(\mu_i)$$

thỏa mãn hai điều kiện:

- Hàm g đơn điệu
- Hàm g khả vi

Generalized Linear Models
Component

Tổng kết

Gọi Y là biến phản hồi, $X=(X_1,X_2,\ldots,X_p)$ là các biến giải thích.

Mô hình

- $\mathbf{I} Y \mid X = \mathbf{x}$ có phân phối thuộc Exponential family.
- 2 $Y \mid X = \mathbf{x}_i$ có kỳ vọng có liên hệ với biểu thức tuyến tính của các biến giải thích thông qua hàm liên kết

$$g(\mu_i) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{p} \beta_j x_{ij} = \boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}_i, i = \overline{1, n}.$$

Generalized Linear Models

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Uớc lượng tham số
 - Đánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



Generalized Linear Models

Kết quả quan trọng

General Likelihood

Gọi LL là hàm log-likelihood của phân phối với tham số heta, khi đó

$$\mathrm{E}\left[\frac{\partial \mathrm{LL}}{\partial \theta}\right] = 0, \qquad \mathrm{E}\left[\frac{\partial^2 \mathrm{LL}}{\partial \theta}\right] + \mathrm{E}\left[\left(\frac{\partial \mathrm{LL}}{\partial \theta}\right)^2\right] = 0.$$

Hệ quả (Đặc trưng trong thành phần ngẫu nhiên)

Với
$$\mathsf{E}[y] := \mathsf{E}[Y \mid X = x]$$
 và $\mathsf{var}(y) := \mathsf{var}(Y \mid X = x)$ thì $b'(\theta) = \mu = \mathsf{E}[y], \qquad \mathsf{var}(y) = b''(\theta) \mathsf{a}(\phi).$



Likelihood

Hàm phân phối Y khi biết điều kiện $X=\mathbf{x}_n$ có dạng như sau

$$f(y_n; \theta_n, \phi) = \exp\left(\frac{y_n \theta_n - b(\theta_n)}{a_n(\phi)} + c(y_n, \phi)\right)$$

Likelihood của mô hình Generalized Linear Models

$$L(\beta) = \prod \left(\frac{y_n \theta_n - b(\theta_n)}{a_n(\phi)} + c(y_n, \phi) \right)$$

Log-likelihood của mô hình Generalized Linear Models

$$\mathrm{LL}(oldsymbol{eta}) = \sum \left(rac{y_n heta_n - b(heta_n)}{a_n(\phi)} + c(y_n, \phi)
ight) = \sum \mathrm{LL}_n(eta)$$



Đẳng thức Likelihood

Ta tính đạo hàm của Log-likehood:

$$\frac{\partial \mathrm{LL}_n}{\partial \beta_m} = \frac{(y_n - \mu_n) x_{nm}}{\mathrm{var}[y_n]} \frac{\partial \mu_n}{\partial \eta_n}$$

Đẳng thức Likelihood

$$\frac{\partial \mathrm{LL}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}_m} = \sum_{\boldsymbol{n}} \frac{(y_{\boldsymbol{n}} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{n}}) \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{n} \boldsymbol{m}}}{\mathrm{var}[y_{\boldsymbol{n}}]} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{n}}}{\partial \boldsymbol{\eta}_{\boldsymbol{n}}} = 0, \forall \boldsymbol{m}$$



Đẳng thức Likelihood

Gọi ${f V}$ là ma trận đường chéo của các phương sai quan sát được, ${f D}$ là ma trận đường chéo của các phần tử ${\partial \mu_n \over \partial n_n}$

Đẳng thức Likelihood

$$\mathbf{X}^{ op}\mathbf{D}\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y}-oldsymbol{\mu})=\mathbf{0}$$

Trong đó, β được nằm trong công thức $\mu_n = g^{-1}(\beta^\top \mathbf{x}_n)$

Newton-Raphson method

Goi

$$\mathbf{g}(\boldsymbol{\beta}) = \nabla_{\boldsymbol{\beta}} \mathrm{LL}(\boldsymbol{\beta})$$

là gradient của $LL(\beta)$,

$$\mathbf{H}(\boldsymbol{\beta}) = \nabla_{\boldsymbol{\beta}}^2 \mathrm{LL}(\boldsymbol{\beta})$$

là ma trận Hessian của $\mathrm{LL}(\beta)$

Newton-Raphson method

$$oldsymbol{eta}^{(t+1)} = oldsymbol{eta}^{(t)} + \left(\mathsf{H}(oldsymbol{eta}^{(t)})
ight)^{-1} \mathsf{g}^{(t)}$$



Fisher-scoring method

Goi $\mathcal J$ là ma trân có các phần tử là

$$-\mathrm{E}\left[\frac{\partial^2\mathrm{LL}_n}{\partial\beta_m\partial\beta_p}\right]$$

. Hay

$$\mathcal{J} = -\mathrm{E}[\textbf{H}]$$

Fisher-scoring method

$$oldsymbol{eta}^{(t+1)} = oldsymbol{eta}^{(t)} - \left(\mathcal{J}(oldsymbol{eta}^{(t)})
ight)^{-1} \mathbf{g}^{(t)}$$



Generalized Linear Models
Dánh giá mô hình

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Ước lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Ước lượng tham số
 - Đánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



Generalized Linear Models
Dánh giá mô hình

Đánh giá mô hình

Công thức tính (tổng) độ lệch của mô hình M_0 với kì vọng $\hat{\mu}=\mathrm{E}[Y|\hat{m{\beta}}_0]$

Deviance

$$D(y, \hat{\mu}) = 2(\log(\rho(y|\hat{\beta}_s)) - \log(\rho(y|\hat{\beta}_0))$$

trong đó, $\hat{\beta}_0$ kí hiệu là fitted values của tham số trong mô hình M_0 , còn $\hat{\beta}_s$ là fitted tham số trong mô hình saturated.

Đánh giá mô hình

Ví du

Công thức tính sư sai lệch của Poisson distribution.

$$p(Y=y)=\frac{e^{-\mu}\mu^y}{y!}.$$

$$LL(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i} ((y_i \log(\mu_i) - \mu_i))$$

trong đó $\log(\mu_i) = \mathbf{x}_i^{\top} \boldsymbol{\beta}$

Ta có công thức tính độ lệch là:

$$D = 2\sum_{i} \left[y_i \log \left(\frac{y_i}{\mu_i} \right) - (y_i - \mu_i) \right].$$



Đánh giá mô hình

Công thức tính sự sai lệch của một số loại phân bố có thể xem ở bảng sau, trong đó $i=1,2,\ldots,n$.

Phân phối	Công thức tính sự lệch
Chuẩn	$\sum (y_i - \hat{\mu}_i)^2$
Poisson	$2\sum\{y\log(\frac{y_i}{\hat{\mu_i}})-(y_i-\hat{\mu_i})\}$
Nhị thức	$2\sum\{y\log(\frac{y_i}{\hat{\mu}_i})+(m-y_i)\log[\frac{m-y_i}{m-\hat{\mu}_i}]\}$
Gamma	$2\sum\{-\log(rac{\hat{y_i}}{\hat{\mu_i}})+rac{\hat{y_i}-\hat{\mu_i}}{\hat{\mu_i}}\}$

Đánh giá mô hình

The generalized Pearson X^2 statistic

$$X^2 = \sum \frac{(y_i - \hat{\mu_i})^2}{V(\hat{\mu_i})},$$

trong đó, $V(\hat{\mu}_i)$ là hàm ước lượng phương sai cho phân phối được dùng đến.

Count data

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Uớc lượng tham số
 - Dánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



Count data

Thành phần

Random Component

 $Y|X = \mathbf{x}$ tuân theo phân phối Poisson

Linear Predictor

$$\eta_i = \theta_i = \log(\mu_i) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij}$$

Link function

Hàm liên kết được sử dụng ở đây còn gọi là Log Function vì $\log(\mu)=\eta$. Hàm nghịch đảo của nó là: $\mu=\exp(\eta)$



- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Uớc lượng tham số
 - Đánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Đánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



Deviance

└-Đánh giá mô hình

$$D=2\sum \left[y_i\log\left(\frac{y_i}{\hat{\mu}_i}\right)-(y_i-\hat{\mu}_i)\right].$$

Pearson's chi-squared

$$X_p = \sum \frac{(y_i - \hat{\mu}_i)^2}{\hat{\mu}_i}$$

Count data
Ví du minh hoa

- 1 Linear Regression
 - Định nghĩa
 - Uớc lượng tham số
- 2 Generalized Linear Models
 - Motivation
 - Component
 - Uớc lượng tham số
 - Đánh giá mô hình
- 3 Count data
 - Component
 - Dánh giá mô hình
 - Ví dụ minh họa



└─Ví dụ minh họa

Count data

Dataset: Australian Health Service Utilization Data 1977 - 1978

Bài toán

Từ các thông số về tuổi tác (age), bệnh lý (illness), năng suất hoạt động (reduced), v.v. của đối tượng được khảo sát, dự đoán số lần khám bác sĩ của đối tượng trong 2 tuần vừa qua.

Count data

Biến y = visits trong dataset trên biểu thị số lần khám bác sĩ trong 2 tuần vừa qua.

Khảo sát số liệu của biến này, ta thu được:

$$E(y) = 0.3, var(y) = 0.64$$

└Ví du minh hoa

Biến y =visits trong dataset trên biểu thi số lần khám bác sĩ trong 2 tuần vừa qua.

Khảo sát số liêu của biến này, ta thu được:

$$E(y) = 0.3, var(y) = 0.64$$

Chênh lệch giữa mean và variance đủ nhỏ nên mô hình Poisson Regression sẽ không bị ảnh hưởng quá nhiều bởi overdispersion. Áp dụng mô hình Linear Regression (scikit-learn), Poisson Regression (scikit-learn) và GLM (statsmodels) trên dữ liệu có được, thực nghiệm cho kết quả sau:

Mô hình	Deviance
Linear Regression	0.824381
Poisson Regression	0.903828
GLM	0.879162

Count data
Ví du minh hoa

References

- Lecture Statistics for Applications fall 2016 from MIT
- Peter K. Dunn · Gordon K. Smyth Generalized Linear Models With Examples in R
- P. Mccullagh J.A. Nelder (1989) Generalized linear models chapman hall