Прикладная статистика 7. Регрессионный анализ.

Рябенко Евгений
riabenko.e@gmail.com

31 марта 2014 г.

Постановка задачи линейной регрессии

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

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

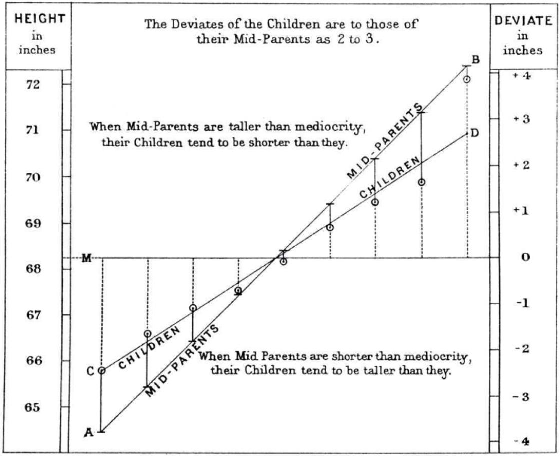
$$\underset{f}{\operatorname{argmin}}\, \mathbb{E}\left(y - f(x_1,\dots,x_k)\right)^2 = \mathbb{E}\left(y\,|x_1,\dots,x_k\right).$$

$\mathbb{E}\left(y\,|x_1,\dots,x_k\right) = f(x_1,\dots,x_k)$ — модель регрессии;
$\mathbb{E}\left(y\,|x_1,\dots,x_k\right) = \beta_0 + \sum\limits_{j=1}^{k}\beta_j x_j$ — модель линейной регрессии.

Здесь и далее $n > k$ ($n \gg k$).

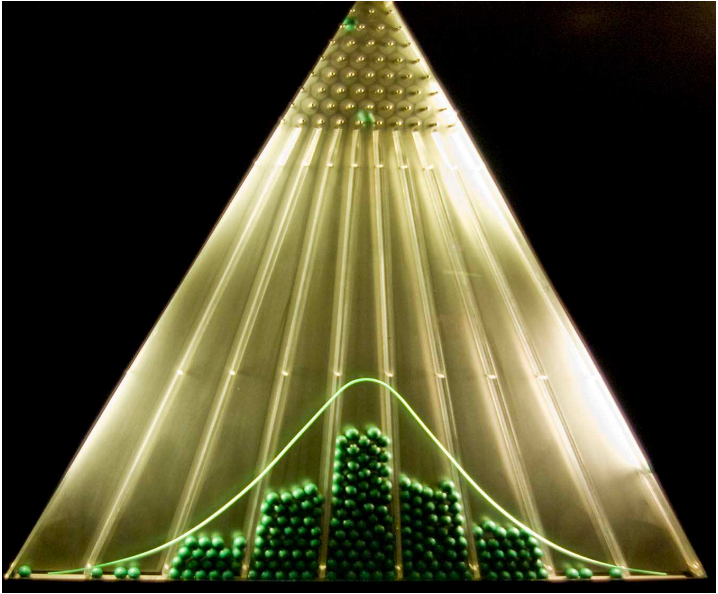
Первое появление

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



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

Машина Гальтона



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:

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

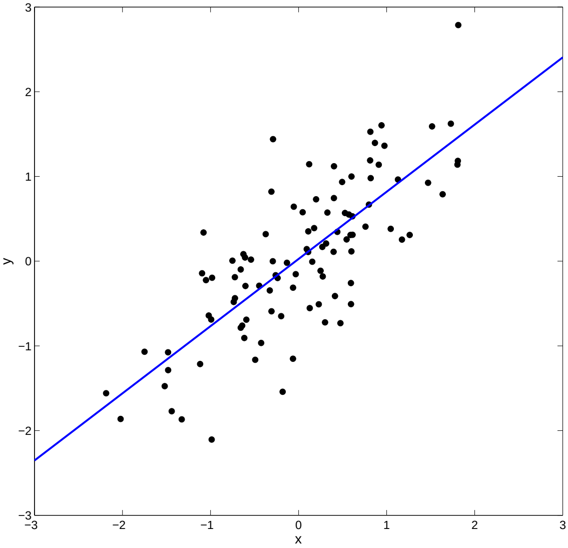
$$\|y - X\beta\|_2^2 \to \min_{\beta};$$

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

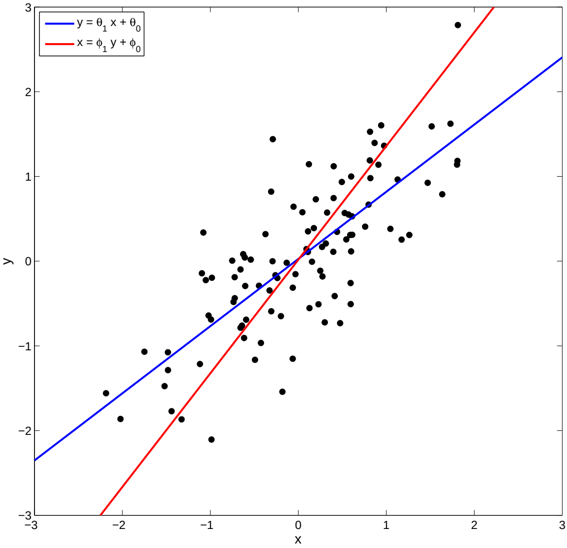
$$\hat{\beta} = \left(X^T X \right)^{-1} X^T y,$$

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

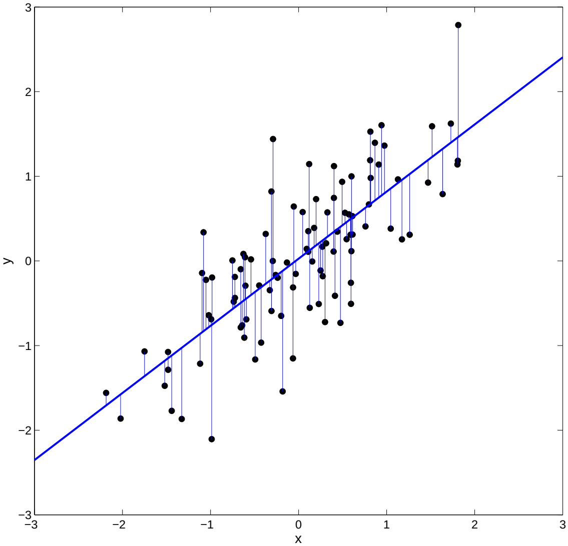
Инверсия задачи регрессии



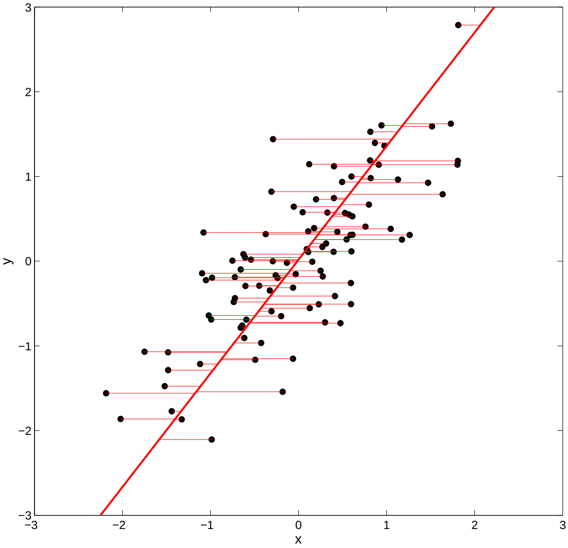
Инверсия задачи регрессии



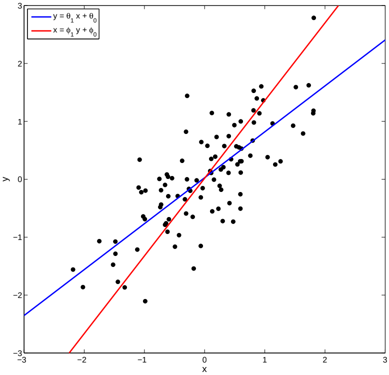
Инверсия задачи регрессии



Инверсия задачи регрессии



Инверсия задачи регрессии



- Две прямые пересекаются в точке $(\bar{x}, \bar{y})$.
- Косинус угла между прямыми, осуществляющими линейную МНК-регрессию x на y и y на x, равен значению выборочного коэффициента корреляции между x и y.

Goodness-of-fit

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

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

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

$$TSS = ESS + RSS.$$

Коэффициент детерминации:

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

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

Предположения модели

1. Линейность: $y = X\beta + \varepsilon$.
2. Случайность выборки: имеется независимая выборка наблюдений $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$.
3. Полнота ранга: ни в популяции, ни в выборке ни один из признаков не является линейной комбинацией других ($\operatorname{rank} X = k$).
4. Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(\varepsilon \,|X\right) = 0$.

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: $y = X\beta + \varepsilon$.
2. Случайность выборки: имеется независимая выборка наблюдений $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$.
3. Полнота ранга: ни в популяции, ни в выборке ни один из признаков не является константой; кроме того, ни один из признаков не является линейной комбинацией других ($\operatorname{rank} X = k$).
4. Случайность ошибок: $\mathbb{E}\left(\varepsilon \,|\, X\right) = 0$.
5. Гомоскедастичность ошибок: дисперсия ошибки не зависит от значений признаков: $\mathbb{D}\left(\varepsilon \,|\, X\right) = \sigma^2$.

(предположения Гаусса-Маркова).

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

Дисперсия $\hat{\beta}_j$

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

$$\mathbb{D}\left(\hat{\beta}_j \middle| X\right) = \frac{\sigma^2}{TSS_j\left(1 - R_j^2\right)},$$

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

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

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

Дисперсия $\hat{\beta}_j$

В матричном виде:

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

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**.

Неправильное определение модели

Недоопределение: если зависимая переменная определяется моделью

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

а вместо этого используется модель

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

то МНК-оценки $\hat{\beta}_0, \ldots, \hat{\beta}_{j-1}, \hat{\beta}_{j+1}, \ldots, \hat{\beta}_k$ являются смещёнными и несостоятельными оценками $\beta_0, \ldots, \beta_{j-1}, \beta_{j+1}, \ldots, \beta_k$.

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.

Бинарные признаки

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

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 $y = \beta_0 + \beta_1 x$. 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_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 инженера и управляющего со средним по всем должностям.

Вопросы

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

Предположение о нормальности ошибок

6. Нормальность ошибок: $\varepsilon \sim N\left(0, \sigma^2\right)$.

- В предположениях (1-6) МНК-оценки совпадают с оценками максимального правдоподобия.

ММП:

$$p\left(\varepsilon_i\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2\sigma}\varepsilon_i^2},$$

$$\ln \prod_{i=1}^{n} p\left(\varepsilon_i\right) \to \max_{\beta},$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{1}{2}\ln\left(2\pi\sigma\right) - \frac{1}{2\sigma}\varepsilon_i^2\right) \to \max_{\beta},$$

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

Предположение о нормальности ошибок

- Эквивалентная запись предположения (6):

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

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

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

  кроме того, $\frac{1}{\sigma^2}RSS \sim \chi^2_{n-k-1}$.
- $\forall c \in \mathbb{R}^{k+1}$

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

Доверительные интервалы для σ и β

$100(1-\alpha)\%$ 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 $c = \left(0 \dots 0\underset{j}{1}0 \dots 0\right)$; $100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для β_j:

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

Доверительный и предсказательный интервалы для отклика

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

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

Чтобы построить предсказательный интервал для $y\left(x_0\right) = x_0^T\beta + \varepsilon\left(x_0\right)$, учтём ещё дисперсию ошибки:

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

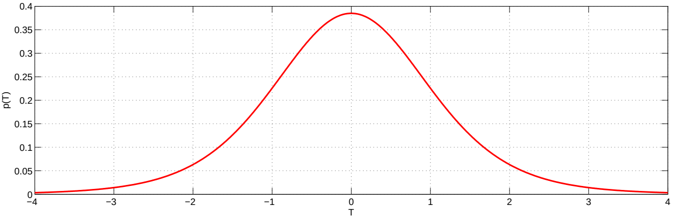
t-критерий Стьюдента

нулевая гипотеза: $H_0: \beta_j = 0;$

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

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

$T \sim St(n-k-1)$ при H_0;



достигаемый уровень значимости:

$$p(t) = \begin{cases} 1 - tcdf(t, n-k-1), & H_1: \beta_j > 0, \\ tcdf(t, n-k-1), & H_1: \beta_j < 0, \\ 2\left(1 - tcdf(|t|, n-k-1)\right), & H_1: \beta_j \neq 0. \end{cases}$$

t-критерий Стьюдента

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?

$H_0\colon \beta_1 = 0.$
$H_1\colon \beta_1 \neq 0 \Rightarrow p = 2.2021 \times 10^{-5}.$

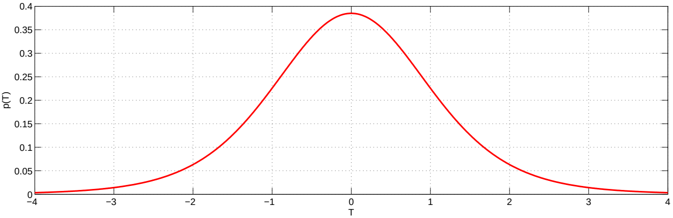
t-критерий Стьюдента

нулевая гипотеза: $H_0\colon \beta_j = a;$

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

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

$T \sim St(n-k-1)$ при $H_0;$



достигаемый уровень значимости:

$$p(t) = \begin{cases} 1 - tcdf(t, n-k-1), & H_1\colon \beta_j > a, \\ tcdf(t, n-k-1), & H_1\colon \beta_j < a, \\ 2\left(1 - tcdf(|t|, n-k-1)\right), & H_1\colon \beta_j \neq a. \end{cases}$$

t-критерий Стьюдента

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.

$H_0\colon \beta_1 = -1.$
$H_1\colon \beta_1 \neq -1 \Rightarrow p = 0.6945.$

Критерий Фишера

$$\underset{n\times(k+1)}{X} = \left(\underset{n\times(k+1-k_1)}{X_1}, \underset{n\times k_1}{X_2}\right); \quad \underset{(k+1)\times 1}{\beta^T} = \left(\underset{(k+1-k_1)\times 1}{\beta_1^T}, \underset{k_1\times 1}{\beta_2^T}\right)^T;$$

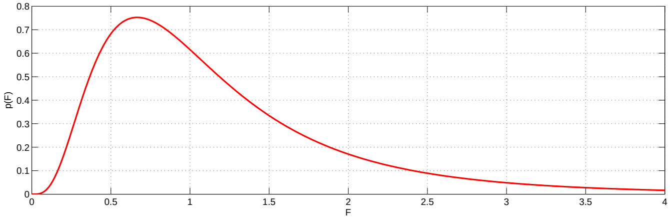
нулевая гипотеза: $H_0\colon \beta_2 = 0;$

альтернатива: $H_1\colon H_0$ неверна;

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

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

$F \sim F(k_1, n-k-1)$ при H_0;



достигаемый уровень значимости:

$$p(f) = fcdf(1/f, n-k-1, k_1).$$

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?

$H_0\colon \beta_4 = \beta_5 = 0.$
$H_1\colon H_0$ 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;
- 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:

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

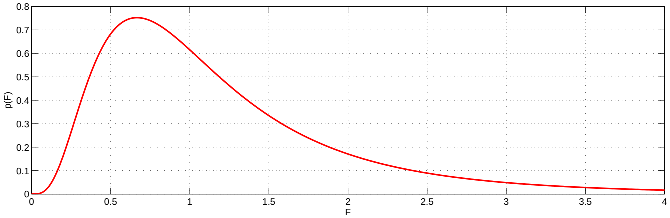
Критерий Фишера

нулевая гипотеза: $H_0\colon \beta_1 = \dots = \beta_k = 0;$

альтернатива: $H_1\colon H_0$ неверна;

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

$F \sim F(k, n-k-1)$ при $H_0;$



достигаемый уровень значимости:

$$p(f) = fcdf(1/f, n-k-1, k).$$

Критерий Фишера

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

$H_0: \beta_1 = \dots = \beta_5 = 0.$
$H_1: H_0$ неверна $\Rightarrow p = 6.0331 \times 10^{-9}.$

Сравнение невложенных моделей

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?

Критерий Давидсона-Маккиннона

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

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 \hat{\hat{y}} + \varepsilon,$$
$$y = \beta_0 + \gamma_1 \log x_1 + \gamma_2 \log x_2 + \gamma_3 \hat{y} + \varepsilon.$$

При помощи критерия Стьюдента проверим

$$H_{01}\colon \beta_3 = 0, \;\; H_{11}\colon \beta_3 \neq 0,$$
$$H_{02}\colon \gamma_3 = 0, \;\; H_{12}\colon \gamma_3 \neq 0.$$

H_{01} \ H_{02}	Принята	Отвергнута
Принята	Модели одинаково хороши	Модель (1) значимо лучше
Отвергнута	Модель (2) значимо лучше	Модели одинаково плохи

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:

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

Пошаговая регрессия

- **Шаг 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 $p_R = 0.1$.
- ...

Эксперимент Фридмана

David A. Freedman, A Note on Screening Regression Equations. The American Statistician, Vol. 37, No. 2 (May, 1983), pp. 152-155.

Отбор признаков с учётом эффекта множественной проверки гипотез

$\forall c_1, \dots, c_{k_1} \in \mathbb{R}^{k+1}$

$$t_j = \frac{c_j^T \left(\beta - \hat{\beta}\right)}{\hat{\sigma}\sqrt{c_j^T \left(X^T X\right)^{-1} c_j}}, \quad j = 1, \dots, k_1$$

имеют совместное распределение Стьюдента с числом степеней свободы $n - k - 1$ и корреляционной матрицей

$$R = DC^T \left(X^T X\right)^{-1} CD,$$
$$C = \left(c_1, \dots, c_{k_1}\right),$$
$$D = \operatorname{diag}\left(c_j^T \left(X^T X\right)^{-1} c_j\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Для одновременной проверки значимости всех коэффициентов регрессии достаточно взять в качестве C единичную матрицу.

Отбор признаков с учётом эффекта множественной проверки гипотез

Matlab:

```
[beta,~,stats] = glmfit(X,y,'normal');
D     = diag(1 ./ sqrt(diag(stats.covb)));
Cor   = D * stats.covb * D';
p_adj = 1 - mvtcdf(repmat(-abs(stats.t), 1, length(beta)), ...
                   repmat(abs(stats.t), 1, length(beta)), ...
                   Cor, stats.dfe);
```

Работает при $k+1 \leq 25$.

Отбор признаков с учётом эффекта множественной проверки гипотез

R, длинный способ:

```
m     <- lm(y ~ X)
beta  <- coef(m)
Vbeta <- vcov(m)
D     <- diag(1 / sqrt(diag(Vbeta)))
t     <- D %*% beta
Cor   <- D %*% Vbeta %*% t(D)
library("mvtnorm")
m.df  <- nrow(X) - length(beta)
p_adj <- sapply(abs(t), function(x) 1-pmvt(-rep(x, length(beta)),
                                            rep(x, length(beta)),
                                            corr = Cor, df = m.df))
```

R, короткий способ:

```
m    <- lm(y ~ X)
beta <- coef(m)
library("multcomp")
m.mc <- glht(m, linfct = diag(length(beta)))
summary(m.mc)
```

Проверка предположений Гаусса-Маркова

- 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**:

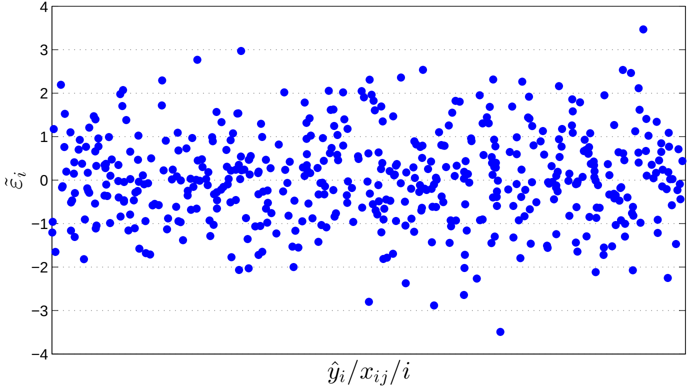
$$\hat{\varepsilon}_i = y_i - \hat{y}_i, \ i = 1, \dots, n.$$

Визуальный анализ

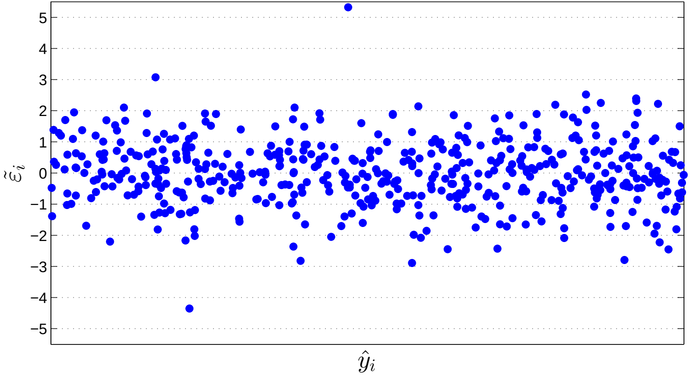
Стандартизированные остатки:

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

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

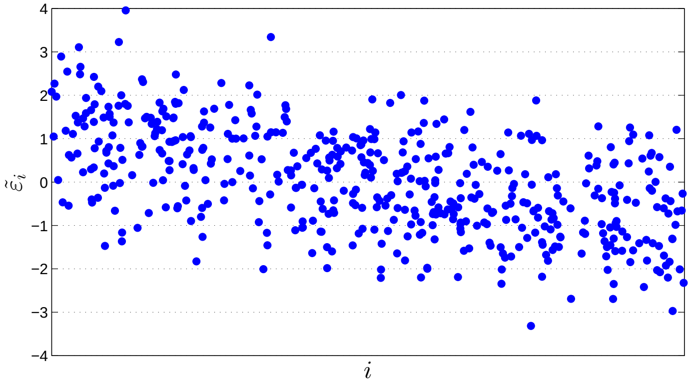


Визуальный анализ



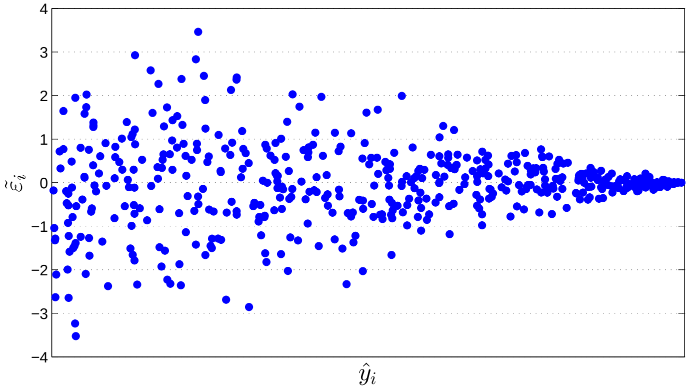
Возможно, присутствуют выбросы

Визуальный анализ



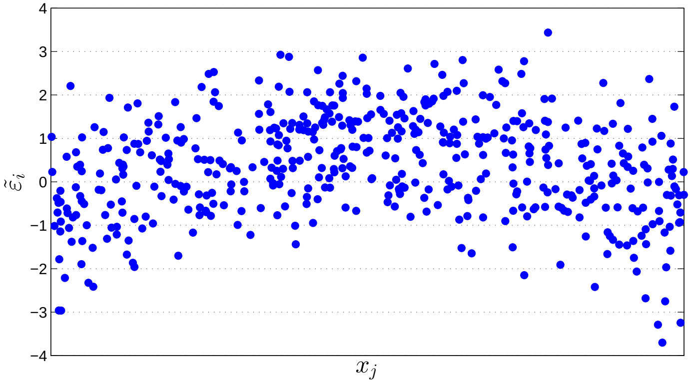
В данных имеется тренд

Визуальный анализ



Гетероскедастичность

Визуальный анализ



Стоит добавить квадрат признака x_j

Формальные критерии

- Проверка нормальности — занятие 2.
- Проверка несмещённости: если остатки нормальны — критерий Стьюдента (занятие 2), нет — непараметрический критерий (занятие 3).
- Выбросы — расстояние Кука.
- Проверка гомоскедастичности: критерий Бройша-Пагана.

Расстояние Кука

Остатки недостаточно полно характеризуют наличие выбросов, так как регрессия сильно подстраивается под большие отклонения.

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

$$D_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} \left(\hat{y}_j - \hat{y}_{j(i)}\right)^2}{RSS\,(k+1)} = \frac{\hat{\varepsilon}_i^2}{RSS\,(k+1)} \frac{h_i}{(1-h_i)^2},$$

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

Варианты порога на D_i:

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

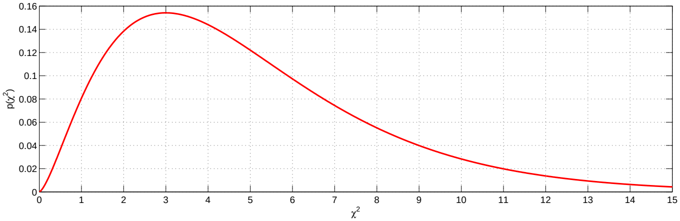
Критерий Бройша-Пагана

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

альтернатива: $H_1\colon H_0$ неверна;

статистика: $LM = nR^2_{\hat{\varepsilon}^2}$, $R^2_{\hat{\varepsilon}^2}$ — коэффициент детерминации при регрессии квадратов остатков на признаки;

$LM \sim \chi^2_k$ при H_0;



достигаемый уровень значимости:

$$p(f) = 1 - chi2cdf(LM, k).$$

Гетероскедастичность

Гетероскедастичность может быть следствием недоопределения модели.

Последствия гетероскедастичности:

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

Варианты:

- переопределить модель, добавить признаки, преобразовать отклик;
- использовать модифицированные оценки дисперсии коэффициентов для оценки значимости;
- настроить параметры методом взвешенных наименьших квадратов.

Преобразование Бокса-Кокса

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

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

но оно сильно варьируется по λ.
Вместо него можно рассмотреть семейство преобразований

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

где $\dot{y} = \left(y_1 y_2 \ldots y_n\right)^{1/n}$ — 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 $RSS(\lambda)$;
3. строится график зависимости $RSS(\lambda)$ от λ, по нему выбирается оптимальное значение λ;
4. выбирается ближайшее к оптимальному удобное значение λ (например, целое или полуцелое);
5. 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 $\min\limits_{\lambda} RSS\left(\lambda\right) \cdot e^{\chi^2_{1,1-\alpha}/n}$. Если он содержит единицу, возможно, не стоит выполнять преобразование.

Устойчивая оценка дисперсии Уайта

Если не удаётся избавиться от гетероскедастичности, для оценки значимости признаков можно использовать критерии, основанные на устойчивой оценке дисперсии.
White's heteroscedasticity-consistent estimator (HCE):

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

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

Элементы диагональной матрицы могут задаваться разными способами:

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

const — случай гомоскедастичной ошибки,
HC0 — оценка Уайта,
HC1–HC3 — модификации МакКиннона-Уайта,
HC4 — модификация Крибари-Нето.

Использование устойчивых оценок дисперсии

R, пакет sandwich:

```
m <- lm(y ~ ., data=X)
library("sandwich")
library("lmtest")

#significance of every predictor
coeftest(m, df = Inf, vcov = vcovHC(m, type = "HC0"))

#significance of the group of predictors
waldtest(m1, m2, vcov = vcovHC(m1, type = "HC0")) #m1 - bigger model

#significance of the whole equation
waldtest(m, vcov = vcovHC(m, type = "HC0"))
```

Matlab:

```
beta = glmfit(X,y,'normal');
Cov = hac(X,y,'type','HC','weights','HC0');

%significance of every predictor
 p = 2 * (1-normcdf(abs(beta ./ sqrt(diag(Cov)))))

%significance of the group of predictors
test_ind = [7 8 9]; %indices of predictors to be tested
p = 1-chi2cdf(beta(test_ind)' * inv(Cov(test_ind, test_ind)) * beta(test_ind), ...
              length(test_ind))

%significance of the whole equation
p = 1-chi2cdf(beta(2:end)' * inv(Cov(2:end, 2:end)) * beta(2:end), length(beta)-1)
```

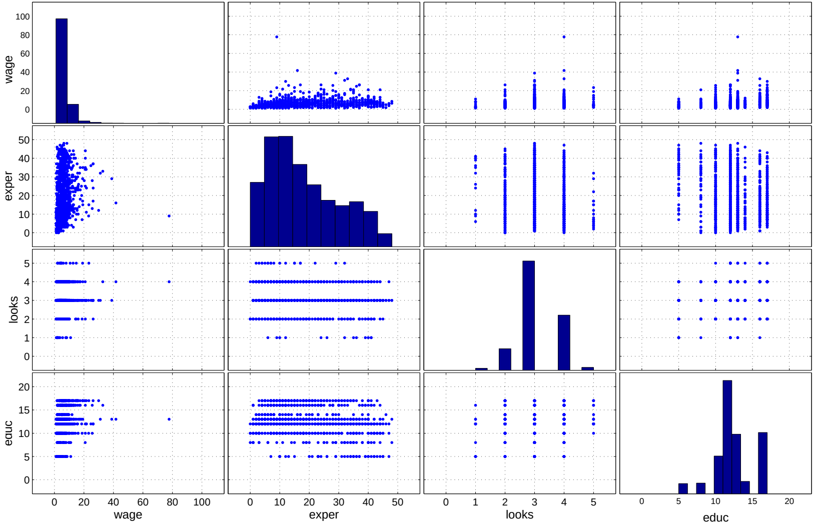
Влияние внешней привлекательности на уровень заработка

Hamermesh, D. S., and J. E. Biddle (1994), Beauty and the Labor Market, American Economic Review 84, 1174–1194: по 1260 опрошенным имеются следующие данные:

- заработная плата за час работы, $,
- опыт работы, лет,
- образование, лет,
- внешняя привлекательность, в баллах от 1 до 5,
- бинарные признаки: пол, семейное положение, состояние здоровья (хорошее/плохое), членство в профсоюзе, цвет кожи (белый/чёрный), занятость в сере обслуживания (да/нет).

Оценить влияние внешней привлекательности на уровень заработка с учётом всех остальных факторов.

Данные

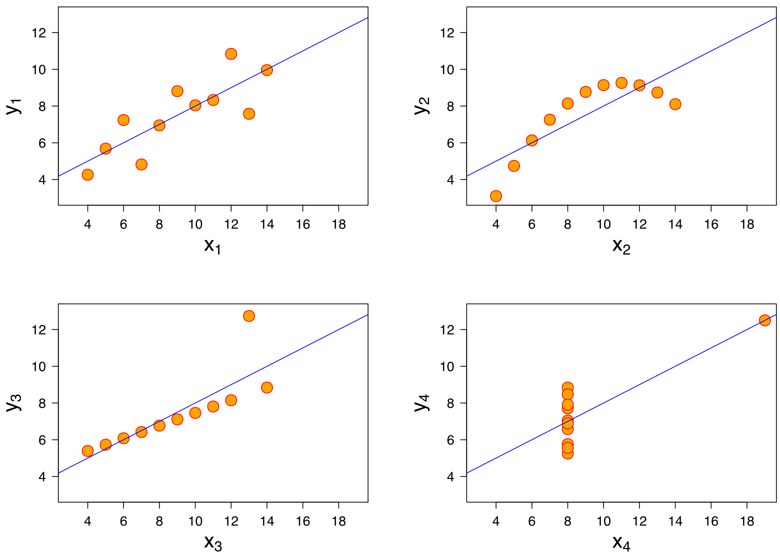


О необходимости визуализации данных

Пример: Anscombe's quartet

№	1	2	3	4
$\bar{x}$	9	9	9	9
$S(x)$	11	11	11	11
$\bar{y}$	7.5	7.5	7.5	7.5
$S(y)$	4.127	4.127	4.128	4.128
r_{xy}	0.816	0.816	0.816	0.816

О необходимости визуализации данных



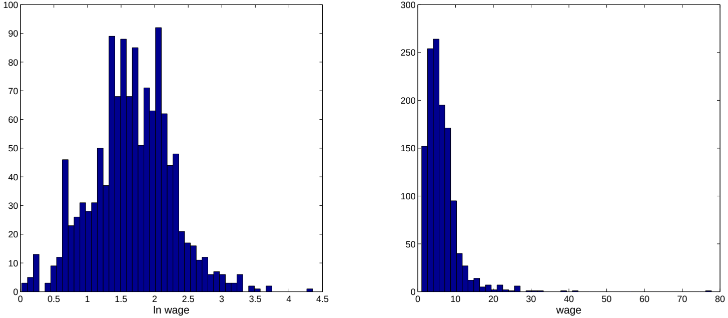
Данные

В группах $looks = 1$ и $looks = 5$ слишком мало наблюдений.

Превратим признак $looks$ в категориальный и закодируем при помощи фиктивных переменных:

$looks$	$aboveavg$	$belowavg$
< 3	1	0
3	0	0
> 3	0	1

Выбросы

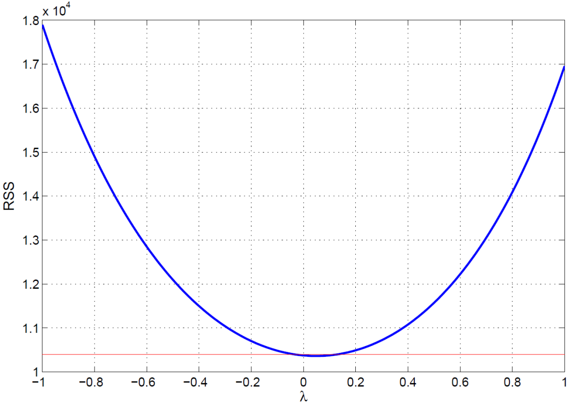


Больше 30 долларов в час в выборке получают только 5 человек. Исключим их.

Преобразование отклика

$$\frac{\max y}{\min y} = 29.4.$$

Найдём преобразование отклика при помощи метода Бокса-Кокса:



95% доверительный интервал: $(-0.028, 0.124)$.

Возьмём $\lambda = 0$, т. е. будем делать регрессию логарифма отклика.

Модель 1

Построим линейную модель:

$$\begin{aligned}\ln wage = 0.43 + 0.01 exper + 0.19 union + 0.12 goodhlth - 0.10 black - \\ - 0.39 female + 0.04 married - 0.15 service + 0.08 educ - \\ - 0.01 aboveavg - 0.13 belogavg.\end{aligned}$$

$F = 78.63,\ p = 6.8 \times 10^{-125},\ R^2 = 0.387,\ R_a^2 = 0.382.$

Критерий	p-value
Шапиро-Уилка (нормальность)	1.1×10^{-4}
знаковых рангов (несмещённость)	0.8944
Бройша-Пагана (гомоскедастичность)	5.7×10^{-4}

Признаки, коэффициенты при которых значимо отличаются от нуля (множественная проверка с дисперсиями Уайта): $exper$, $union$, $female$, $service$, $educ$, $belowavg$.

Модель 2

Редуцированная модель:

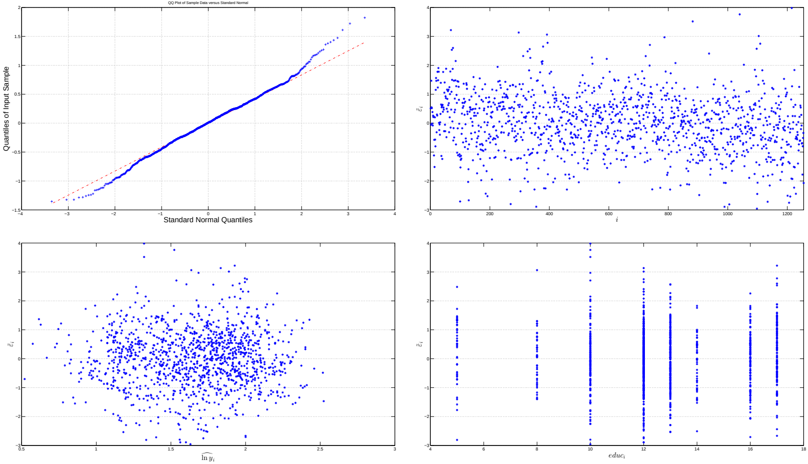
$$\ln wage = 0.54 + 0.01 exper + 0.18 union - 0.41 female - 0.15 service + \\ + 0.08 educ - 0.008 aboveavg - 0.12 belogavg.$$

$F = 110.04,\ p = 1.5 \times 10^{-125},\ R^2 = 0.382,\ R_a^2 = 0.378.$

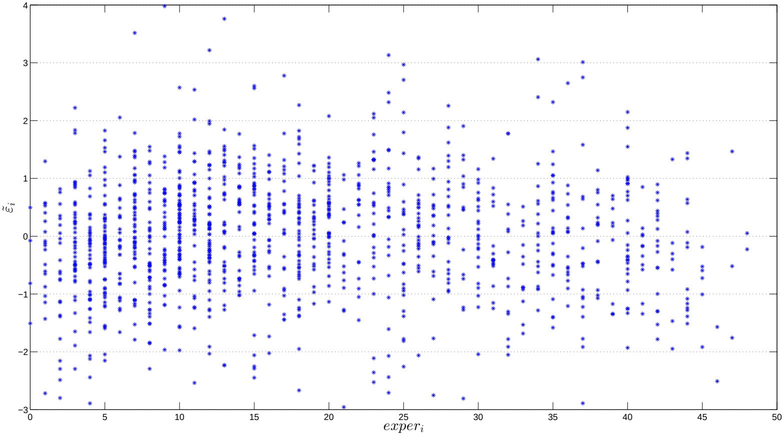
Критерий	p-value
Шапиро-Уилка (нормальность)	1.6×10^{-4}
знаковых рангов (несмещённость)	0.8480
Бройша-Пагана (гомоскедастичность)	4.0×10^{-5}

Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

Остатки модели 2



Остатки модели 2



Модель 3

Модель с квадратом признака $exper$:

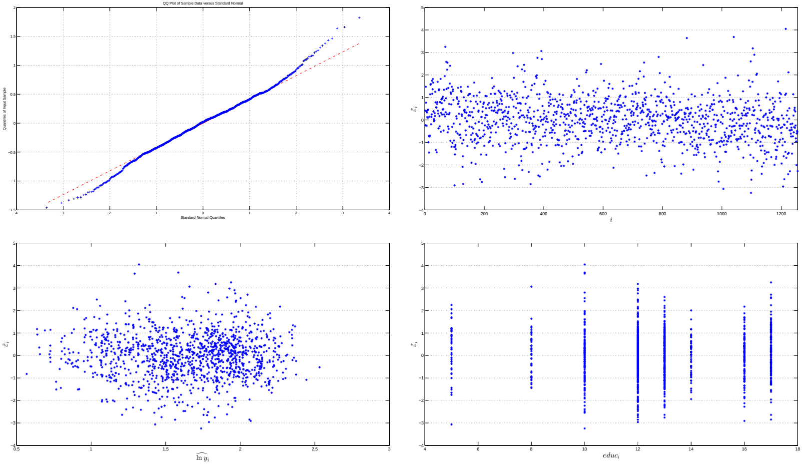
$$\ln wage = 0.40 + 0.04exper - 0.0006exper^2 + 0.18union - 0.40female - \\ - 0.16service + 0.08educ - 0.006aboveavg - 0.13belogavg.$$

$F = 104.92,\ p = 1.2 \times 10^{-133},\ R^2 = 0.402,\ R_a^2 = 0.399.$

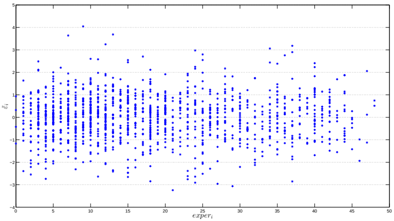
Критерий	p-value
Шапиро-Уилка (нормальность)	3.1×10^{-5}
знаковых рангов (несмещённость)	0.8571
Бройша-Пагана (гомоскедастичность)	5.6×10^{-6}

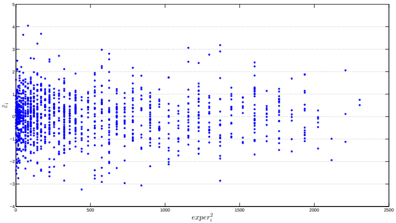
Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

Остатки модели 3



Остатки модели 3





Модель 4

Сделаем пошаговую регрессию со всеми попарными взаимодействиями и квадратами всех числовых признаков:

$$\begin{aligned}\ln wage = 0.38 + 0.04 exper - 0.0007 exper^2 + 0.18 union - 0.30 female+\\ + 0.07 educ - 0.007 exper * female - 0.008 exper * service+\\ + 0.0003 exper * educ + 0.003 educ * belogavg-\\ - 0.007 aboveavg - 0.17 belogavg.\end{aligned}$$

$F = 77.94,\ p = 3.3 \times 10^{-133},\ R^2 = 0.408,\ R_a^2 = 0.403.$

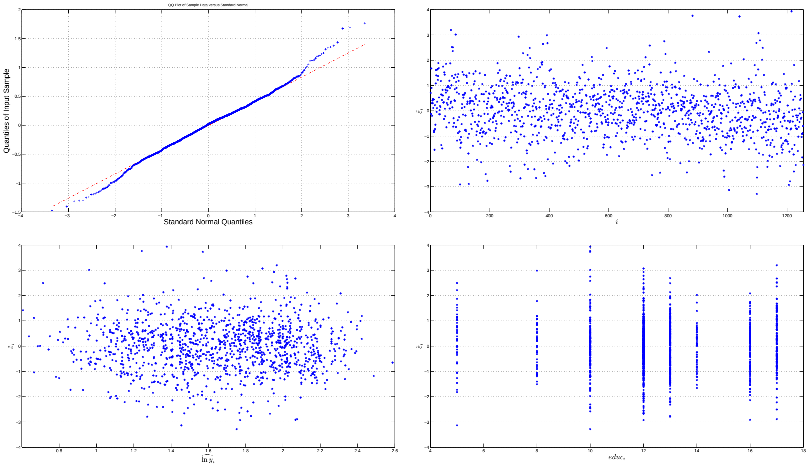
Критерий	p-value
Шапиро-Уилка (нормальность)	4.9×10^{-5}
знаковых рангов (несмещённость)	0.9071
Бройша-Пагана (гомоскедастичность)	3.5×10^{-5}

Признаки, коэффициенты при которых значимо отличаются от нуля (множественная проверка с дисперсиями Уайта): $exper$, $exper^2$, $union$, $female$, $educ$, $exper * service$.

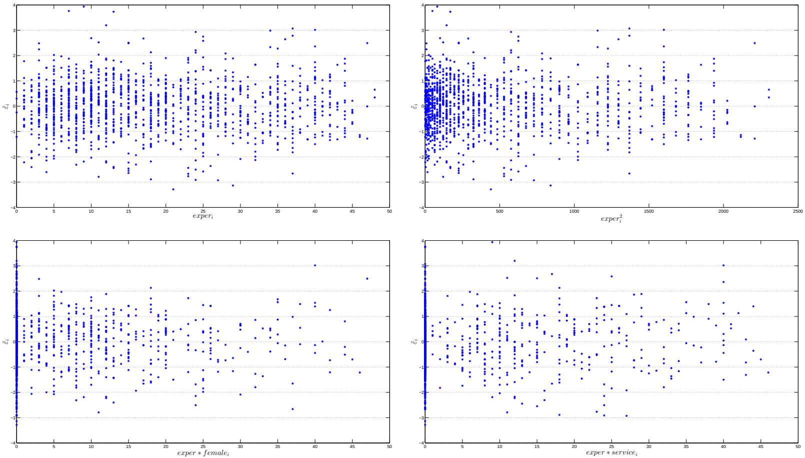
Модель 4 против модели 3

Критерий Давидсона-Маккиннона показывает превосходство модели 4 над моделью 3 ($p_1 = 2.8 \times 10^{-4}$, $p_2 = 0.1369$).

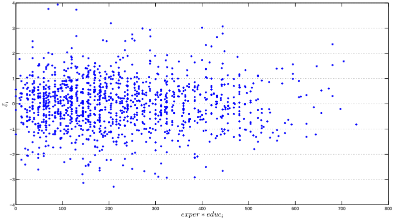
Остатки модели 4

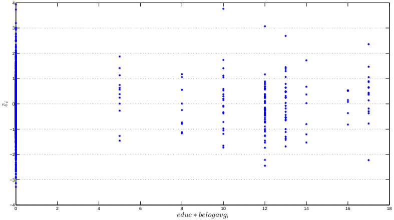


Остатки модели 4



Остатки модели 4





Модель 5

Редуцированная модель:

$$\ln wage = 0.36 + 0.04exper - 0.0006exper^2 + 0.17union - 0.41female + \\ + 0.08educ - 0.008exper * service - \\ - 0.006aboveavg - 0.13belogavg.$$

$F = 105.82,\ p = 1.4 \times 10^{-134},\ R^2 = 0.405,\ R_a^2 = 0.401.$

Критерий	p-value
Шапиро-Уилка (нормальность)	7.8×10^{-5}
знаковых рангов (несмещённость)	0.8774
Бройша-Пагана (гомоскедастичность)	1.1×10^{-5}

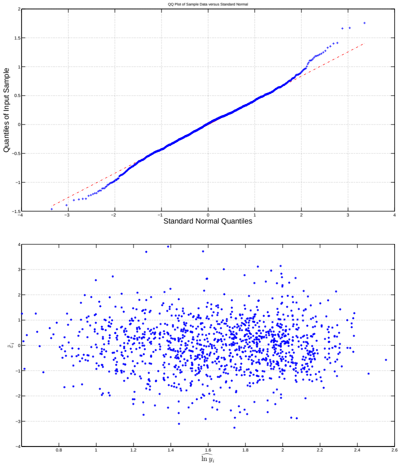
Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

Модель 5 против моделей 3 и 4

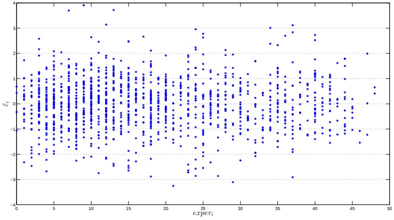
Критерий Давидсона-Маккиннона показывает превосходство модели 5 над моделью 3 ($p_1 = 0.0201, \; p_2 = 0.2965$).

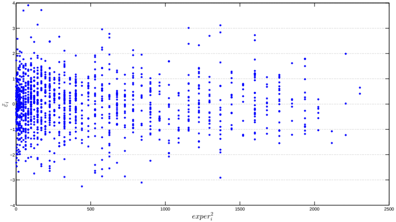
Критерий хи-квадрат с дисперсиями Уайта не показывает превосходства модели 4 над моделью 5 ($p = 0.0856$).

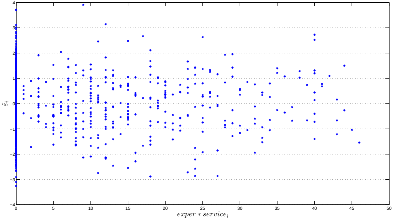
Остатки модели 5



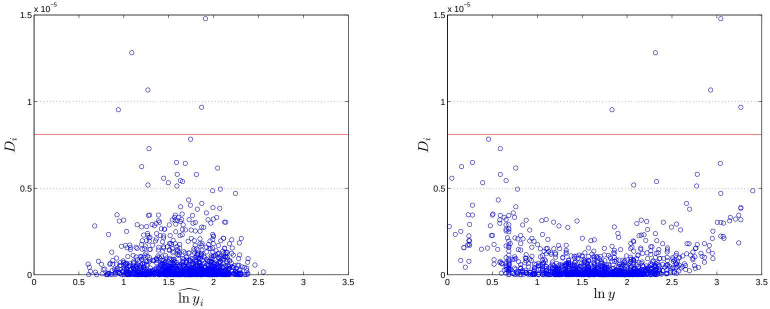
Остатки модели 5







Расстояние Кука для модели 5



Модель 6

Исключим наблюдения с наибольшими расстояниями Кука и перестроим модель 5:

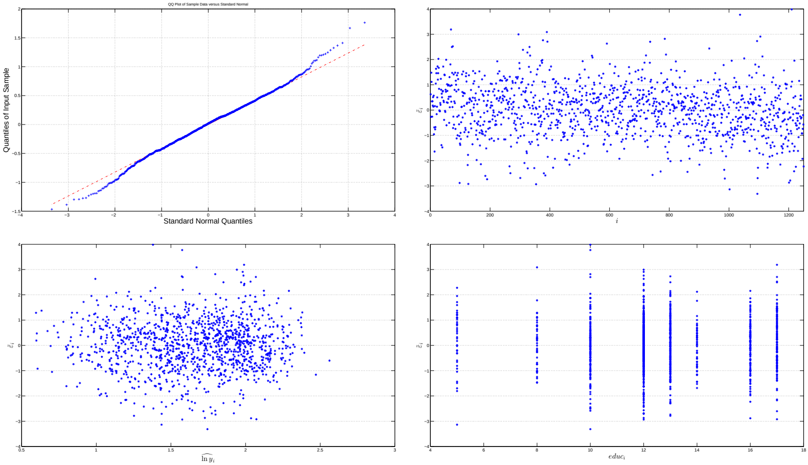
$$\begin{aligned}\ln wage = 0.34 + 0.04 exper - 0.0007 exper^2 + 0.18 union - 0.40 female+ \\ + 0.08 educ - 0.009 exper * service- \\ - 0.008 aboveavg - 0.15 belogavg.\end{aligned}$$

$F = 110.31,\ p = 5.2 \times 10^{-139},\ R^2 = 0.416,\ R_a^2 = 0.412.$

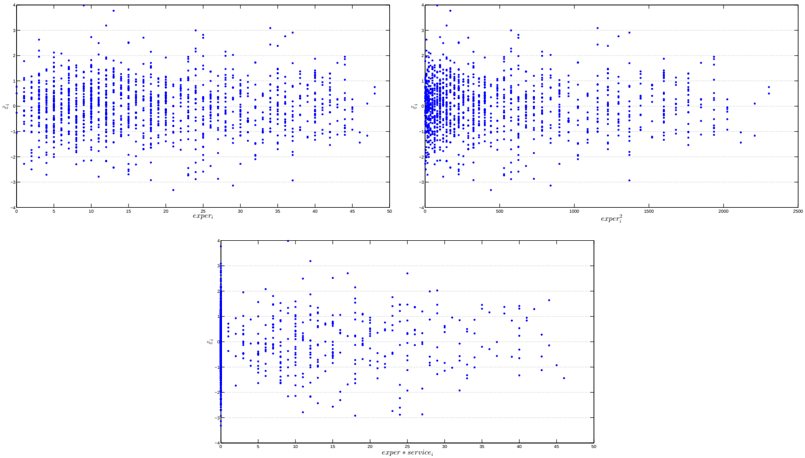
Критерий	p-value
Шапиро-Уилка (нормальность)	4.1×10^{-4}
знаковых рангов (несмещённость)	0.7591
Бройша-Пагана (гомоскедастичность)	1.0×10^{-5}

Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

Остатки модели 6

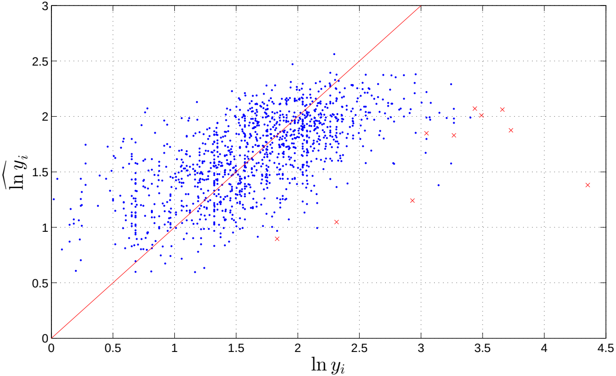


Остатки модели 6



Результат

Итоговая модель (№6) построена по 1250 из 1260 исходных наблюдений и объясняет 42% вариации логарифма отклика:



С учётом дополнительных факторов, участники опроса с привлекательностью ниже среднего получают на 15% меньше (95% доверительный интервал $(7.3\%, 22.9\%)$), а с привлекательностью выше среднего — на 0.8% меньше (95% доверительный интервал $(-4.8\%, 6.4\%)$).

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;
- отбор признаков;
- визуальный анализ остатков;
- проверка гипотез об остатках: нормальность, несмещённость, гомоскедастичность;
- анализ необходимости добавления взаимодействий и квадратов признаков;
- расчёт расстояний Кука, возможное удаление выбросов, обновление модели;
- выводы.

Литература

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

Литература

Дрейпер Н.Р., Смит Г. *Прикладной регрессионный анализ*. — М.: Издательский дом «Вильямс», 2007.
Кобзарь А.И. *Прикладная математическая статистика*. — М.: Физматлит, 2006.
Bretz F., Hothorn T., Westfall P. *Multiple Comparisons Using R*. — Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2010.
Cook D.R., Weisberg S. *Residuals and influence in regression*. — New York: Chapman & Hall, 1982.
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.
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*. — Mason: South-Western Cengage Learning, 2013.