Прикладной статистический анализ данных. 8. Обобщения линейной регрессии.

Рябенко Евгений
riabenko.e@gmail.com

I/2016

Обобщённая линейная модель

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

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

регрессионная модель:

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

линейная регрессионная модель:

$$\mu = X\beta;$$

обобщённая линейная регрессионная модель (GLM):

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

$g\left(x\right)$ — связующая функция — позволяет ограничить диапазон предсказываемых для μ значений.

Обобщённая линейная модель

В обычной линейной модели используется предположение о нормальности отклика:

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

В обобщённой линейной модели распределение y берётся из экспоненциального семейства:

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

	$Pois\left(\lambda\right)$	$Bin\left(N, p\right)$	$N\left(\mu, \sigma^2\right)$
$a\left(\phi\right)$	1	1	σ^2
$b\left(\theta\right)$	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
$g^{-1}\left(x\right)$	$e^x \in [0, \infty)$	$\frac{e^x}{1+e^x} \in [0, 1]$	$x \in \mathbb{R}$

Оценка параметров GLM

$\hat{\beta}$:

- оценивается методом максимального правдоподобия;
- существует и единственна,
- находится численно (например, методом Ньютона-Рафсона),
- состоятельна, асимптотически эффективна, асимптотически нормальна.

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

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

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

Доверительные интервалы

Для отдельного коэффициента β_j:

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

Для $g\left(\mathbb{E}\left(y\,|x_0\right)\right)$ — 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:

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

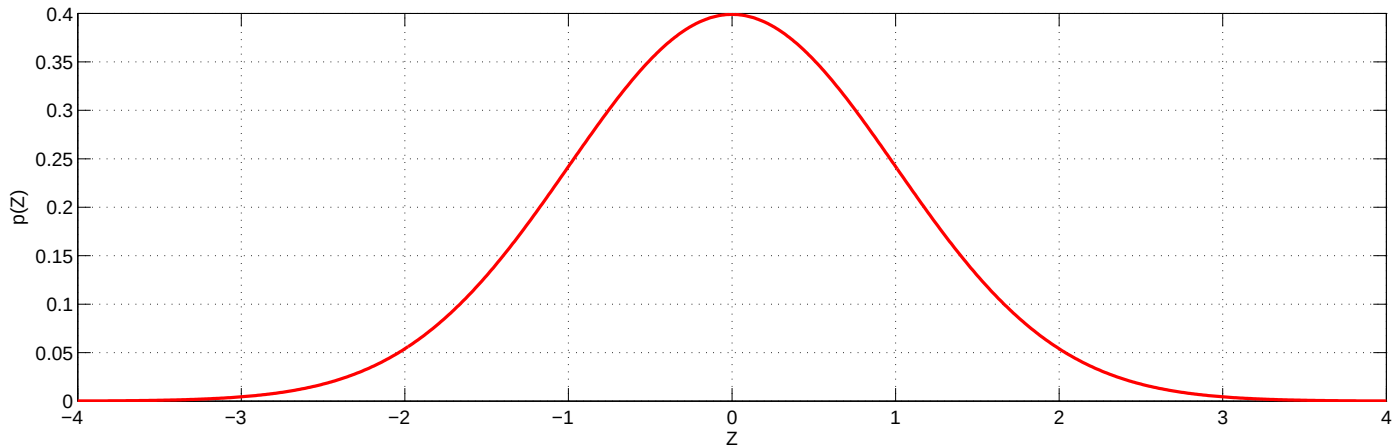
Критерий Вальда

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.



Критерий отношения правдоподобия

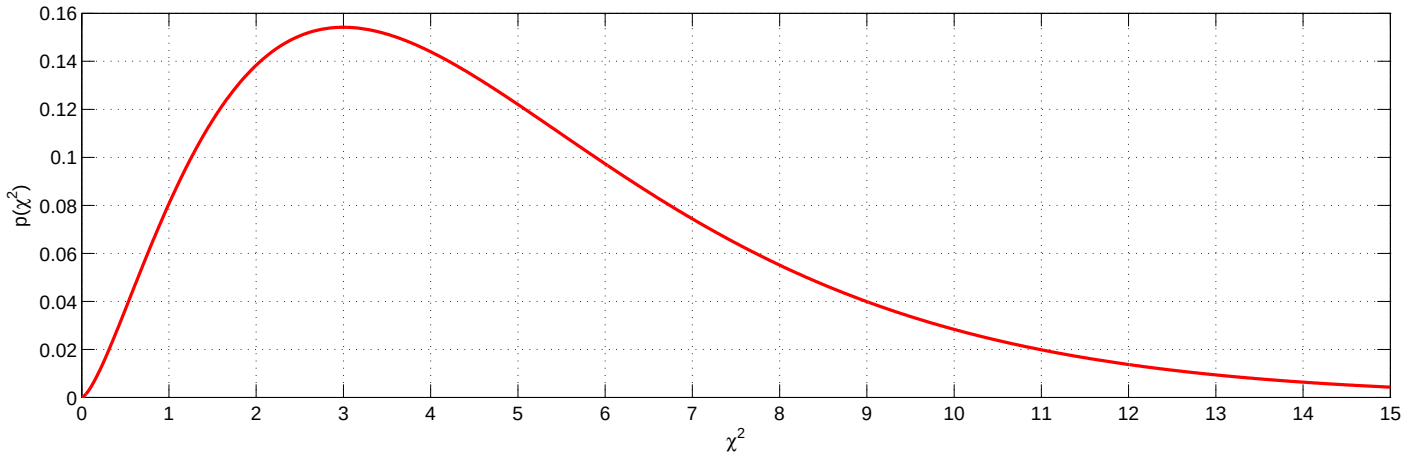
$$\underset{n\times(k+1)}{X} = \left(\underset{n\times(k+1-k_1)}{X_1}, \underset{n\times k_1}{X_2}\right); \qquad \underset{(k+1)\times 1}{\beta^T} = \left(\underset{(k+1-k_1)\times 1}{\beta_1^T}, \underset{k_1\times 1}{\beta_2^T}\right)^T;$$

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

альтернатива: $H_1 \colon H_0$ неверна;

статистика: $G = 2\left(L_r - L_{ur}\right);$

$G \sim \chi^2_{k_1}$ при H_0.



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.

Значимость категориальных предикторов

Категориальный предиктор, кодируемый несколькими фиктивными переменными, необходимо включать или исключать целиком. Значимость соответствующих фиктивных переменных проверяется в совокупности с помощью критерия отношения правдоподобия.

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

Меры качества моделей

Аномальность (deviance):

$$D = -2L.$$

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

Для сравнения моделей с разным числом признаков можно использовать информационные критерии.
AIC — информационный критерий Акаике:

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

$AICc$ — он же с поправкой на случай небольшого размера выборки;

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

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

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

Постановка

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

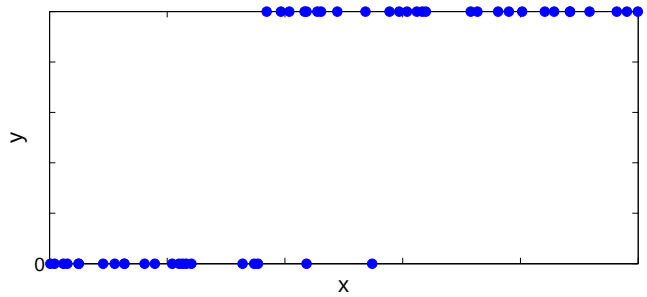
$1, \ldots, n$ — объекты;
$x_1, \ldots, x_k$ — предикторы;
y — отклик, $y_i \in \{0, 1\}$.

Хотим найти такой вектор β, что

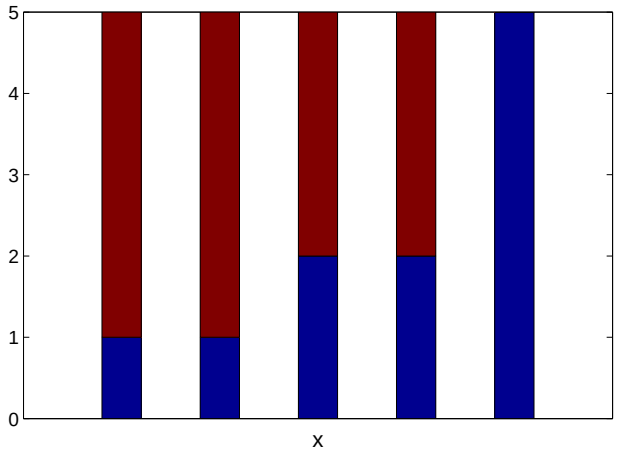
$$\mu = \mathbb{E}\,(y\,|X\,) = P\,(y = 1\,|X\,) \equiv \pi(x) \approx X\beta.$$

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.



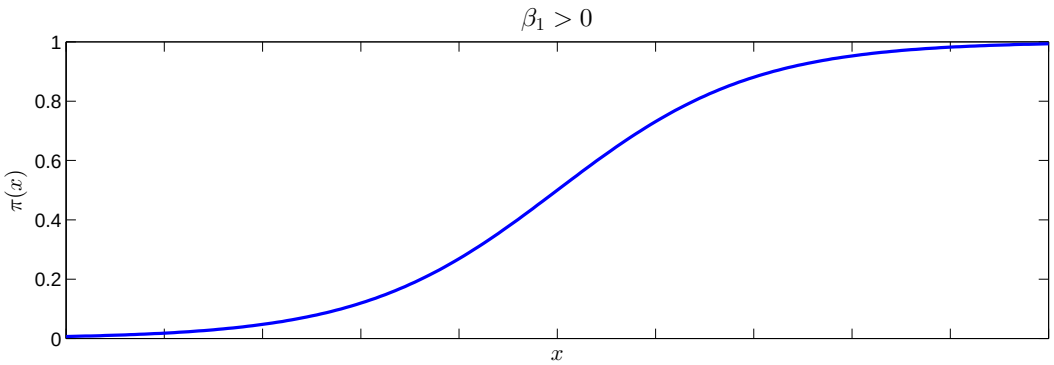
$\Longrightarrow$ логистическая регрессия может также использоваться
для моделирования $y \in [0, 1]$.

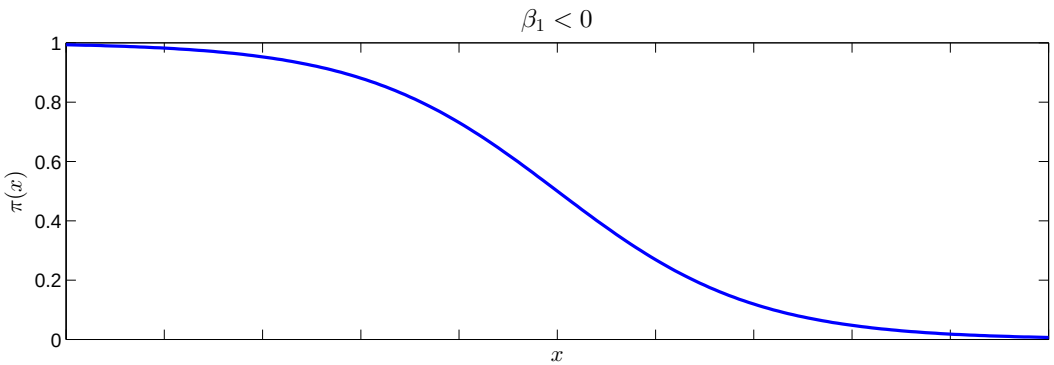
Параметризация

Логит:

$$g(x) = g(\pi(x)) = \ln \frac{\pi(x)}{1 - \pi(x)} = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon,$$

$$\hat{\pi}(x) = \frac{e^{\hat{g}(x)}}{1 + e^{\hat{g}(x)}} = \frac{e^{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x}}{1 + e^{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x}}.$$





Параметризация

Логит:

$$g(x) = g(\pi(x)) = \ln \frac{\pi(x)}{1-\pi(x)} = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon,$$

$$\hat{\pi}(x) = \frac{e^{\hat{g}(x)}}{1+e^{\hat{g}(x)}} = \frac{e^{\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1 x}}{1+e^{\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1 x}}.$$

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

$$\pi(10000000 + 200000) - \pi(10000000) < \pi(500000 + 200000) - \pi(500000).$$

Относительный риск

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

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

Если $y_1 \sim Ber(p_1)$, $y_2 \sim Ber(p_2)$, то относительный риск (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

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

Роль коэффициентов логистической регрессии

$$\hat{g}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x.$$

Пусть $x = [\text{возраст} \geq 55]$, $y = [\text{есть сердечные заболевания}]$. По $\hat{\beta}_1$ легко оценить относительный риск получения заболевания пожилыми людьми:

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

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

Настройка параметров

ММП:

$$P(x_i, 1) = \pi(x_i),$$
$$P(x_i, 0) = 1 - \pi(x_i),$$
$$l(\beta) = \prod_{i=1}^{n} \pi(x_i)^{y_i} (1 - \pi(x_i))^{1-y_i},$$
$$L(\beta) = \ln l(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i \ln \pi(x_i) + (1 - y_i) \ln(1 - \pi(x_i))),$$
$$\hat{\beta} = \operatorname*{argmax}_{\beta} L(\beta).$$

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 значимость признаков нужно определять не по критерию Вальда, а методом вероятностного профиля (profile likelihood).
В R это можно сделать инверсией доверительных интервалов для коэффициентов модели, возвращаемых функцией confint.

Доверительные интервалы

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 $x = x_0$:

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

Линейность логита

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

Методы анализа линейности логита:

- сглаженные диаграммы рассеяния;
- фиктивные переменные по квартилям;
- дробные полиномы.

Сглаженные диаграммы рассеяния (smoothed scatterplots)

Рассмотрим оценку логита, полученную ядерным сглаживанием по x_j:

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

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

График функции $\bar{l}_{sm}(x_j)$ должна быть похож на прямую.

Дробные полиномы (fractional polynomials)

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.

1. Настраиваются модели с заменой x_j на допустимые степени признака x_j, например, из множества $S = \{-2, -1, -0.5, 0, 0.5, 1, 2, 3\}$. Выбирается степень, максимизирующая правдоподобие.
2. Настраиваются модели с заменой x_j на двухкомпонентный полином x_j вида $\beta_{j_1} x_j^{p_1} + \beta_{j_2} x_j^{p_2}, \quad p_1, p_2 \in S$ (если $p_1 = p_2$, то берётся $\beta_{j_1} x_j^{p_1} + \beta_{j_2} x_j^{p_1} \ln x_j$). Выбираются степени, максимизирующая правдоподобие.
3. Если модель с полиномом второй степени значимо не лучше, чем линейная, используется линейная модель.
4. 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

1. 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.
2. Строится 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.
3. 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.

Содержательный отбор признаков

4. Для непрерывных признаков полученной модели проверяется линейность логита. В случае обнаружения нелинейности признаки заменяются на соответствующие полиномы.
5. 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?

$$y = [\pi(x) \geq p_0].$$

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

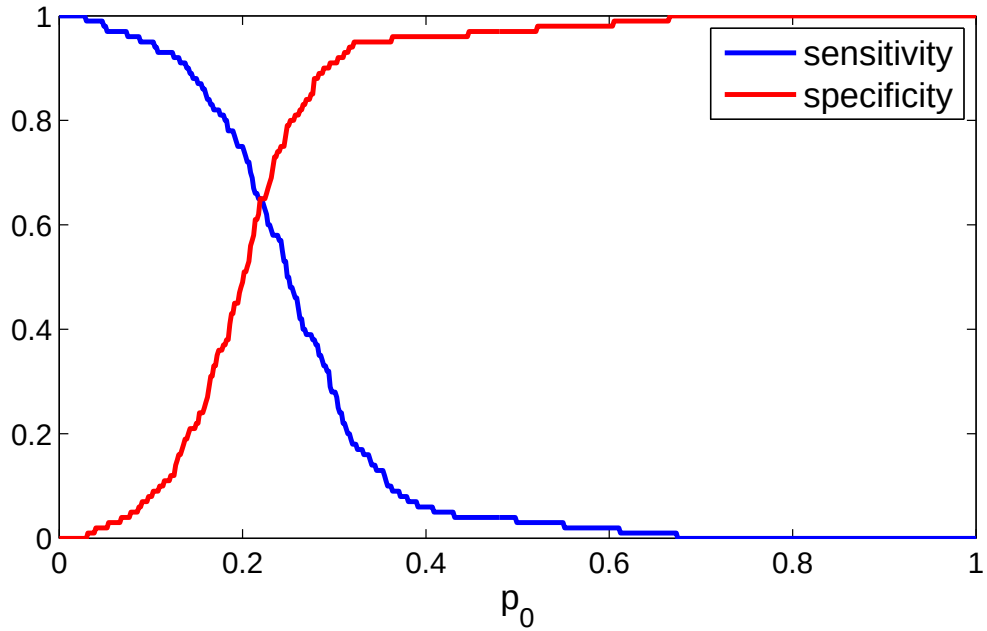
Порог классификации

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

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

Чувствительность: $\frac{16}{16+131} \approx 10.9\%$.

Специфичность: $\frac{417}{11+417} \approx 97.4\%$.



Пример

Задача интерпретации кардиотокографии:
`https://yadi.sk/d/n4EKlhNwfnM3p`

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.

Постановка

$1, \ldots, n$ — объекты;
$x_1, \ldots, x_k$ — предикторы;
y — счётный отклик, $y_i \in \mathbb{N}$.

$$\mathbb{E}\left(y \,|x\right) = ?$$

Базовый метод — пуассоновская регрессия:

$$f\left(y \,|x\right) = \frac{e^{-\mu}\mu^y}{y!},$$

$$\mu = \mathbb{E}\left(y \,|x\right) = e^{x^T\beta},$$

$$\omega \equiv \mathbb{D}\left(y \,|x\right) = e^{x^T\beta}.$$

Примеры

Стандартная пуассоновская модель:
x_{ij} — макроэкономические показатели, y_i — число банкротств банков,

$$\ln \mu = X\beta.$$

Может использоваться также для нормированных данных:
N_i — общее число банков, $\frac{1000 y_i}{N_i}$ — число банкротств на 1000 банков,

$$\ln \frac{1000\mu}{N} = X\beta, \quad \ln \mu = \ln \frac{N}{1000} + X\beta.$$

Настройка параметров

ММП:

$$l(\beta) = \prod_{i=1}^{n} \frac{e^{-e^{x^T\beta}} \left(e^{x^T\beta}\right)^{y_i}}{y_i!},$$

$$L(\beta) = \ln l(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i x_i^T \beta - e^{x_i^T\beta} - ln\left(y_i!\right)\right),$$

$$\hat{\beta} = \underset{\beta}{\mathsf{argmax}}\, L(\beta) \Leftrightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - e^{x_i^T\beta}\right) x_i = 0.$$

Доверительные интервалы

Для отдельного коэффициента β_j:

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

Для $\ln \mathbb{E}\left(y \mid x = x_0\right) = x_0^T\beta$:

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

Для $\mathbb{E}\left(y \mid x = x_0\right) = e^{x_0^T\beta}$:

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

Приближённый предсказательный интервал для $y\left(x_0\right)$ — отклика на новом объекте x_0:

$$e^{x_0^T\hat{\beta}} \pm 2\sqrt{e^{x_0^T\hat{\beta}}}.$$

Overdispersion/underdispersion

Пуассоновская модель предполагает, что $\omega = \mu$ (equidispersion).

- МП-оценки β остаются состоятельными, даже если распределение $y|x$ не является пуассоновским — достаточно того, что модель $\mathbb{E}(y|x)$ определена корректно.
- Оценки дисперсии $\hat{\beta}$ и соответствующие критерии требуют верного определения и $\mathbb{D}(y|x)$, поэтому они дают некорректные результаты, если матожидание и дисперсия не равны.
- Предположение о равенстве матожидания и дисперсии можно проверить; если оно не выполняется, можно изменить модель. Это позволит построить корректные критерии и более эффективные оценки β.

Overdispersion/underdispersion

Overdispersion — отрицательная биномиальная модель:

$$\omega(\alpha) = \mu + \alpha\mu^2,$$

$$f(y|\mu,\alpha) = \frac{\Gamma\left(y+\alpha^{-1}\right)}{\Gamma(y+1)\,\Gamma\left(\alpha^{-1}\right)}\left(\frac{\alpha^{-1}}{\alpha^{-1}+\mu}\right)^{\alpha^{-1}}\left(\frac{\mu}{\alpha^{-1}+\mu}\right)^{y}.$$

Underdispersion — пороговая модель (hurdle model):

$$P(y=j) = \begin{cases} f_1(0), & j=0, \\ \frac{1-f_1(0)}{1-f_2(0)} f_2(j), & j>0. \end{cases}$$

Можно построить МП-оценки для α и β, а затем проверить гипотезу $\alpha = 0$ с помощью критерия отношения правдоподобия.

Устойчивая оценка дисперсии

Дисперсия оценки максимального квазиправдоподобия:

$$\mathbb{D}_{QML}\left(\hat{\beta}\right) = \left(\sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i x_i^T\right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^{n} \omega_i x_i x_i^T\right) \left(\sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i x_i^T\right)^{-1}.$$

Устойчивая состоятельная оценка дисперсии, подходящая для любого вида ω:

$$\mathbb{D}_{R}\left(\hat{\beta}\right) = \left(\sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i x_i^T\right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^{n} (y_i - \mu_i)^2 x_i x_i^T\right) \left(\sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i x_i^T\right)^{-1}.$$

Меры качества модели

Относительные:

- аномальность:

$$D_P = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i \ln \frac{y_i}{\hat{\mu}_i} - (y_i - \hat{\mu}_i) \right),$$

$$D_{NB} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i \ln \frac{y_i}{\hat{\mu}_i} - \left(y_i + \alpha^{-1}\right) \ln \frac{y_1 + \alpha^{-1}}{\hat{\mu}_i + \alpha^{-1}} \right);$$

- AIC:

$$AIC = -2L + 2\left(k + 1\right).$$

Абсолютная:

- псевдо-R^2:

$$R^2_{DEV} = 1 - \frac{D}{D_0},$$

D_0 — аномальность модели с одной константой.

Пример

Число визитов к доктору:
https://yadi.sk/d/iaB-RbvRfNcC3

Требования к решению задачи методом пуассоновской регрессии

- визуализация данных, оценка наличия выбросов;
- отбор признаков: выбор наилучшей линейной модели, проверка равенства среднего и дисперсии, анализ необходимости добавления взаимодействий, проверка адекватности финальной модели (сравнение с устойчивой моделью, анализ влиятельных наблюдений);
- выводы.

Литература

- обобщённые линейные модели — Olsson;
- логистическая регрессия — Hosmer;
- регрессия на счётных данных — Cameron.

Cameron C.A., Trivedi P.K. *Regression Analysis of Count Data*. — Cambridge University Press, 2013.

Hosmer D.W., Lemeshow S., Sturdivant R.X. *Applied Logistic Regression*. — Hoboken: John Wiley & Sons, 2013.

Olsson U. *Generalized Linear Models: An Applied Approach*. — Lund: Studentlitteratur, 2004.