

Прикладной статистический анализ данных.  
8. Обобщения линейной регрессии.

Рябенко Евгений  
riabenko.e@gmail.com

I/2015

## Обобщённая линейная модель

$1, \dots, n$  — объекты;

$x_1, \dots, x_k$  — предикторы;

$y$  — отклик;

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

регрессионная модель:

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

линейная регрессионная модель:

$$\mu = X\beta;$$

обобщённая линейная регрессионная модель (GLM):

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

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

## Обобщённая линейная модель

В обычной линейной модели используется предположение о нормальности отклика:

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

В обобщённой линейной модели распределение  $y$  берётся из экспоненциального семейства:

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

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

## 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  $n$ .

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

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

## Доверительные интервалы

Для отдельного коэффициента  $\beta_j$ :

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

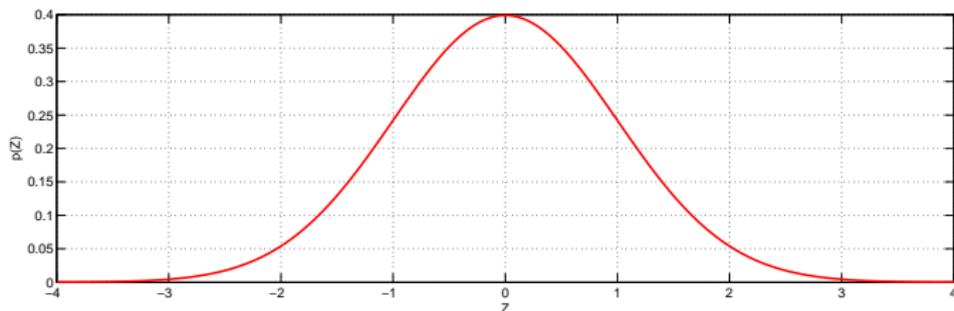
Для  $g(\mathbb{E}(y|x_0))$  — преобразованного матожидания отклика на новом объекте  $x_0$ :

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

Для матожидания отклика на новом объекте  $x_0$ :

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

## Критерий Вальда

нулевая гипотеза:  $H_0: \beta_j = 0;$ альтернатива:  $H_1: \beta_j < \neq > 0;$ статистика: 
$$T = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{(I^{-1}(\hat{\beta}))_{jj}}};$$
 $T \sim N(0, 1)$  при  $H_0$ .

## Критерий отношения правдоподобия

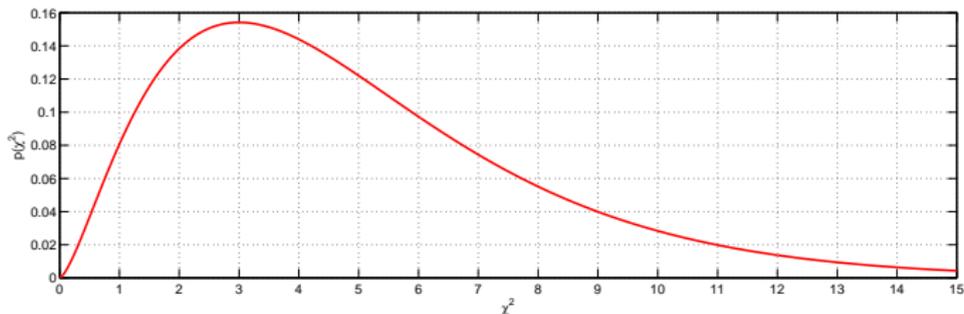
$$X_{n \times (k+1)} = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ n \times (k+1-k_1) & n \times k_1 \end{pmatrix}; \quad \beta^T_{(k+1) \times 1} = \begin{pmatrix} \beta_1^T & \beta_2^T \\ (k+1-k_1) \times 1 & k_1 \times 1 \end{pmatrix}^T;$$

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

альтернатива:  $H_1: H_0$  неверна;

статистика:  $G = 2(L_r - L_{ur});$

$G \sim \chi^2_{k_1}$  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.

$1, \dots, n$  — объекты;

$x_1, \dots, x_k$  — предикторы;

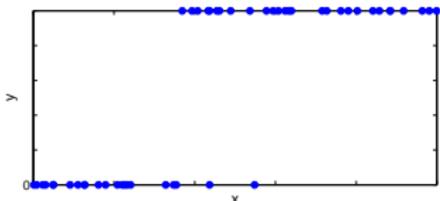
$y$  — отклик,  $y_i \in \{0, 1\}$ .

Хотим найти такой вектор  $\beta$ , что

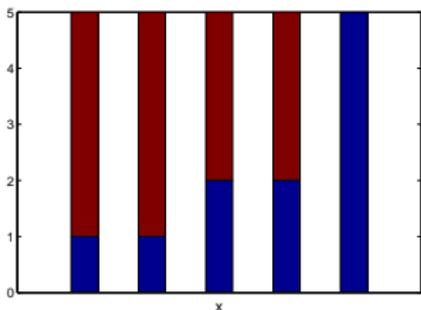
$$\mu = \mathbb{E}(y|X) = P(y = 1|X) \equiv \pi(x) \approx X\beta.$$

# 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.



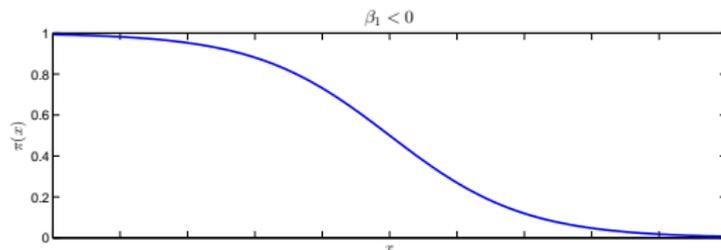
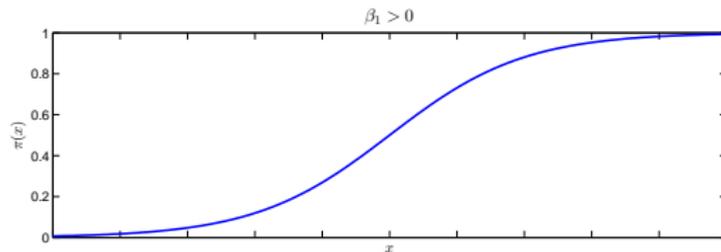
⇒ логистическая регрессия может также использоваться для моделирования  $y \in [0, 1]$ .

## 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	
	$\geq 55$	$< 55$
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:

$$P(x_i, 1) = \pi(x_i),$$

$$P(x_i, 0) = 1 - \pi(x_i),$$

$$l(\beta) = \prod_{i=1}^n \pi(x_i)^{y_i} (1 - \pi(x_i))^{1-y_i},$$

$$L(\beta) = \ln l(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i \ln \pi(x_i) + (1 - y_i) \ln (1 - \pi(x_i))),$$

$$\hat{\beta} = \underset{\beta}{\operatorname{argmax}} L(\beta).$$

## 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  $\beta_j$ :

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

Для  $g(x_0)$  — логита нового объекта  $x_0$ :

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

Для вероятности  $y = 1$  при  $x = x_0$ :

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

## 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  $x_j$ :

$$\bar{y}_{sm}(x_{ji}) = \frac{\sum_{l=1}^n y_l K\left(\frac{x_{jl} - x_{li}}{h}\right)}{\sum_{l=1}^n K\left(\frac{x_{jl} - x_{li}}{h}\right)},$$
$$\bar{l}_{sm}(x_{ji}) = \ln \frac{\bar{y}_{sm}(x_{ji})}{1 - \bar{y}_{sm}(x_{ji})}.$$

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  $\beta_{j1}x_j^{p_1} + \beta_{j2}x_j^{p_2}$ ,  $p_1, p_2 \in S$  (если  $p_1 = p_2$ , то берётся  $\beta_{j1}x_j^{p_1} + \beta_{j2}x_j^{p_1} \ln x_j$ ). 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

- ❶ Для непрерывных признаков полученной модели проверяется линейность логита. В случае обнаружения нелинейности признаки заменяются на соответствующие полиномы.
- ❷ Исследуется возможность добавления в полученную модель взаимодействий факторов. Добавляются значимые интерпретируемые взаимодействия.
- ❸ 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.

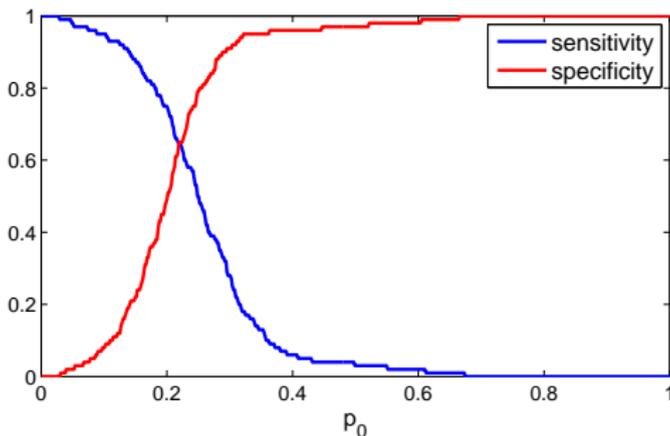
# Порог классификации

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

	$y$	
	1	0
$\hat{y}$		
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/n4EK1hNwfnM3p>

## 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

$1, \dots, n$  — объекты;

$x_1, \dots, x_k$  — предикторы;

$y$  — счётный отклик,  $y_i \in \mathbb{N}$ .

$$\mathbb{E}(y | x_1, \dots, x_k) = \mathbb{E}(y | x) = ?$$

Базовый метод — пуассоновская регрессия:

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

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

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

## 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,  $\frac{1000y_i}{N_i}$  — число банкротств на 1000 банков,

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

## Настройка параметров

ММП:

$$l(\beta) = \prod_{i=1}^n \frac{e^{-e^{x_i^T \beta}} (e^{x_i^T \beta})^{y_i}}{y_i!},$$
$$L(\beta) = \ln l(\beta) = \sum_{i=1}^n \left( y_i x_i^T \beta - e^{x_i^T \beta} - \ln(y_i!) \right),$$
$$\hat{\beta} = \underset{\beta}{\operatorname{argmax}} L(\beta) \Leftrightarrow$$
$$\sum_{i=1}^n \left( y_i - e^{x_i^T \beta} \right) x_i = 0.$$

## Доверительные интервалы

Для отдельного коэффициента  $\beta_j$ :

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

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

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

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

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

Приближённый предсказательный интервал для  $y(x_0)$  — 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  $\beta$  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  $\beta$ .

# Overdispersion/underdispersion

Overdispersion — отрицательная биномиальная модель:

$$\omega(\alpha) = \mu + \alpha\mu^2,$$
$$f(y|\mu, \alpha) = \frac{\Gamma(y + \alpha^{-1})}{\Gamma(y + 1)\Gamma(\alpha^{-1})} \left(\frac{\alpha^{-1}}{\alpha^{-1} + \mu}\right)^{\alpha^{-1}} \left(\frac{\mu}{\alpha^{-1} + \mu}\right)^y.$$

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  $\alpha$  и  $\beta$ , а затем проверить гипотезу  $\alpha = 0$  с помощью критерия отношения правдоподобия.

## Устойчивая оценка дисперсии

Дисперсия оценки максимального квазиправдоподобия:

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

Устойчивая состоятельная оценка дисперсии, подходящая для любого вида  $\omega$ :

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

## Меры качества модели

Относительные:

- аномальность:

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

- AIC:

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

Абсолютная:

- псевдо- $R^2$ :

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

 $D_0$  — 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.