# Прикладной статистический анализ данных. 7. Регрессионный анализ.

Рябенко Евгений
riabenko.e@gmail.com

17 октября 2014 г.

# Постановка задачи линейной регрессии

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

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

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

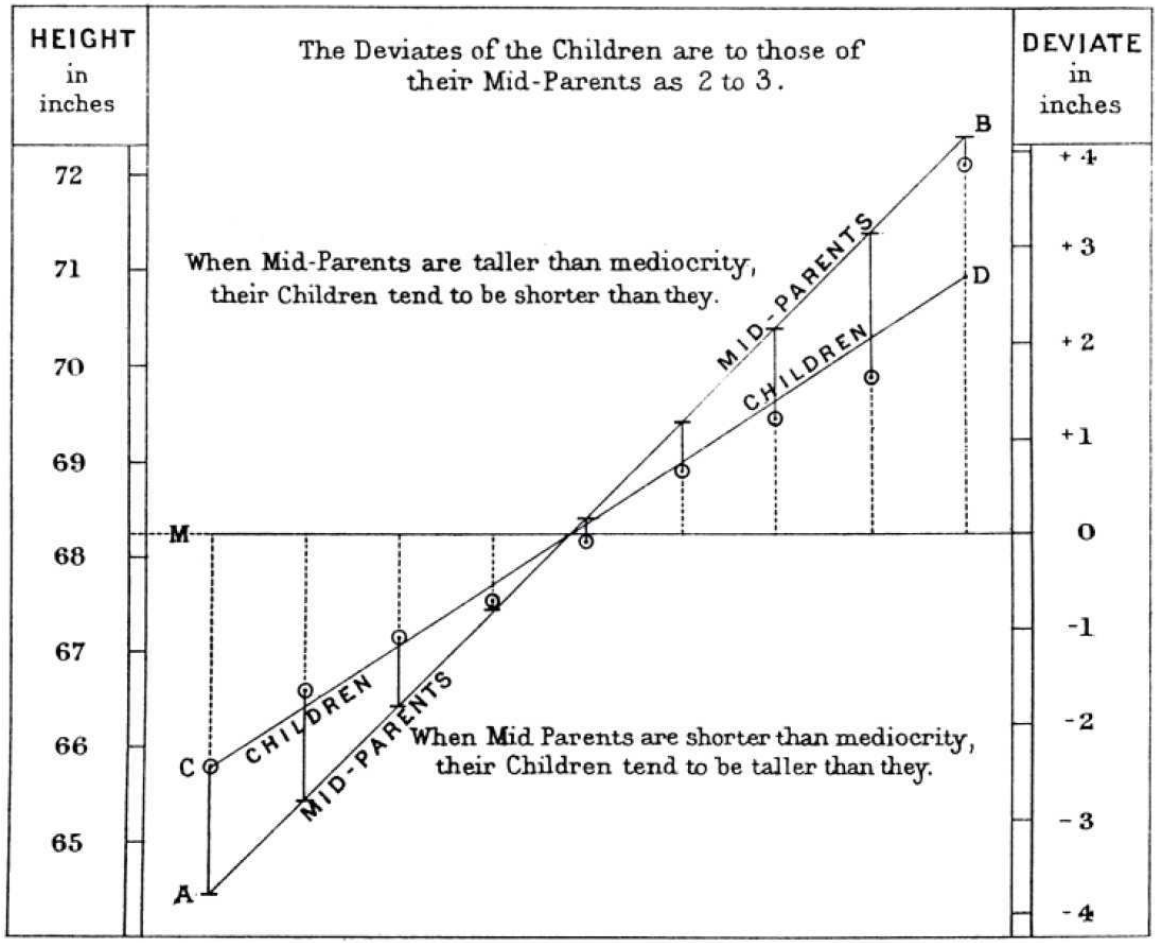
$\mathbb{E}\left(y \,|x_1, \ldots, x_k\right) = f(x_1, \ldots, x_k)$ — модель регрессии;

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

Здесь и далее $n > k$ $(n \gg k)$.

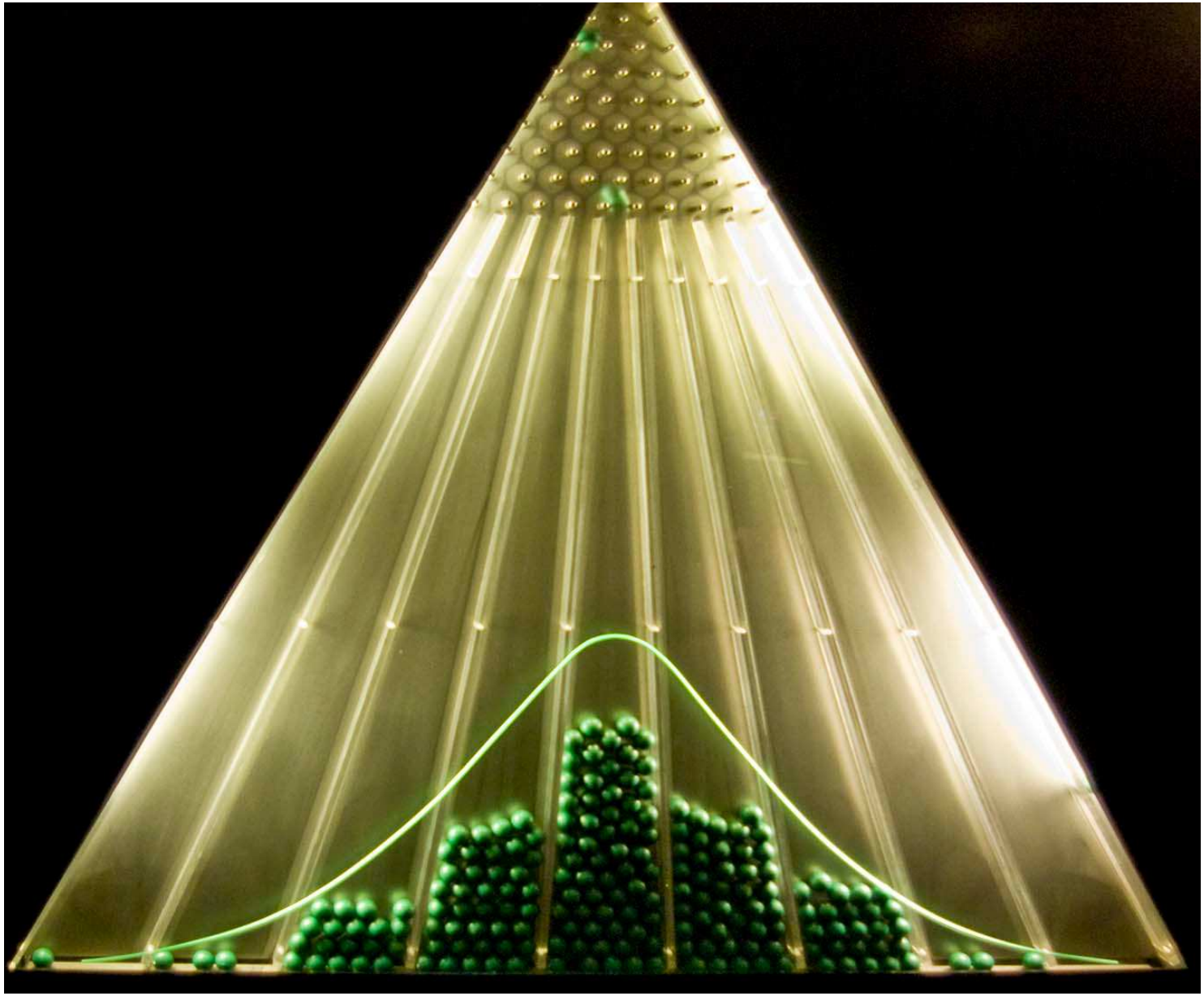
# Первое появление

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:

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

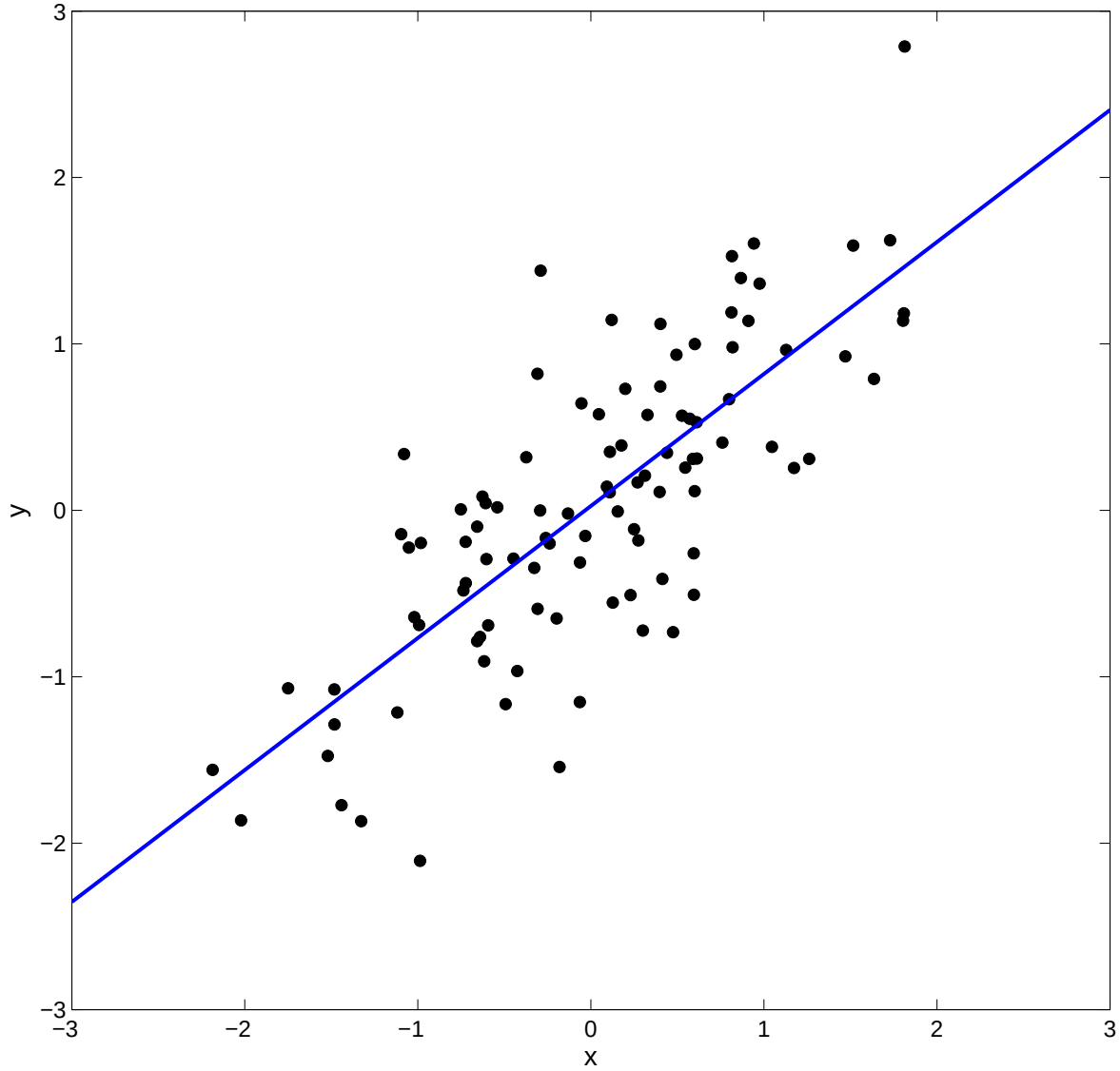
$$\|y - X\beta\|_2^2 \to \min_{\beta};$$

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

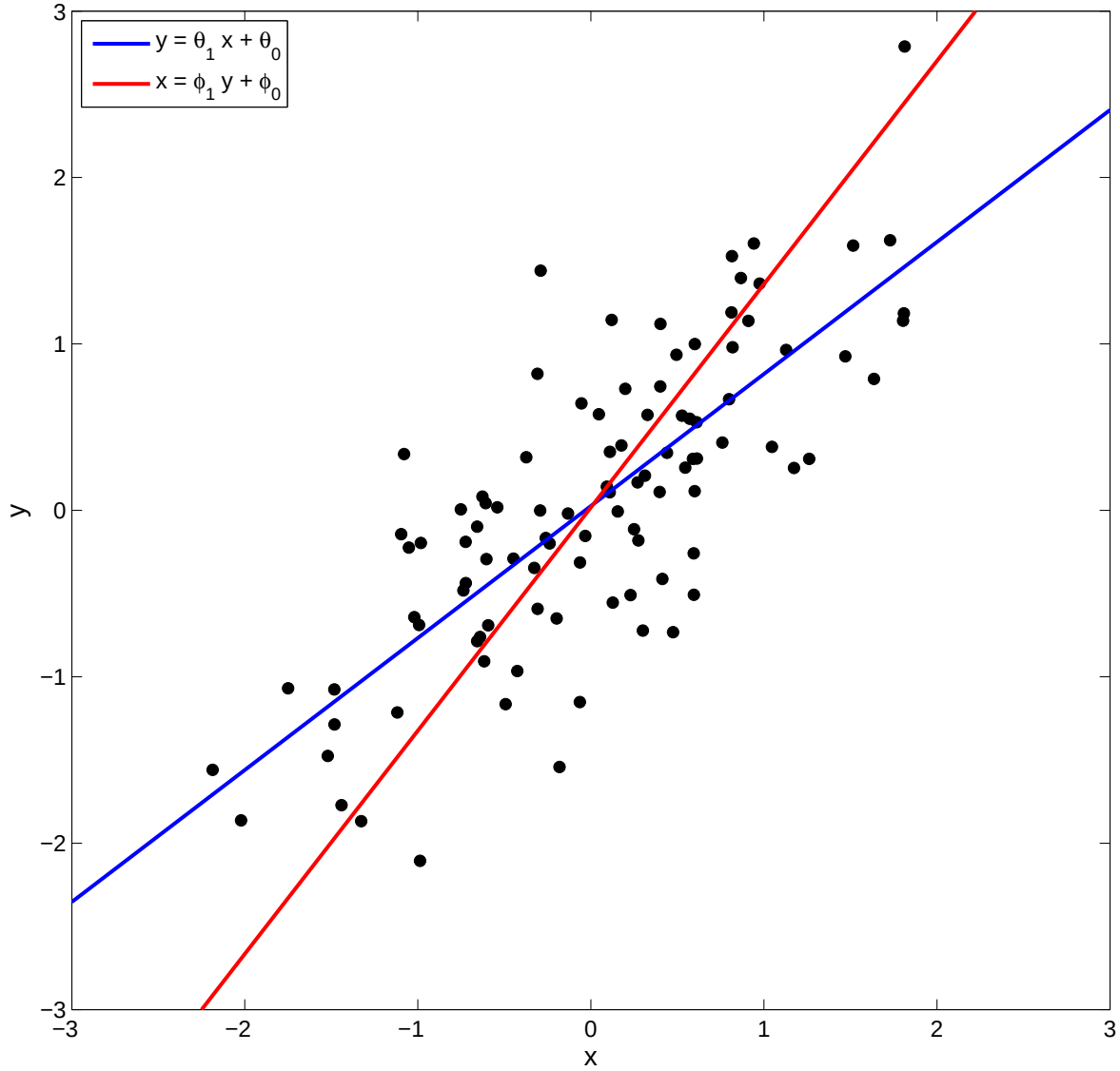
$$\hat{\beta} = \left( X^T X \right)^{-1} X^T y,$$

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

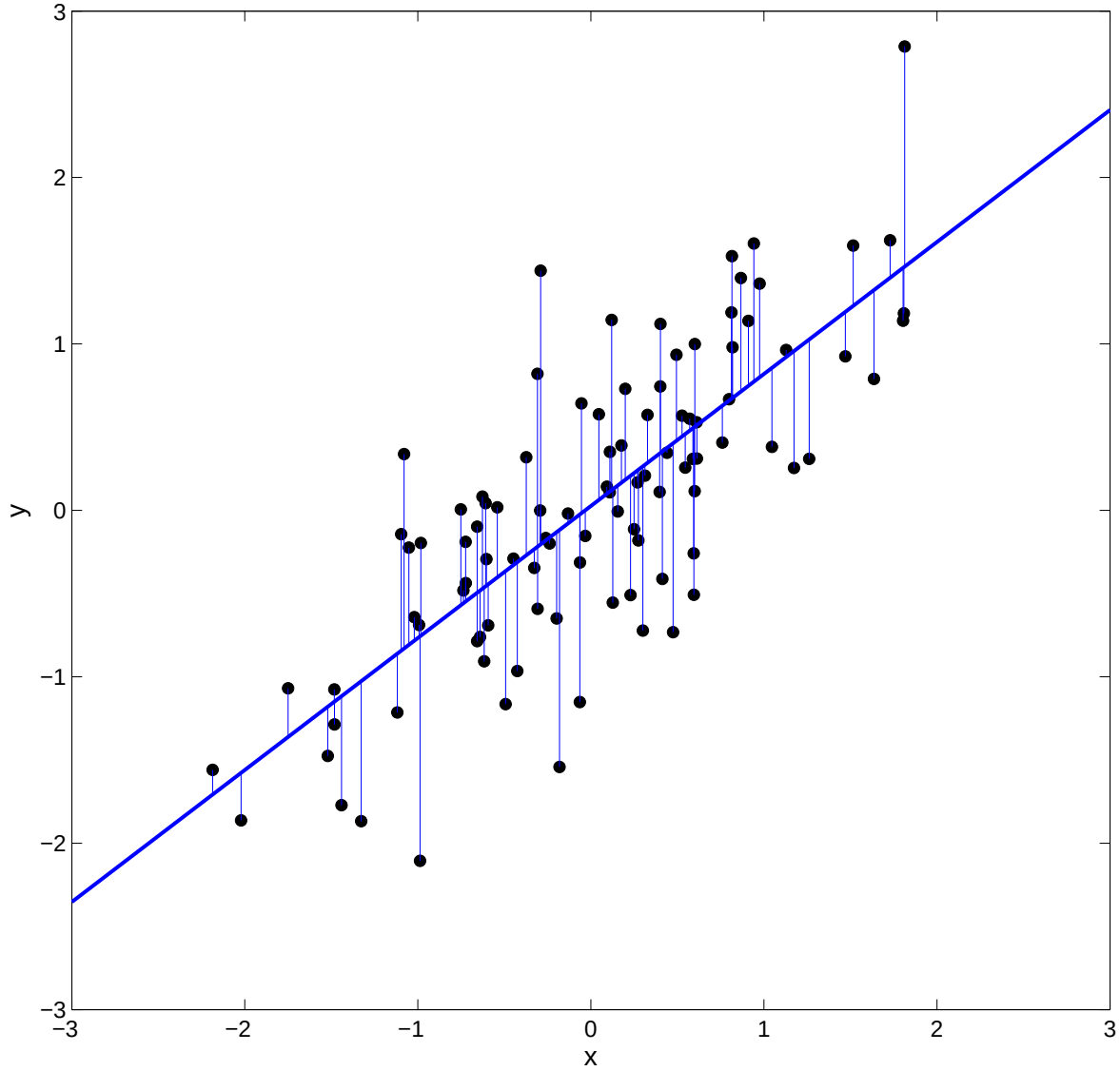
# Инверсия задачи регрессии



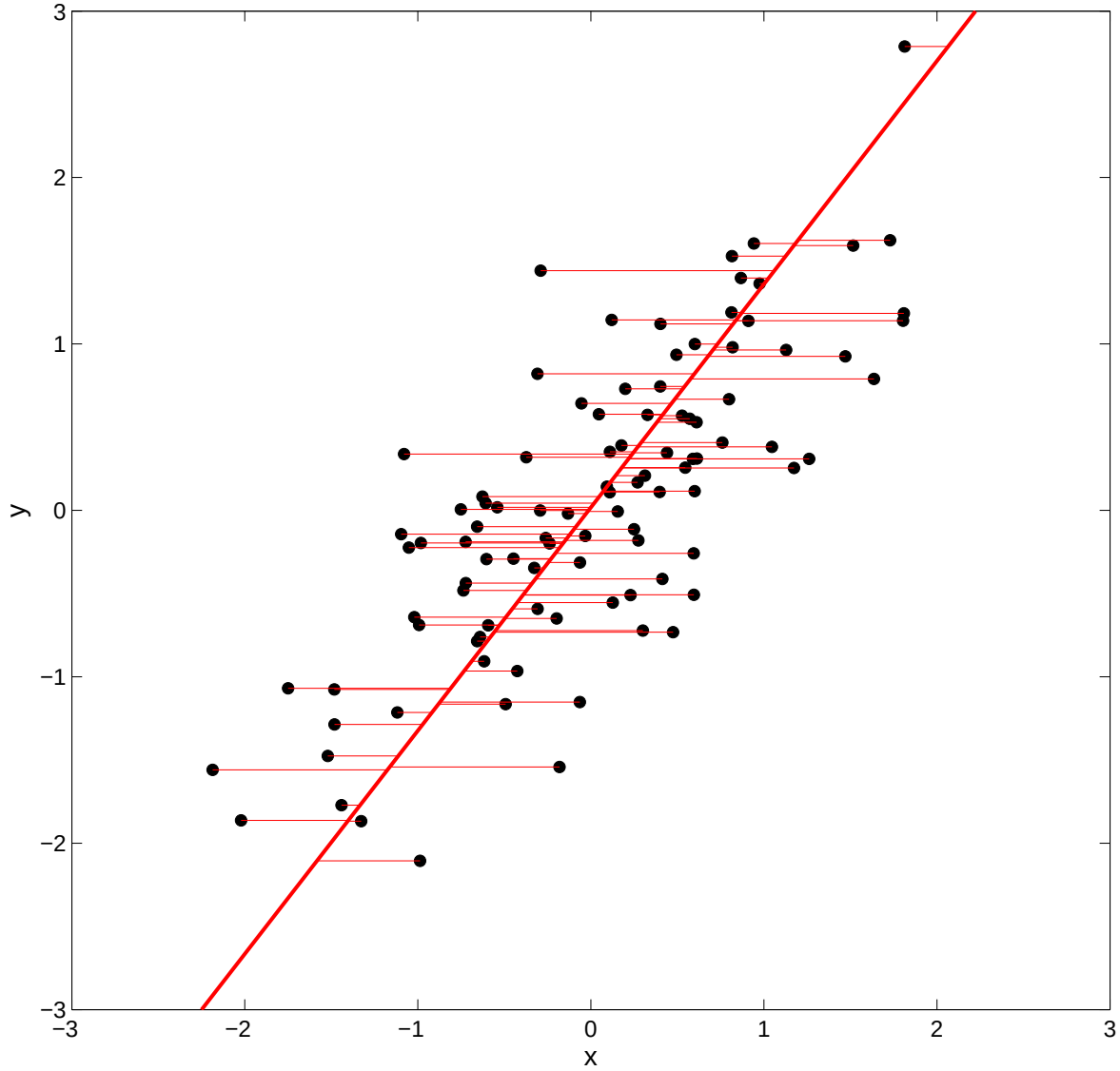
# Инверсия задачи регрессии



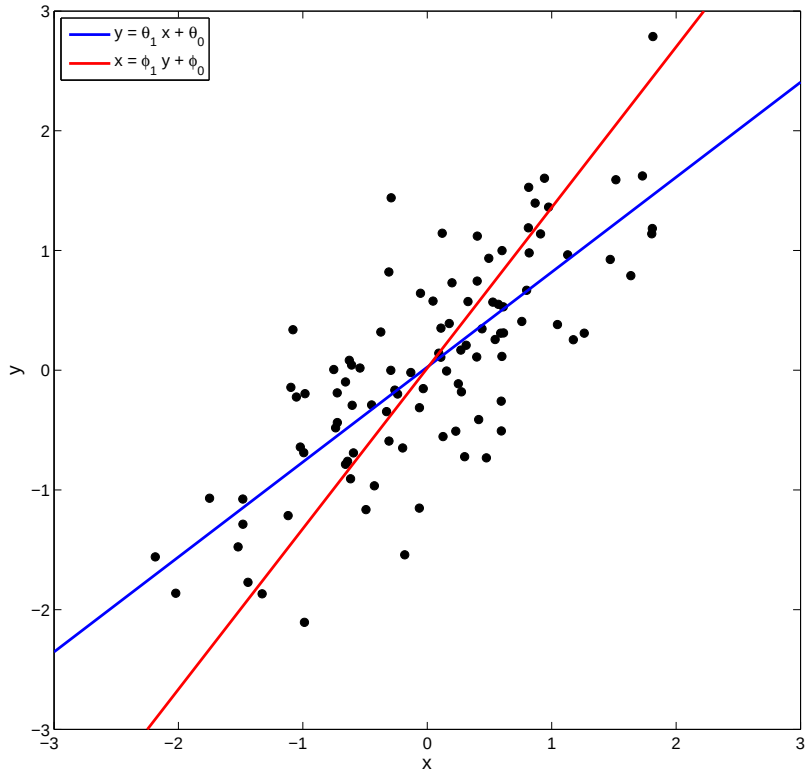
# Инверсия задачи регрессии



# 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 $y$.

# 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 $\beta_1, \beta_2$ оценивают среднюю разницу в уровнях зарплат инженера и управляющего с рабочим.
- При deviation-кодировании коэффициенты $\beta_1, \beta_2$ оценивают среднюю разницу в уровнях зарплат инженера и управляющего со средним по всем должностям.

# 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 отклика: $y = X\beta + \varepsilon$.
2. Случайность выборки: наблюдения $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ независимы.
3. Полнота ранга: ни один из признаков не является константой или линейной комбинацией других признаков ни в популяции, ни в выборке $(\operatorname{rank} X = k)$.
4. Случайность ошибок: $\mathbb{E}(\varepsilon | X) = 0$.

В предположениях (1-4) МНК-оценки коэффициентов $\beta$ являются несмещёнными:

$$\mathbb{E}\hat{\beta}_j = \beta_j, \ j = 0, \ldots, k,$$

и состоятельными:

$$\forall \gamma > 0 \ \lim_{n \to \infty} P\left(\left|\beta_j - \hat{\beta}_j\right| < \gamma\right) = 1, \ j = 0, \ldots, k.$$

# Предположения модели

1. Линейность отклика: $y = X\beta + \varepsilon$.
2. Случайность выборки: наблюдения $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ независимы.
3. Полнота ранга: ни один из признаков не является константой или линейной комбинацией других признаков ни в популяции, ни в выборке $(\operatorname{rank} X = k)$.
4. Случайность ошибок: $\mathbb{E}(\varepsilon | X) = 0$.
5. Гомоскедастичность ошибок: дисперсия ошибки не зависит от значений признаков: $\mathbb{D}(\varepsilon | X) = \sigma^2$.

(предположения Гаусса-Маркова).

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

# Дисперсия $\hat{\beta}_j$

В предположениях (1-5) дисперсии МНК-оценок коэффициентов $\beta$ задаются следующим образом:

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

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

- Чем больше дисперсия ошибки $\sigma^2$, 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 $\hat{\beta}_j$.

# Дисперсия $\hat{\beta}_j$

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

В матричном виде:

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

Если столбцы $X$ почти линейно зависимы, то матрица $X^T X$ плохо обусловлена, и дисперсия оценок $\hat{\beta}_j$ велика.

Близкая к линейной зависимость между двумя или более признаками $x_j$ называется **мультиколлинеарностью**.
Проблема мультиколлинеарности решается с помощью отбора признаков или использования регуляризаторов.

# Вопросы

1. Как найти доверительные интервалы для $\beta_j$ 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: $\varepsilon \,|X \sim N\left(0, \sigma^2\right)$.

- 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 $\beta$.
- МНК-оценки $\hat{\beta}$ имеют нормальное распределение $N\left(\beta, \sigma^2\left(X^TX\right)^{-1}\right)$.
- Несмещённой оценкой $\sigma^2$ 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 и предсказательные интервалы

$100(1-\alpha)\%$ доверительный интервал для $\sigma$:

$$\sqrt{\frac{RSS}{\chi^2_{n-k-1,1-\alpha/2}}} \leq \sigma \leq \sqrt{\frac{RSS}{\chi^2_{n-k-1,\alpha/2}}}.$$

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

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

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

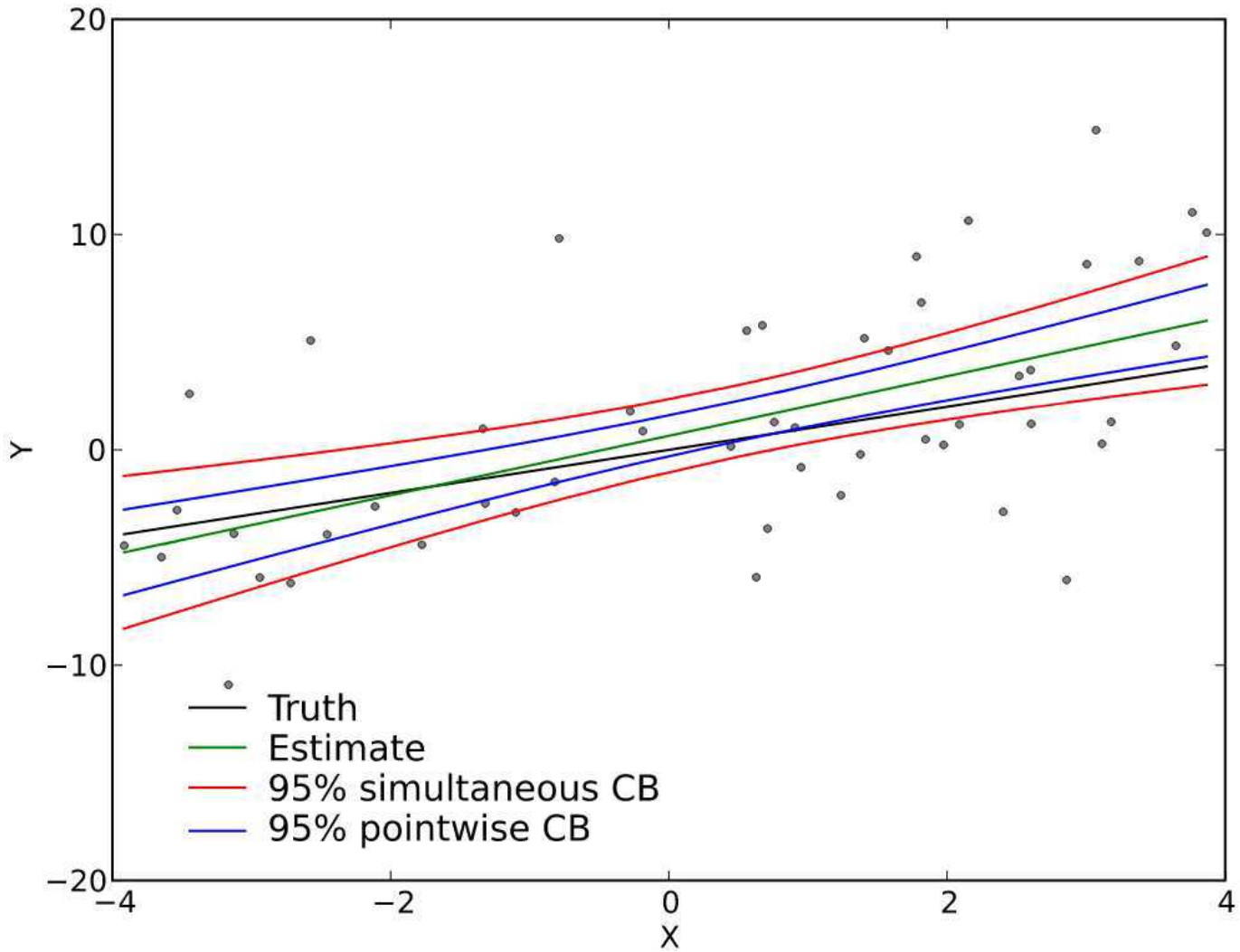
$$x_0^T\hat{\beta} \pm t_{n-k-1,1-\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{x_0^T\left(X^TX\right)^{-1}x_0}.$$

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

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

# Доверительные и предсказательные интервалы

Доверительная лента:



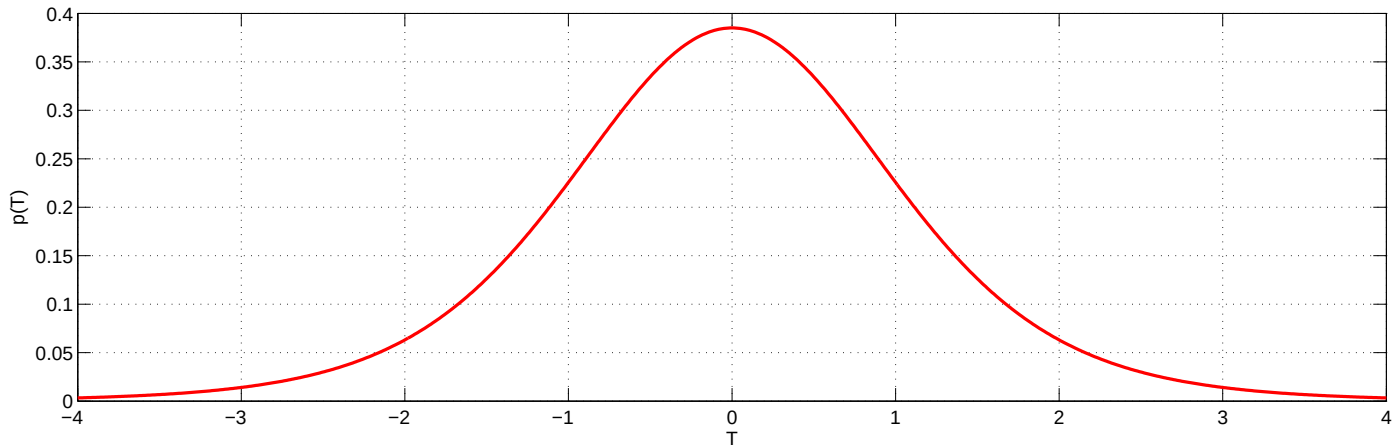
# t-критерий Стьюдента

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

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

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

$T \sim St(n-k-1)$ при $H_0$.



## 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 $y$?

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

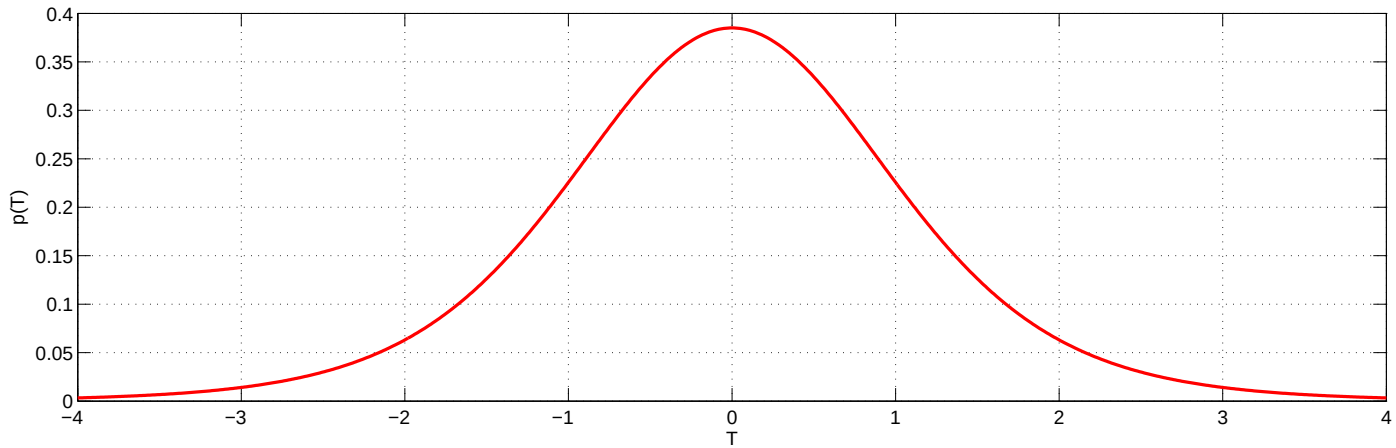
# t-критерий Стьюдента

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

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

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

$T \sim St(n-k-1)$ при $H_0$.



## 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 $\beta_1$ имеет смысл эластичности цены по признаку $nox$. По экономическим соображениям интерес представляет гипотеза о том, что эластичность равна $-1$.

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

# Критерий Фишера

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

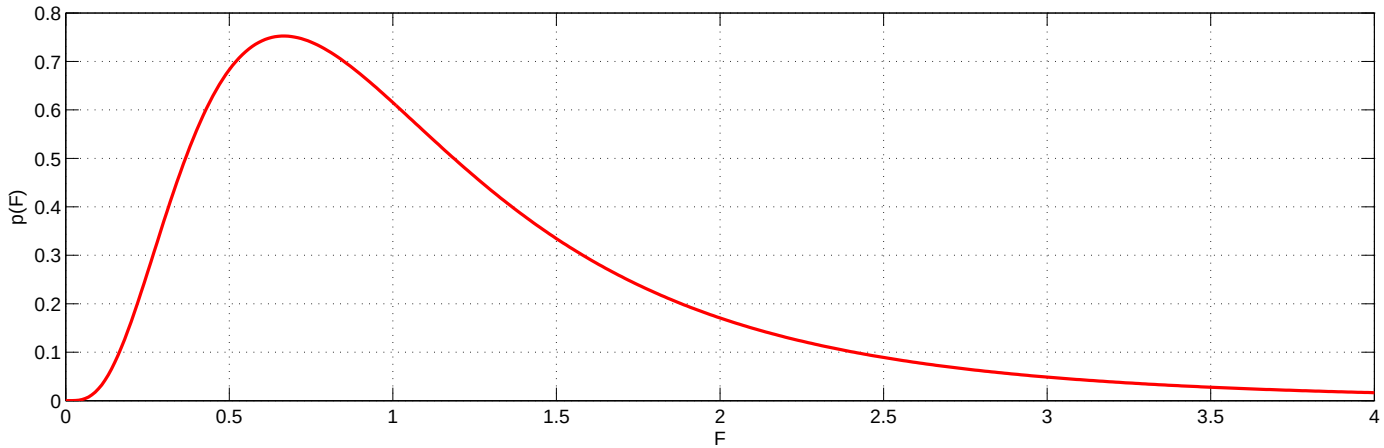
нулевая гипотеза: $H_0 : \beta_2 = 0$;

альтернатива: $H_1 : H_0$ 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 $H_0$.



# 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?

$H_0 : \beta_4 = \beta_5 = 0.$
$H_1 : H_0$ 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.

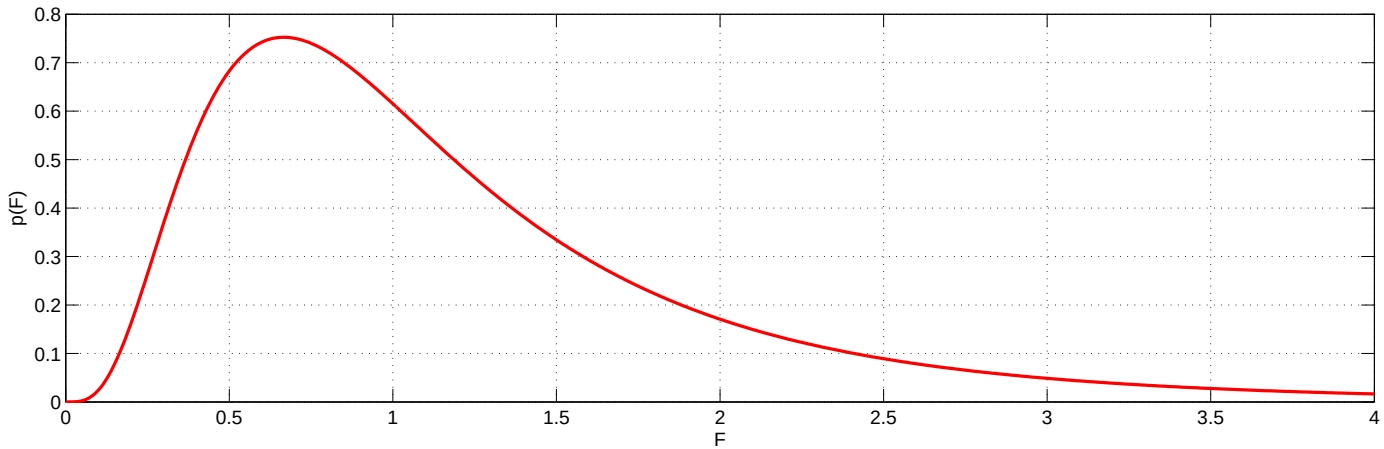
# Критерий Фишера

нулевая гипотеза: $H_0 : \beta_1 = \cdots = \beta_k = 0;$

альтернатива: $H_1 :$ $H_0$ неверна;

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

$F \sim F(k, n-k-1)$ при $H_0$.



# Критерий Фишера

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

$H_0$: $\beta_1 = \cdots = \beta_5 = 0$.
$H_1$: $H_0$ 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

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

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

# 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 $\beta$, но дисперсия её возрастает.

# 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

Пошаговая регрессия несовместима с проверкой гипотез о значимости коэффициентов: критерии Фишера и Стьюдента антиконсервативны, если вычисляются на той же самой выборке, на которой настраивалась модель.

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

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

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

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

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

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)
```

Работает при $k <\approx 100$.

# 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 $\varepsilon$ необходимо проверять.

Оценивать ошибку $\varepsilon$ будем при помощи **остатков**:

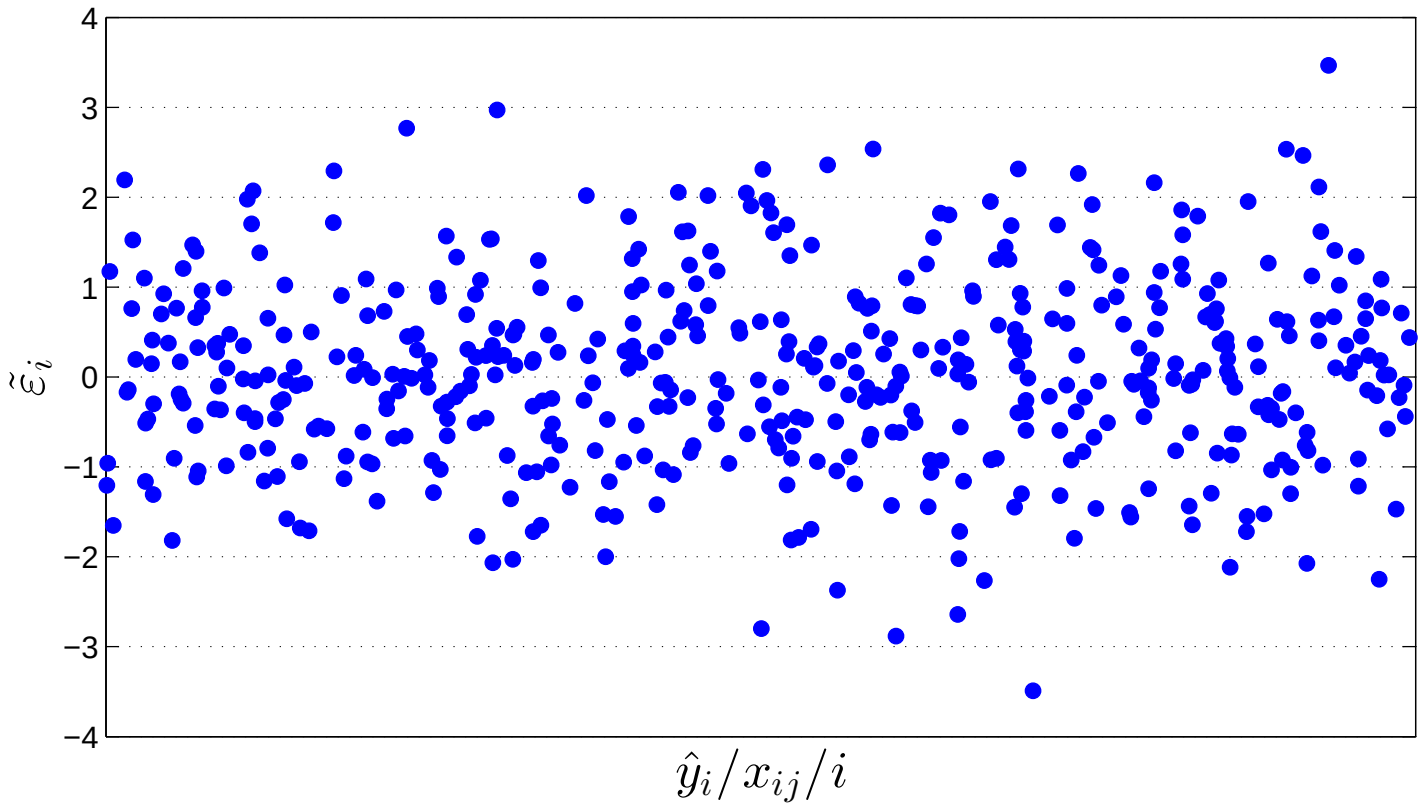
$$\hat{\varepsilon}_i = y_i - \hat{y}_i,\ i = 1, \ldots, n.$$

Стандартизированные остатки:

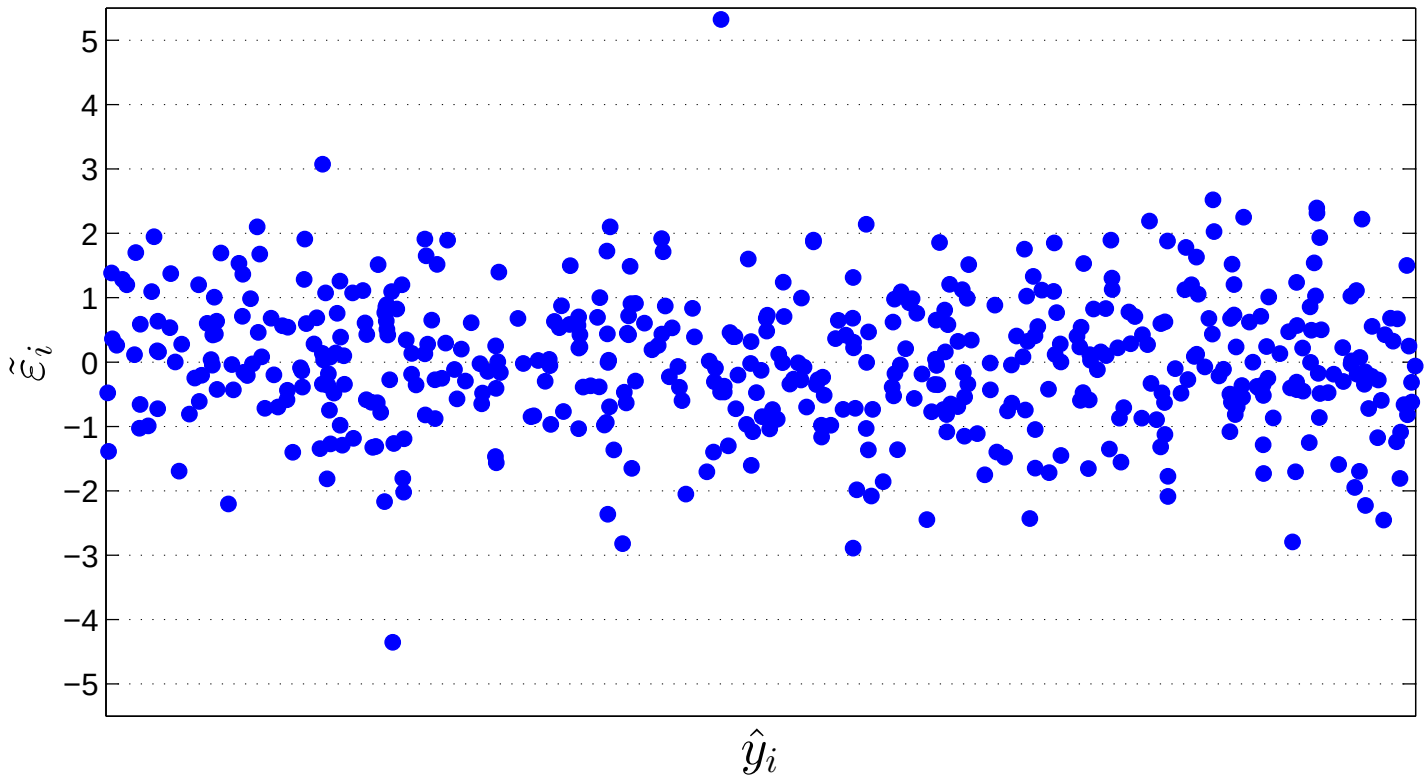
$$\tilde{\varepsilon}_i = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{\hat{\sigma}},\ i = 1, \ldots, n.$$

# Визуальный анализ

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

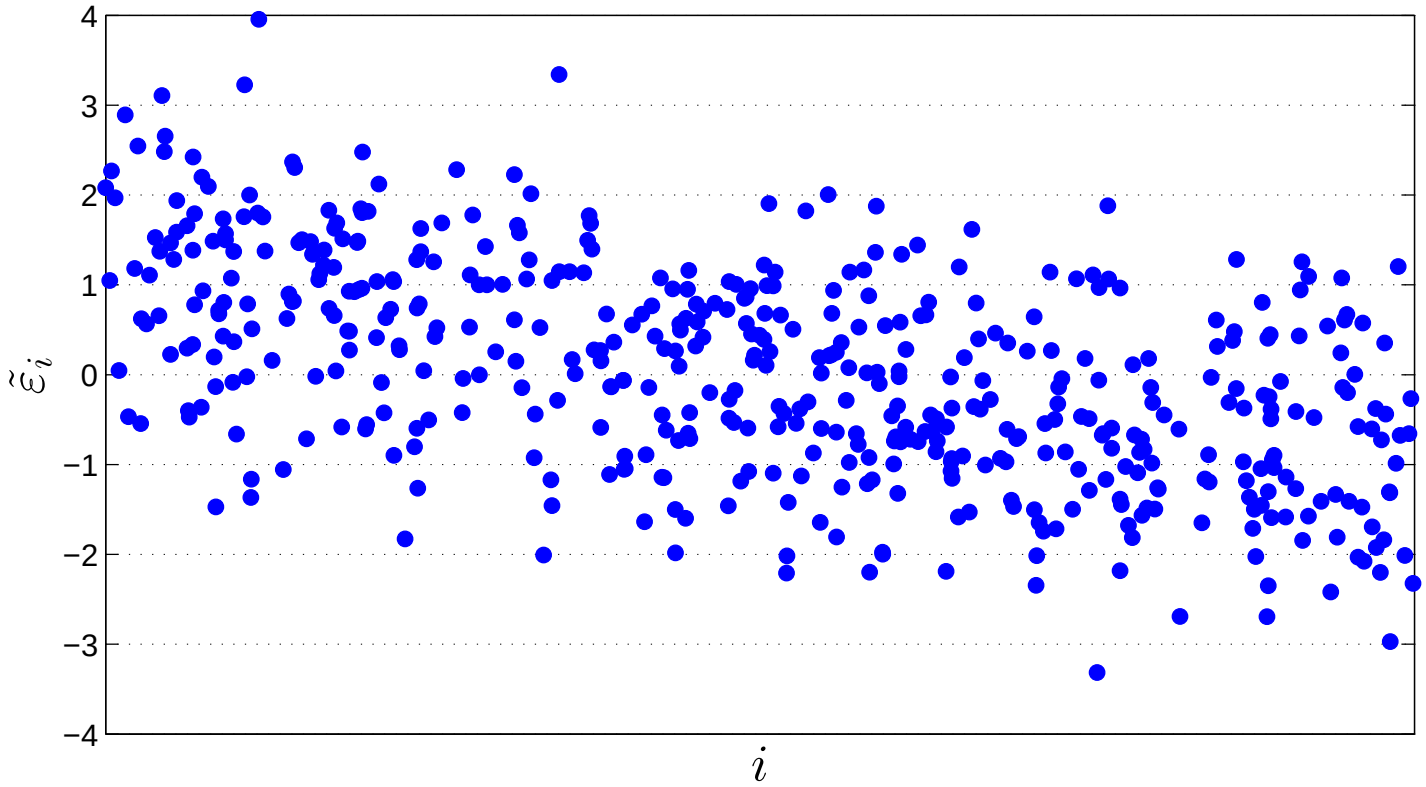


# Визуальный анализ



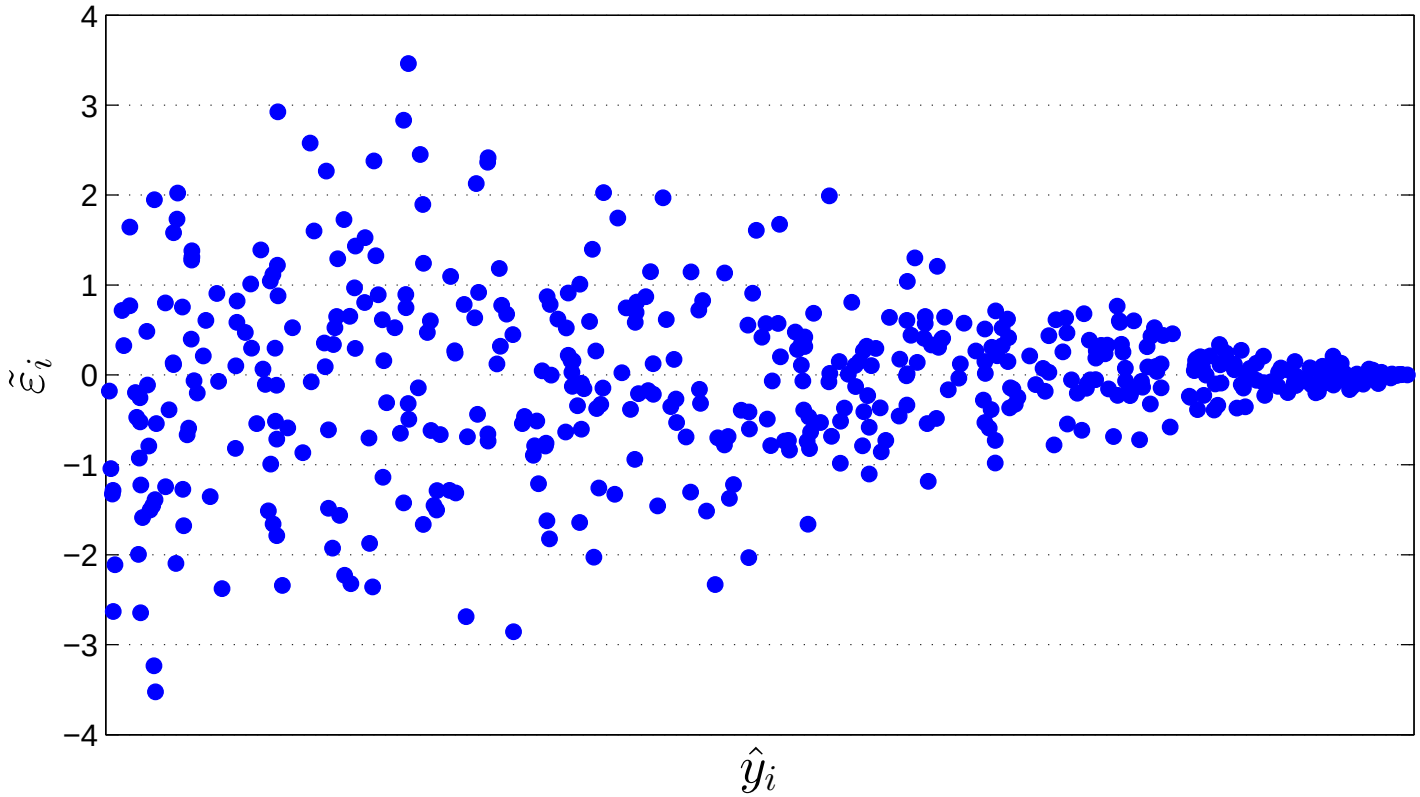

Возможно, присутствуют выбросы

# Визуальный анализ



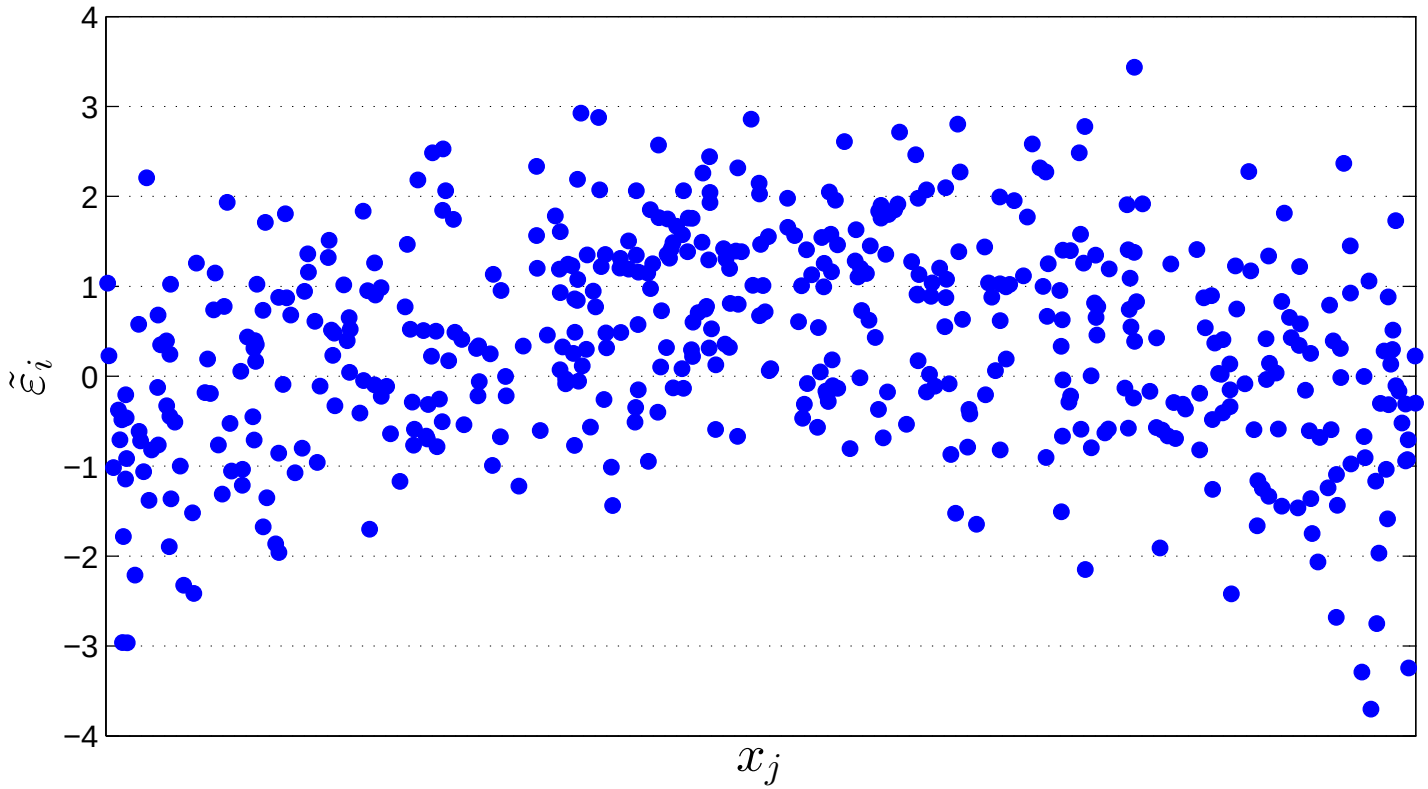

В данных имеется тренд

# 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).
- Проверка гомоскедастичности: критерий Бройша-Пагана.

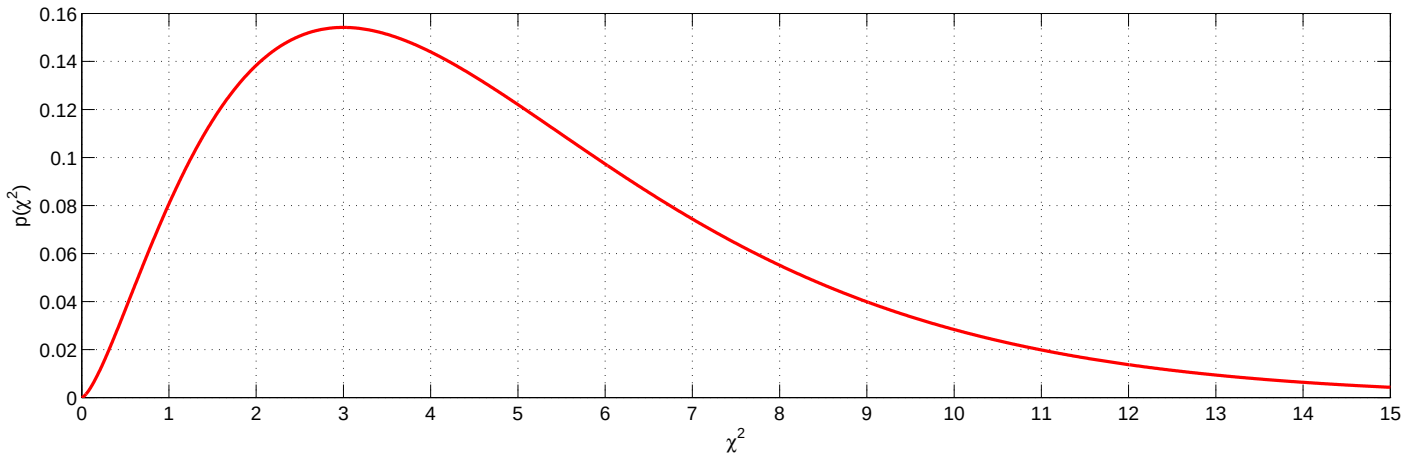
# Критерий Бройша-Пагана

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

альтернатива: $H_1 : H_0$ неверна;

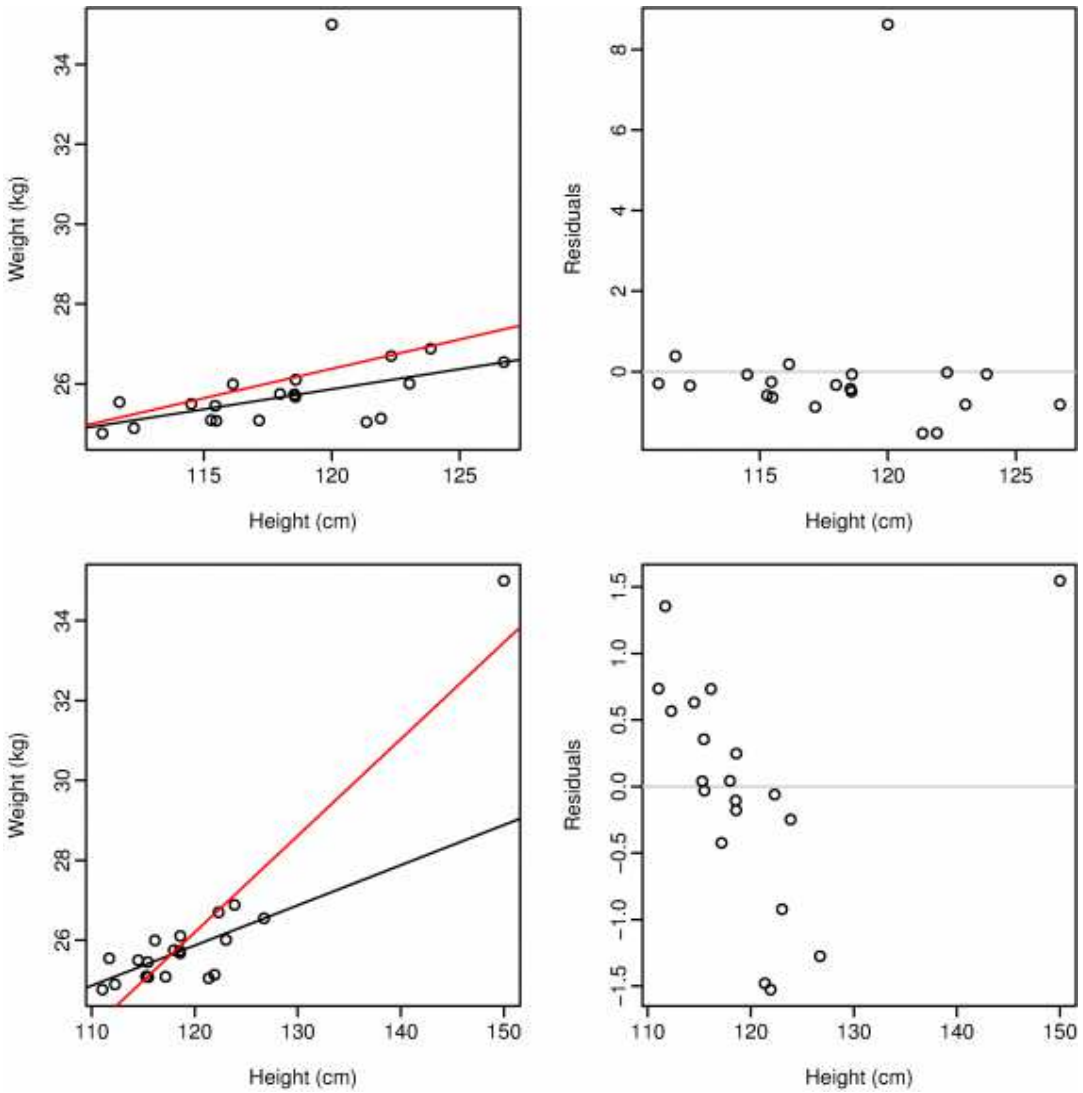
статистика: $LM = nR^2_{\hat{\varepsilon}^2}$, $R^2_{\hat{\varepsilon}^2}$ — коэффициент детерминации при регрессии квадратов остатков на признаки;

$LM \sim \chi^2_k$ при $H_0$.



# Расстояние Кука

Регрессия сильно подстраивается под далеко стоящие наблюдения.



# Расстояние Кука

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

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

$\hat{y}_{j(i)}$ — 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 $\hat{y}_i$.

# Гетероскедастичность

Гетероскедастичность может быть следствием недоопределения модели.

Последствия гетероскедастичности:

- нарушаются предположения критериев Стьюдента и Фишера и методов построения доверительных интервалов для $\sigma$ и $\beta$ (независимо от объёма выборки);
- МНК-оценки $\beta$ 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 $y^\lambda$, 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 $\lambda$.
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 $\dot{y} = (y_1 y_2 \ldots y_n)^{1/n}$ — среднее геометрическое наблюдений отклика.

# Метод Бокса-Кокса

Процесс подбора $\lambda$:

1. выбирается набор значений $\lambda$ в некотором интервале, например, $(-2, 2)$;
2. для каждого значения $\lambda$ выполняется преобразование отклика $V$, строится регрессия $V$ на $X$, вычисляется остаточная сумма квадратов $RSS(\lambda)$;
3. строится график зависимости $RSS(\lambda)$ от $\lambda$, по нему выбирается оптимальное значение $\lambda$;
4. выбирается ближайшее к оптимальному удобное значение $\lambda$ (например, целое или полуцелое);
5. строится окончательная регрессионная модель с откликом $y^\lambda$ или $\ln y$.

Доверительный интервал для $\lambda$ определяется как пересечение кривой $RSS\,(\lambda)$ с линией уровня $\min\limits_{\lambda} RSS\,(\lambda) \cdot e^{\chi^2_{1,1-\alpha}/n}$. 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):

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

Асимптотика устойчивой оценки:

$$\sqrt{n}\left(\beta - \hat{\beta}\right) \xrightarrow{d} N\left(0, \Omega\right),$$

$$\hat{\Omega} = n\left(X^T X\right)^{-1} \left(X^T \operatorname{diag}\left(\hat{\varepsilon}_1^2, \ldots, \hat{\varepsilon}_n^2\right) X\right) \left(X^T X\right)^{-1}.$$

# 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

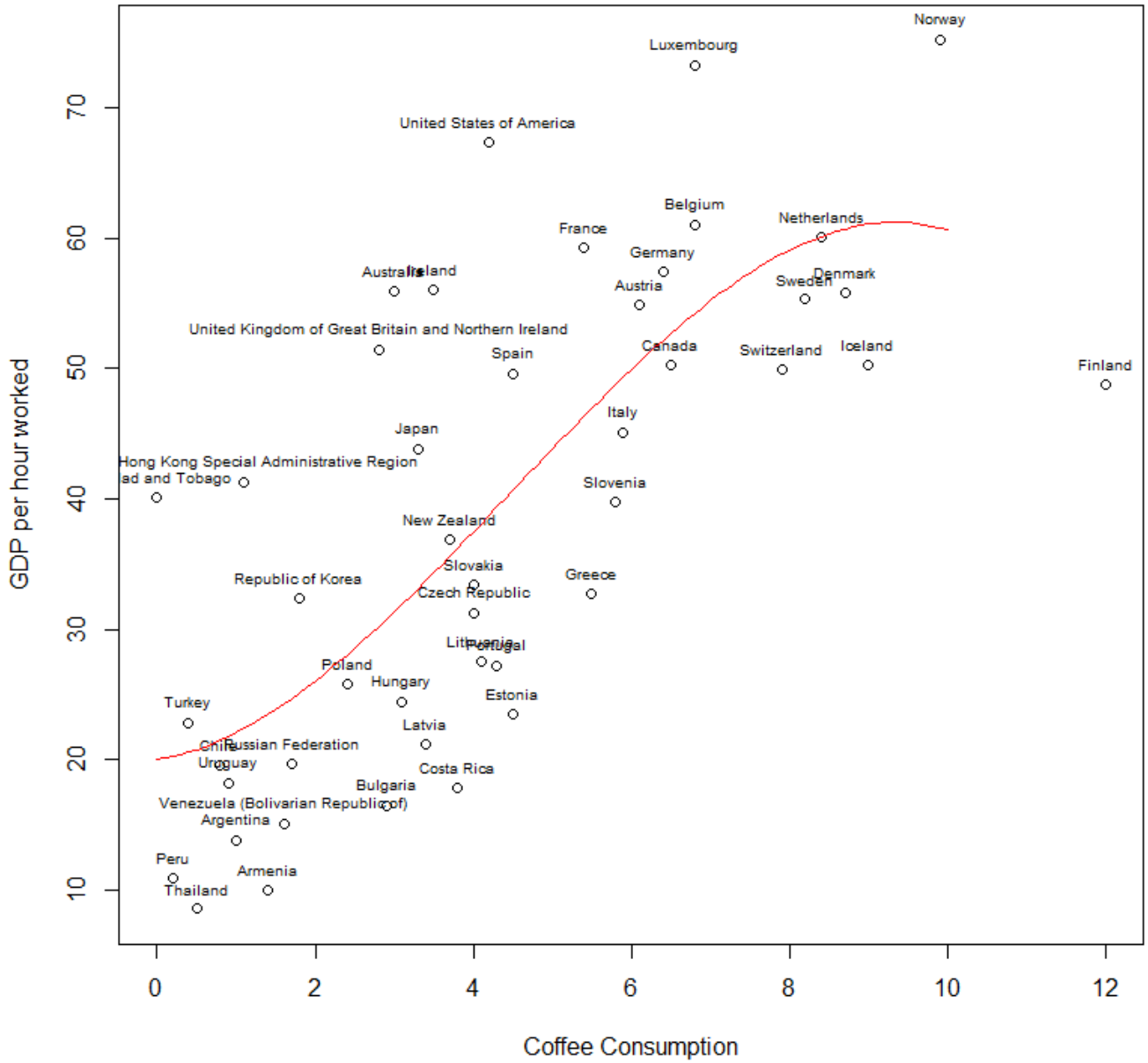
R, пакет sandwich:

```
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"))
```

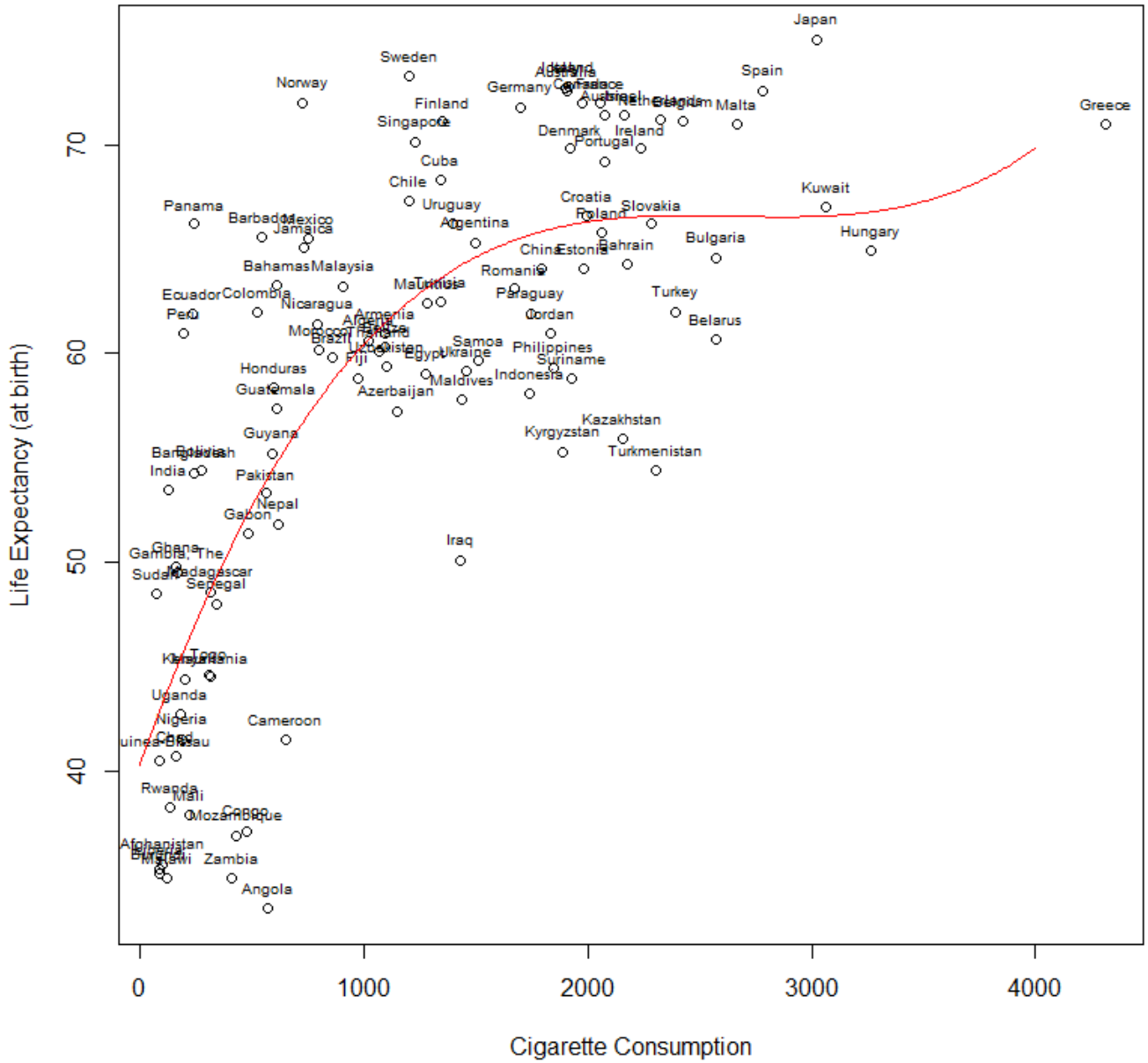
Matlab:

```
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)
```

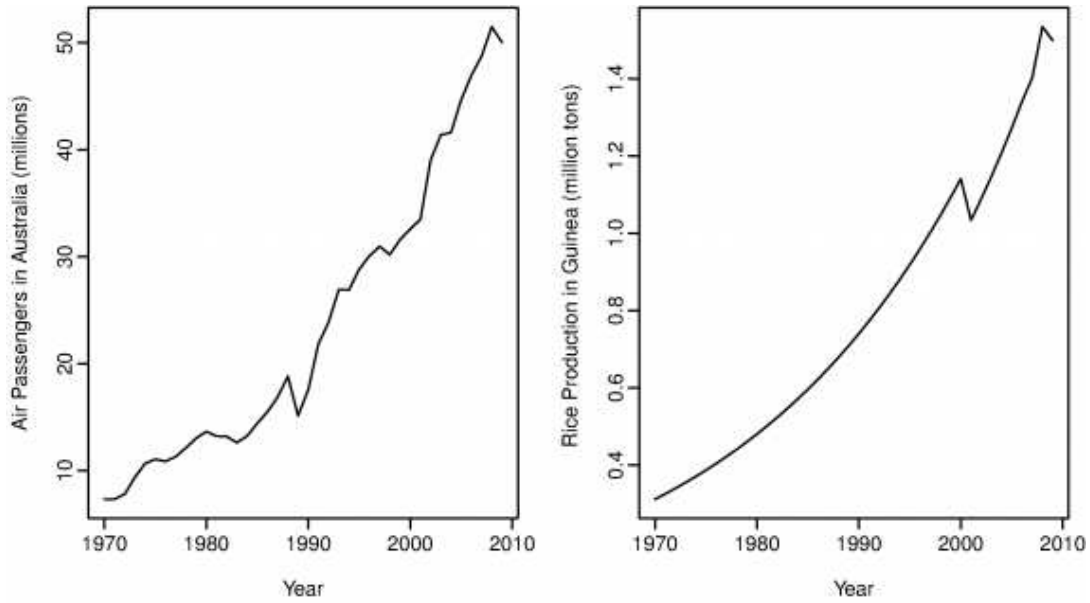
# Интерпретация регрессионной модели

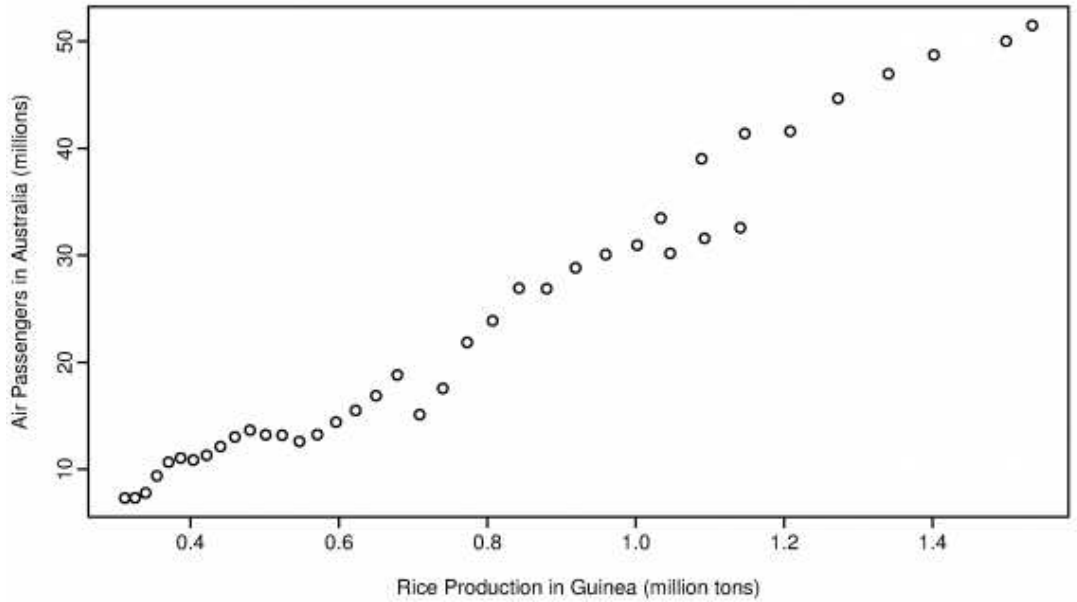


# Интерпретация регрессионной модели



# Интерпретация регрессионной модели



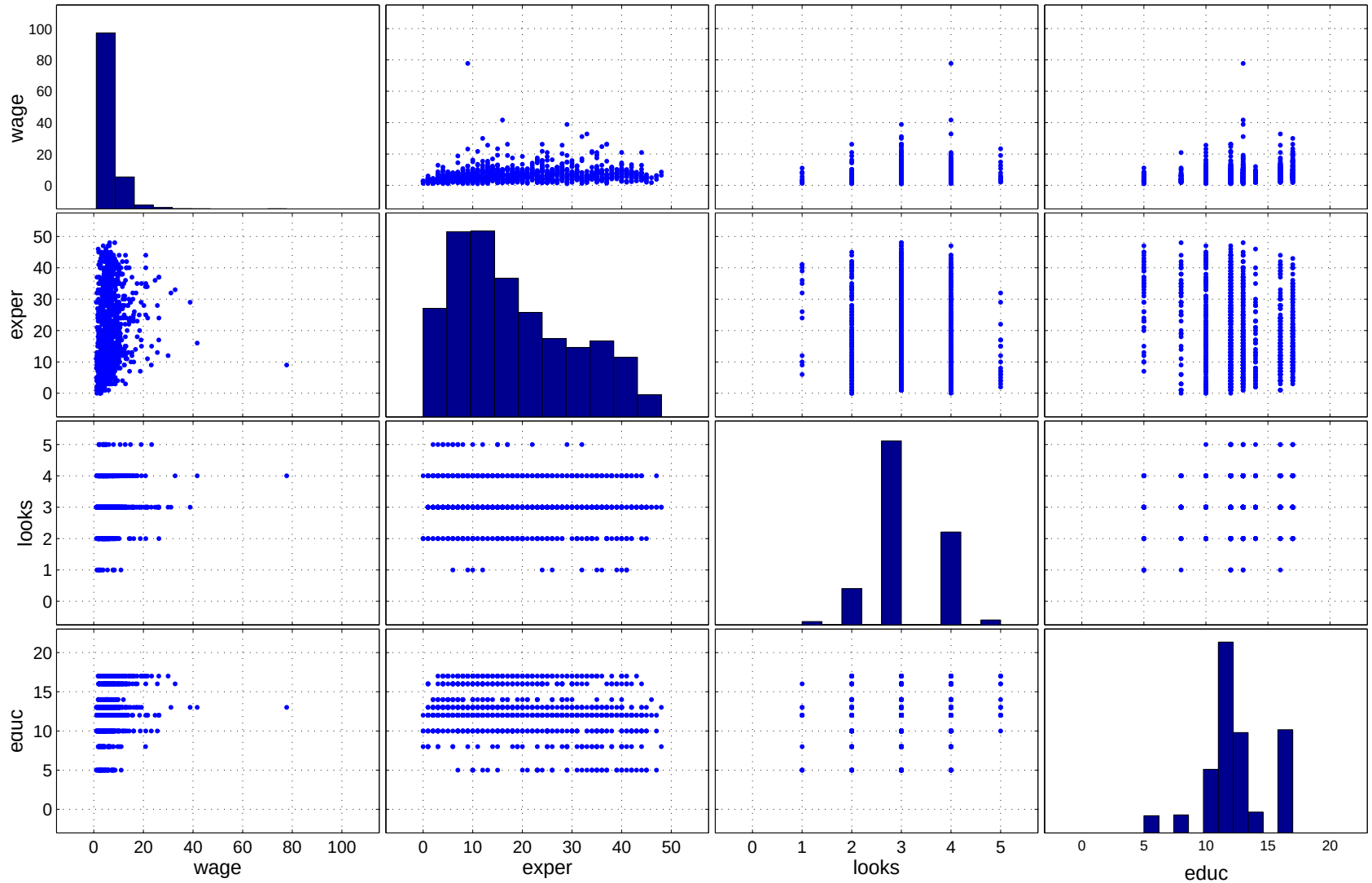
# Влияние внешней привлекательности на уровень заработка

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


wage
exper
looks
educ
0 20 40 60 80 100
0 10 20 30 40 50
0 1 2 3 4 5
0 5 10 15 20

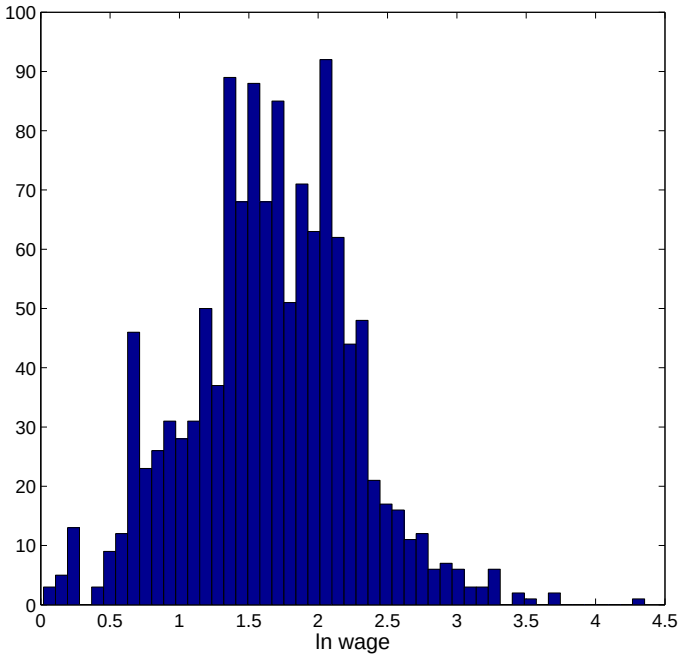
# Данные

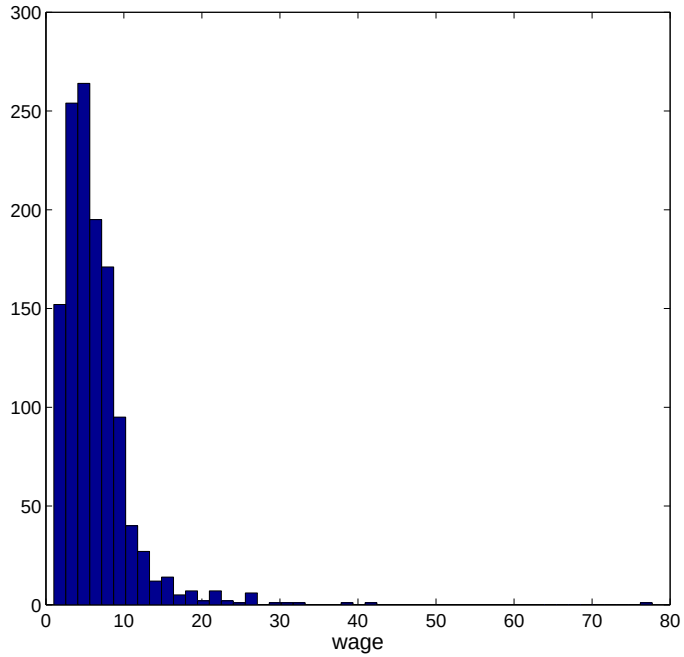
В группах $looks = 1$ и $looks = 5$ слишком мало наблюдений.

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

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

# Выбросы



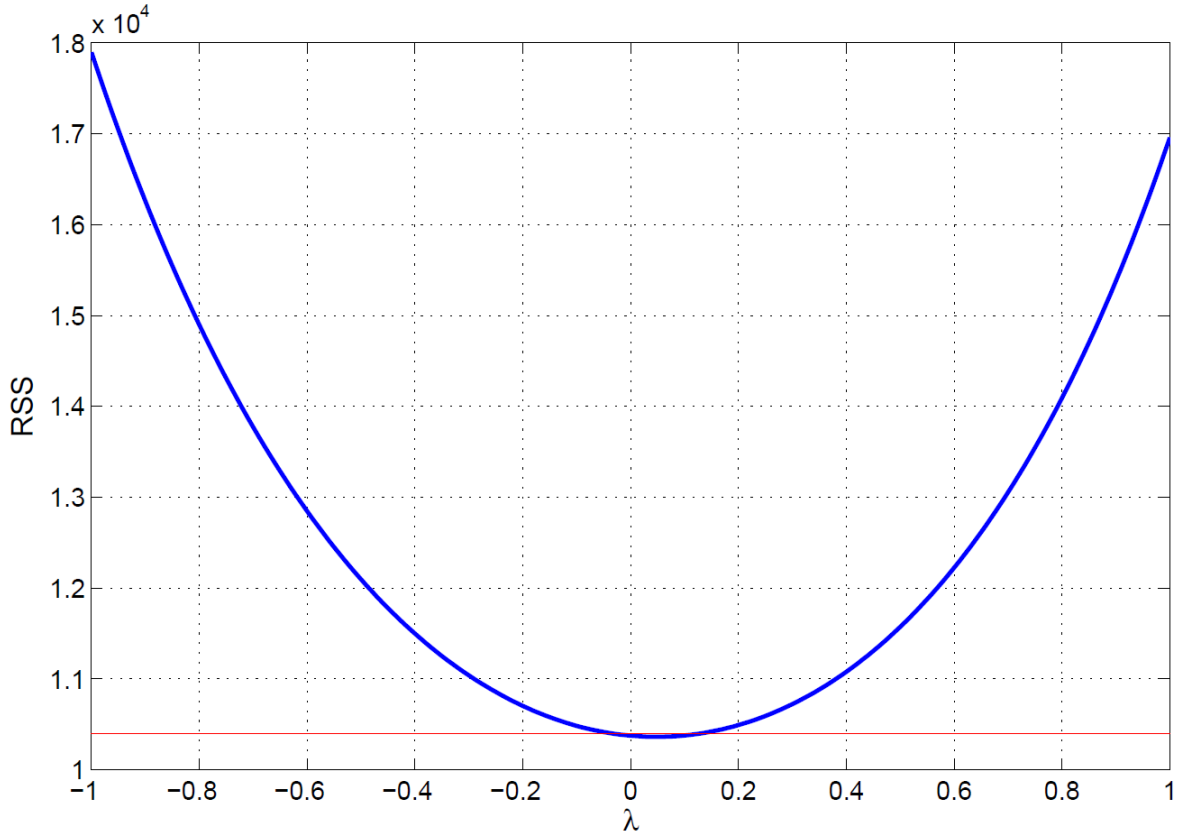




Больше 30 долларов в час в выборке получают только 5 человек ($< 0.4\%$). Исключим их.

# 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:

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

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

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

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

# Модель 2

Редуцированная модель:

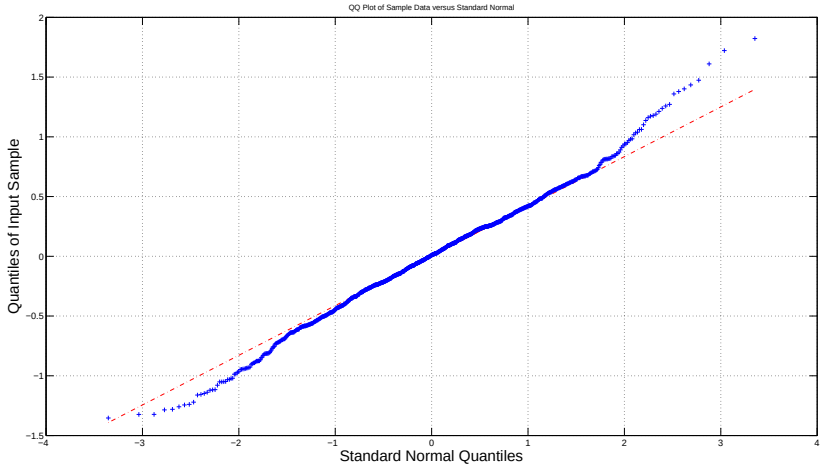
$$\ln wage = 0.54 + 0.01exper + 0.18union - 0.41female - 0.15service + \\ + 0.08educ - 0.008aboveavg - 0.12belogavg.$$

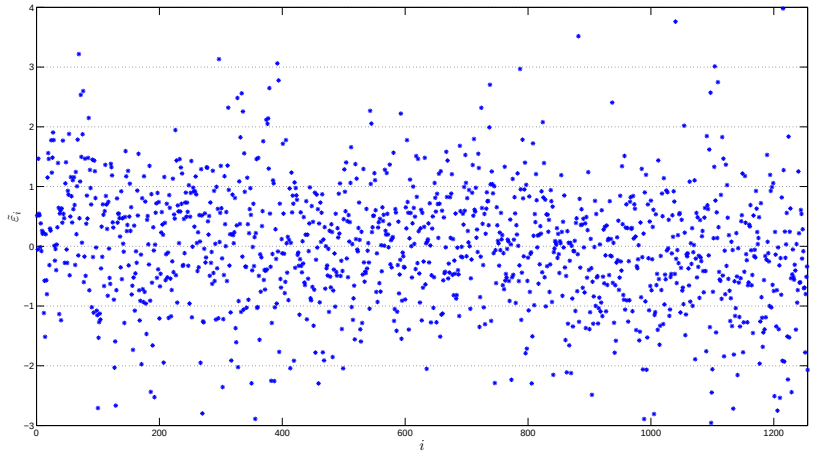
$F = 110.04,\ p = 1.5 \times 10^{-125},\ R^2 = 0.382,\ R_a^2 = 0.378.$

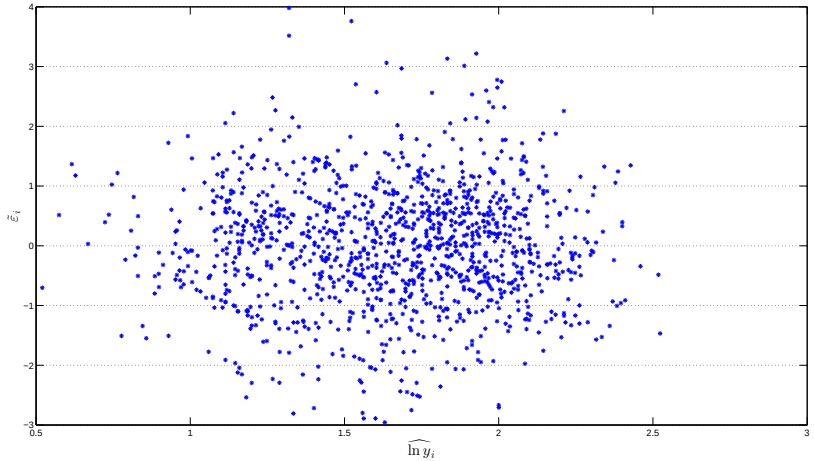
| Критерий | p-value |
|---|---|
| Шапиро-Уилка (нормальность) | $1.6 \times 10^{-4}$ |
| знаковых рангов (несмещённость) | $0.8480$ |
| Бройша-Пагана (гомоскедастичность) | $4.0 \times 10^{-5}$ |

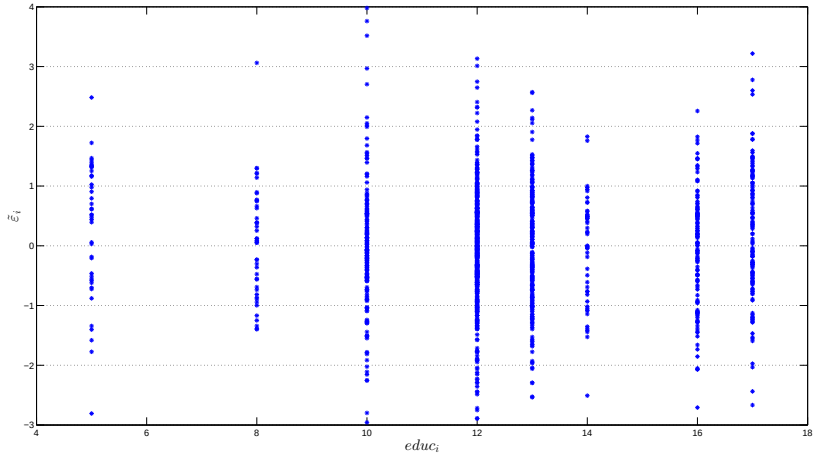
Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

# Остатки модели 2

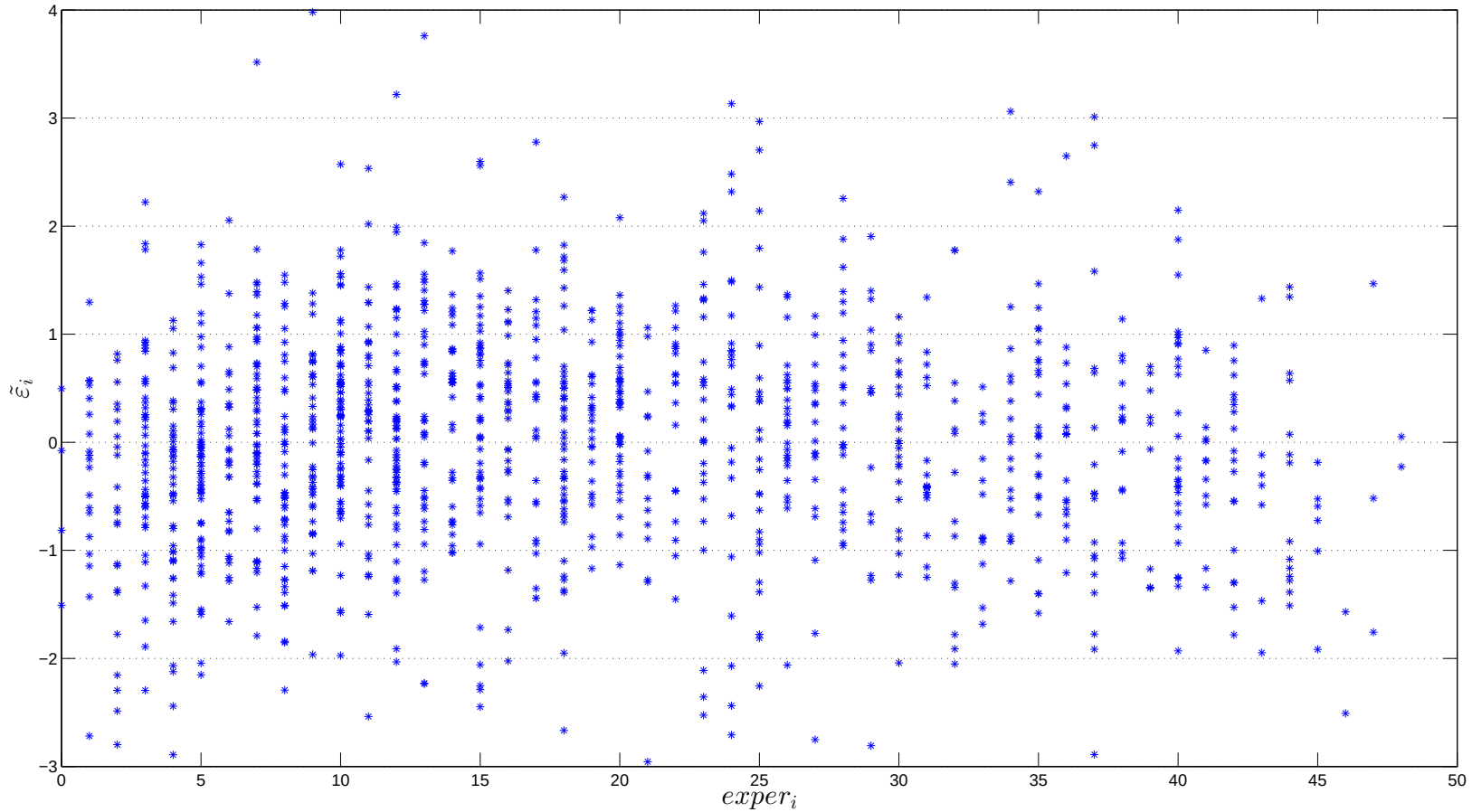


# Остатки модели 2



# Модель 3

Модель с квадратом признака $exper$:

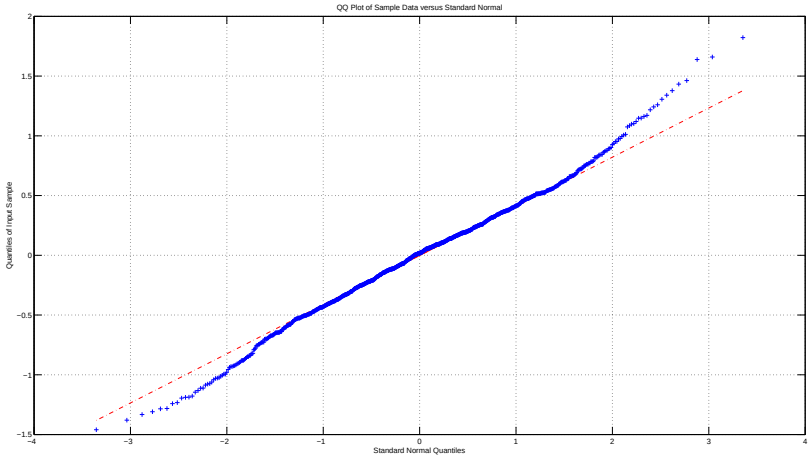
$$\ln wage = 0.40 + 0.04exper - 0.0006exper^2 + 0.18union - 0.40female - \\ - 0.16service + 0.08educ - 0.006aboveavg - 0.13belogavg.$$

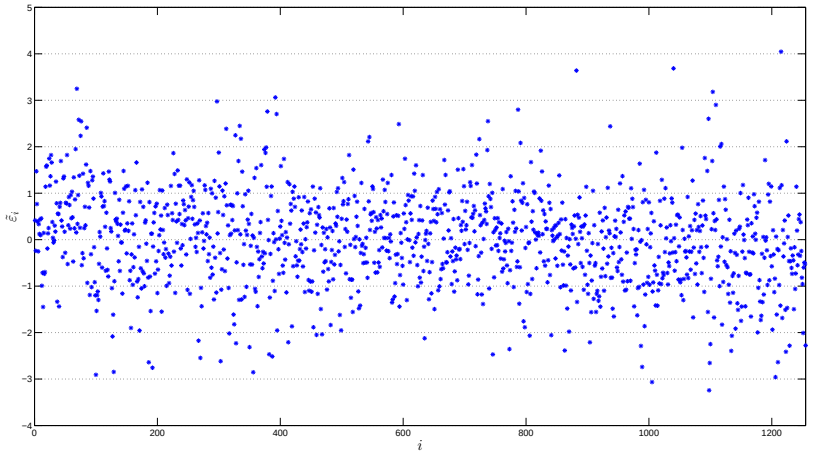
$F = 104.92,\ p = 1.2 \times 10^{-133},\ R^2 = 0.402,\ R_a^2 = 0.399.$

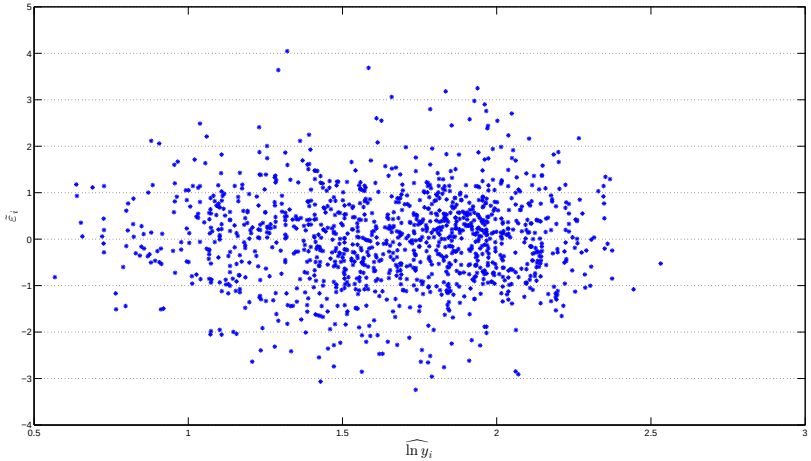
| Критерий | p-value |
|---|---|
| Шапиро-Уилка (нормальность) | $3.1 \times 10^{-5}$ |
| знаковых рангов (несмещённость) | $0.8571$ |
| Бройша-Пагана (гомоскедастичность) | $5.6 \times 10^{-6}$ |

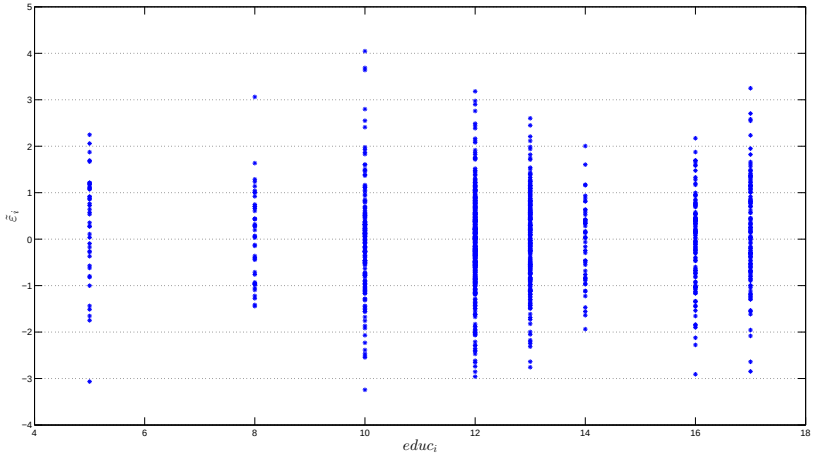
Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

# Остатки модели 3

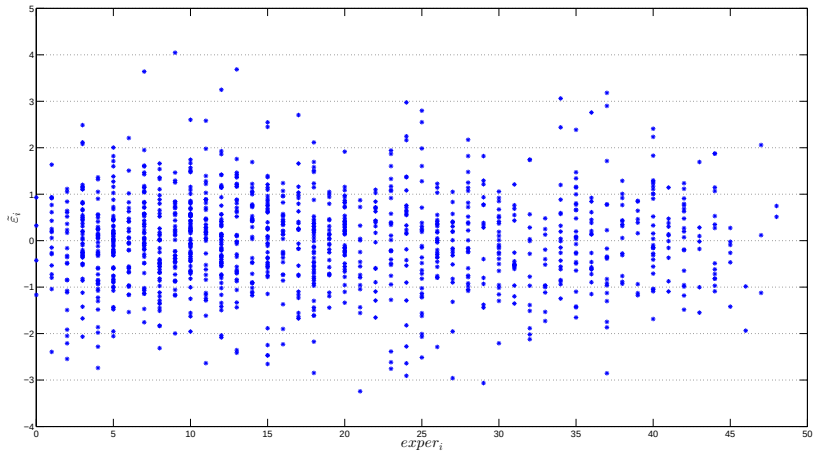


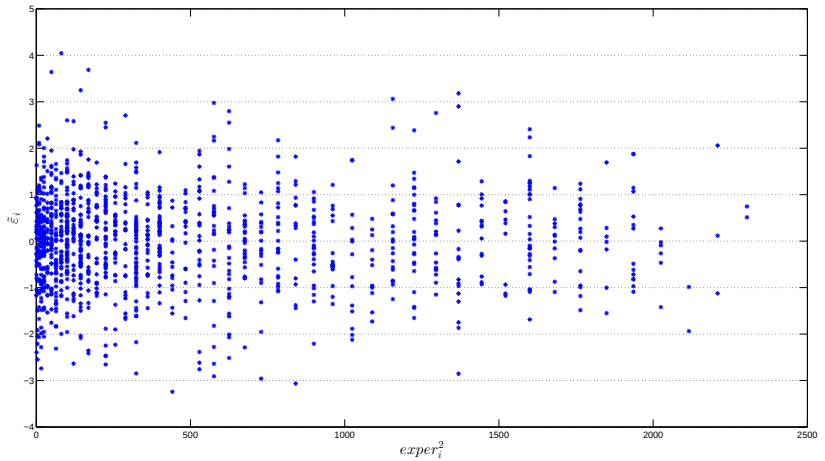



# Остатки модели 3



# Модель 4

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

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

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

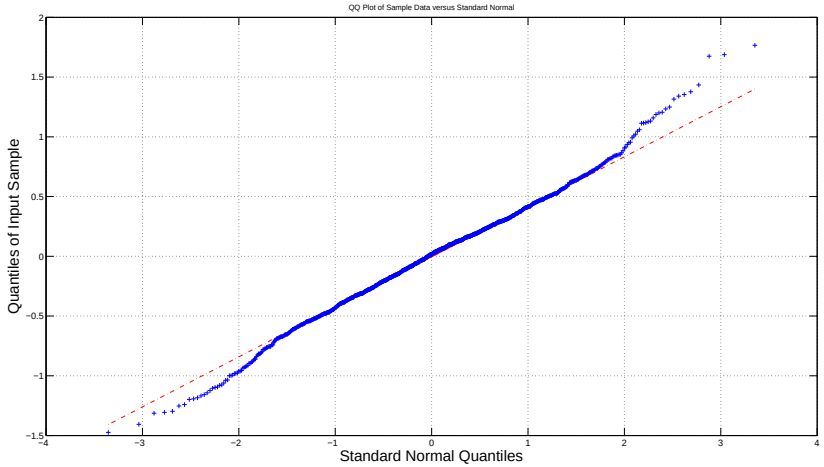
| Критерий | p-value |
|---|---|
| Шапиро-Уилка (нормальность) | $4.9 \times 10^{-5}$ |
| знаковых рангов (несмещённость) | $0.9071$ |
| Бройша-Пагана (гомоскедастичность) | $3.5 \times 10^{-5}$ |

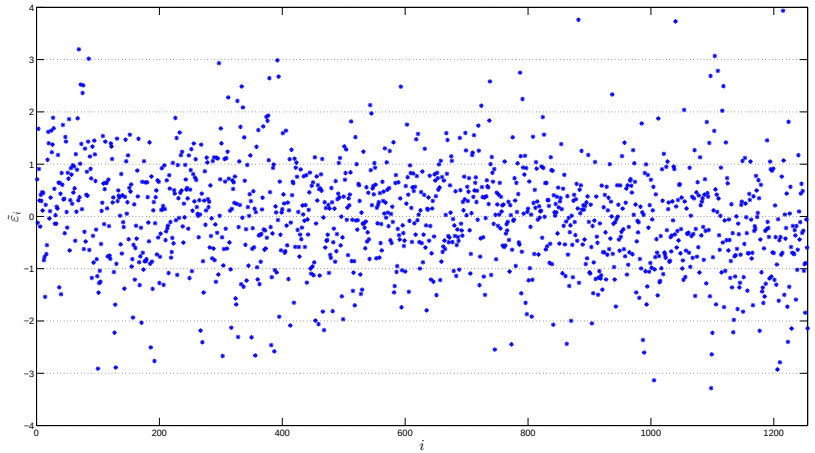
Признаки, коэффициенты при которых значимо отличаются от нуля (множественная проверка с дисперсиями Уайта): $exper$, $exper^2$, $union$, $female$, $educ$, $exper * service$.

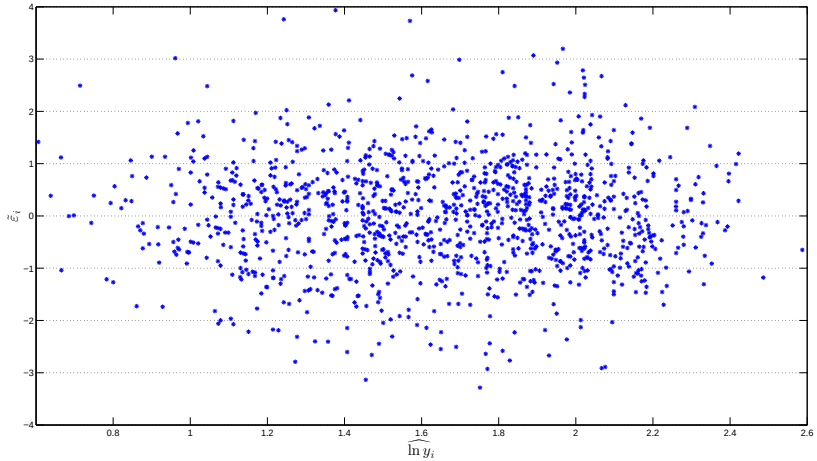
# Модель 4 против модели 3

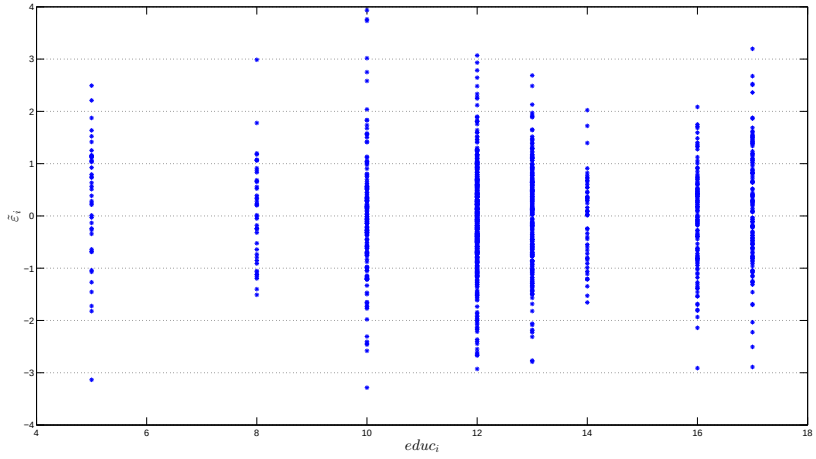
Критерий Давидсона-Маккиннона показывает превосходство модели 4 над моделью 3 ($p_1 = 2.8 \times 10^{-4}$, $p_2 = 0.1369$).

# Остатки модели 4

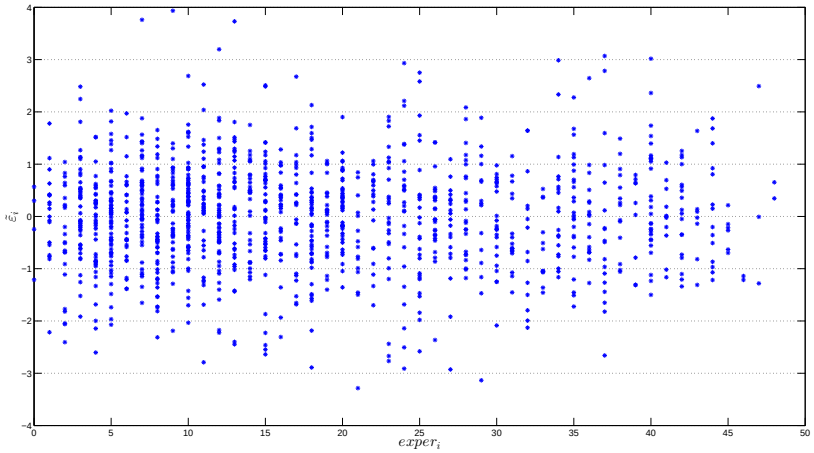


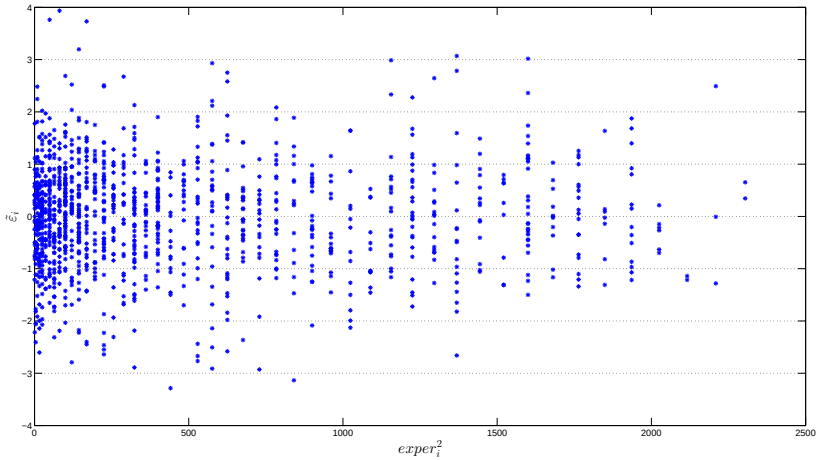



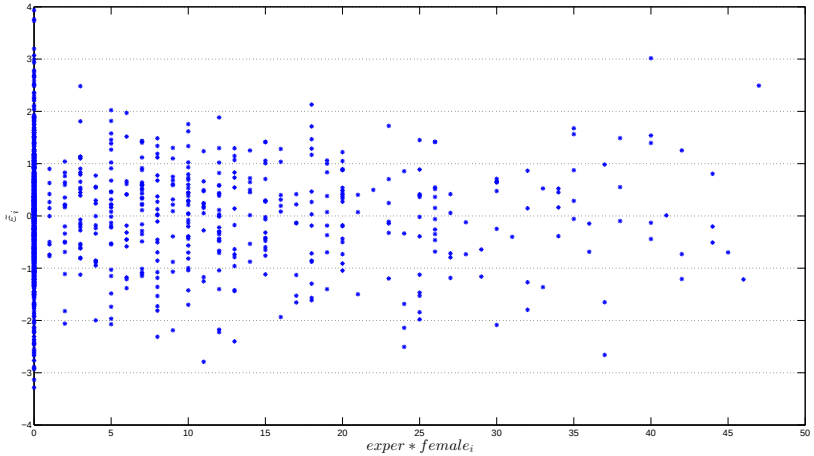



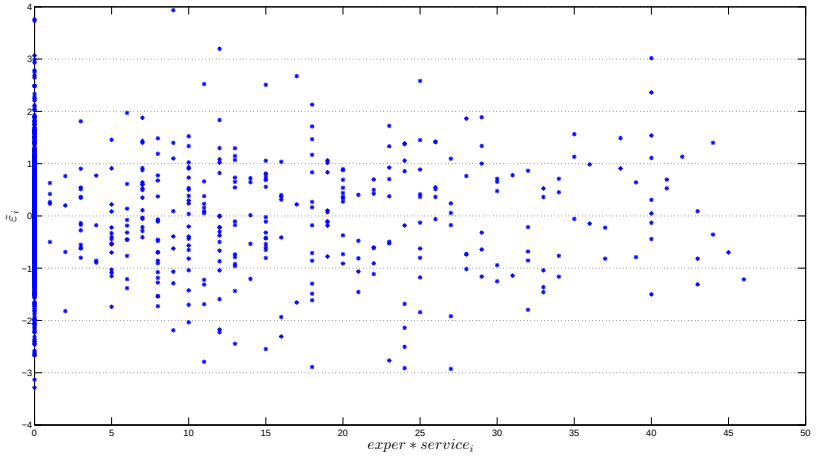



# Остатки модели 4

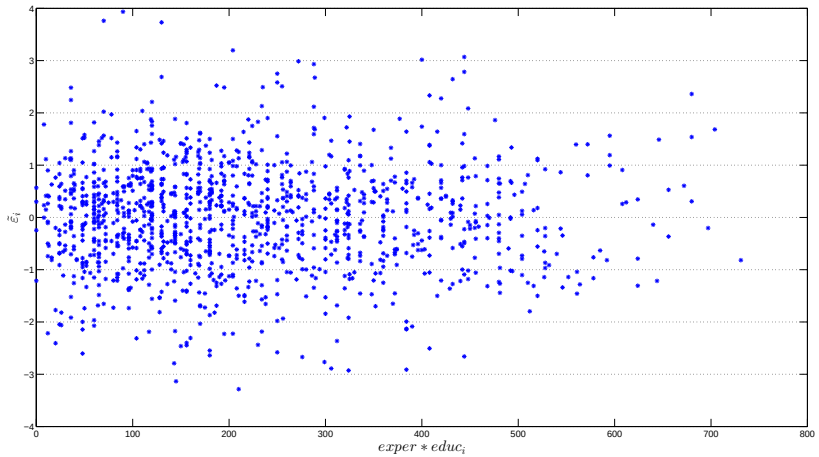


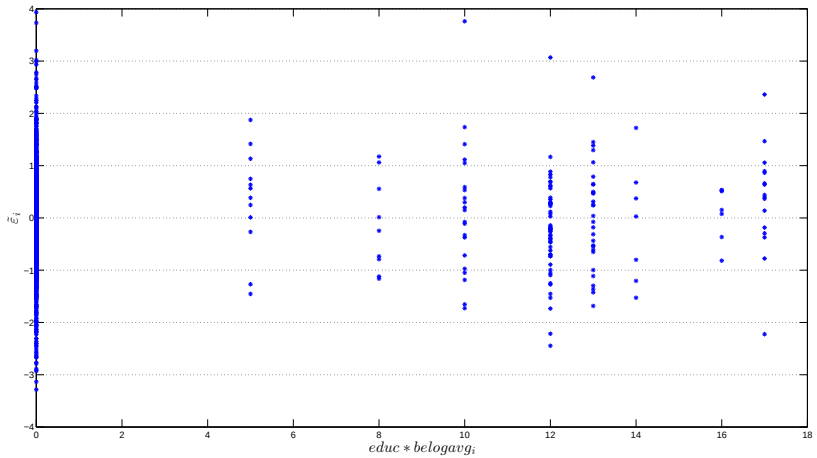



# Остатки модели 4



# 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) | $7.8 \times 10^{-5}$ |
| знаковых рангов (несмещённость) | $0.8774$ |
| Бройша-Пагана (гомоскедастичность) | $1.1 \times 10^{-5}$ |

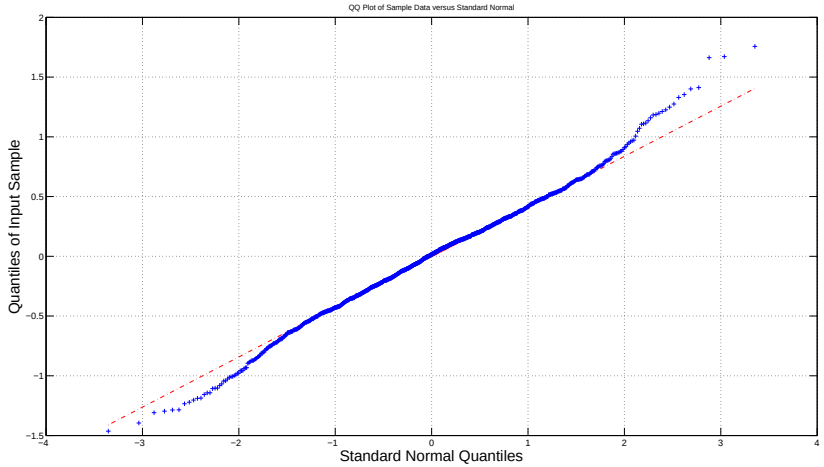
Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

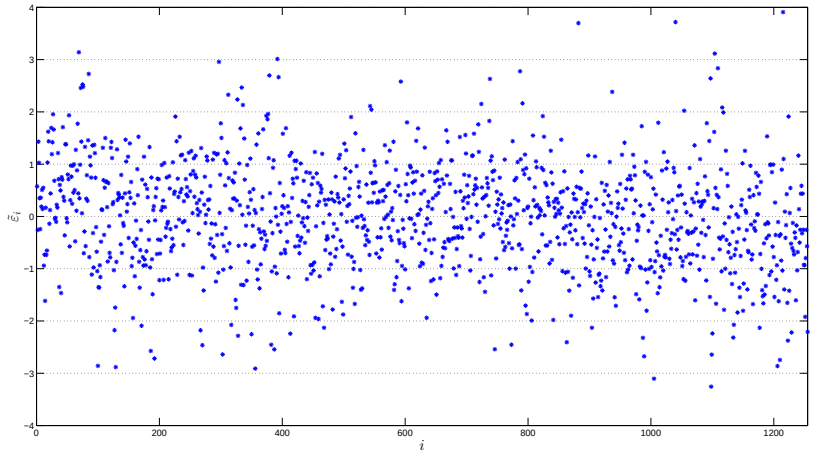
# Модель 5 против моделей 3 и 4

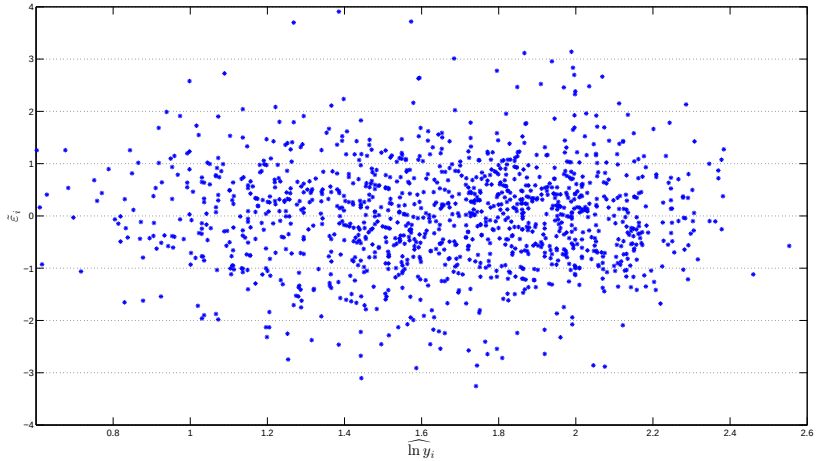
Критерий Давидсона-Маккиннона показывает превосходство модели 5 над моделью 3 ($p_1 = 0.0201,\ \ p_2 = 0.2965$).

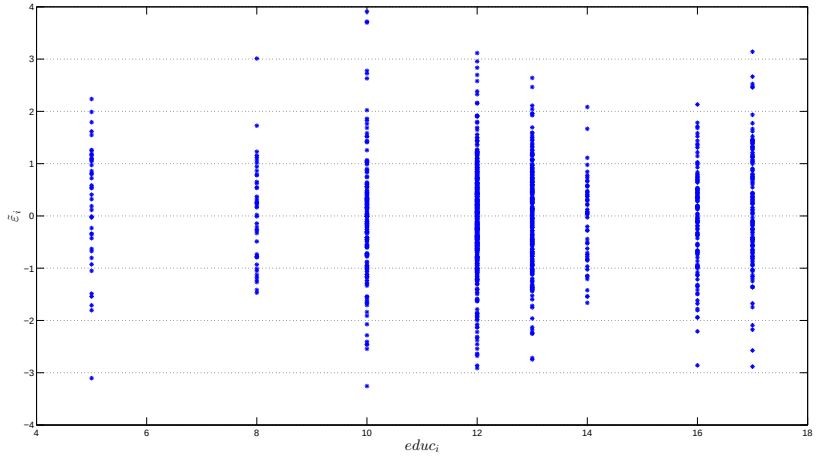
Критерий хи-квадрат с дисперсиями Уайта не показывает превосходства модели 4 над моделью 5 ($p = 0.0856$).

# Остатки модели 5

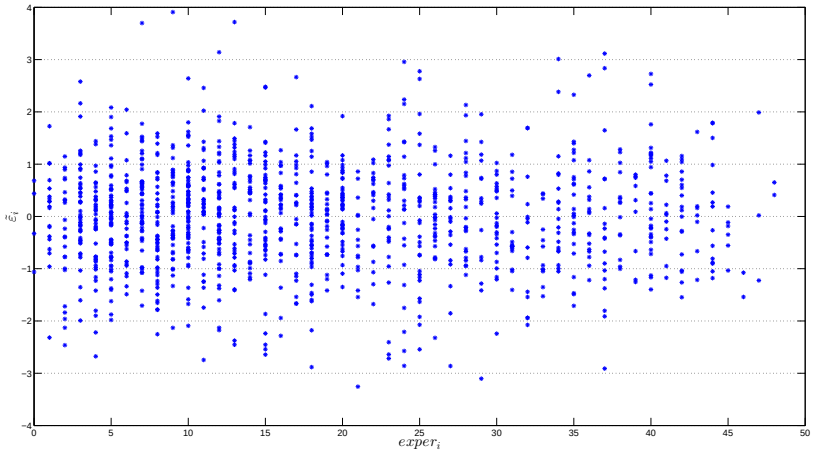


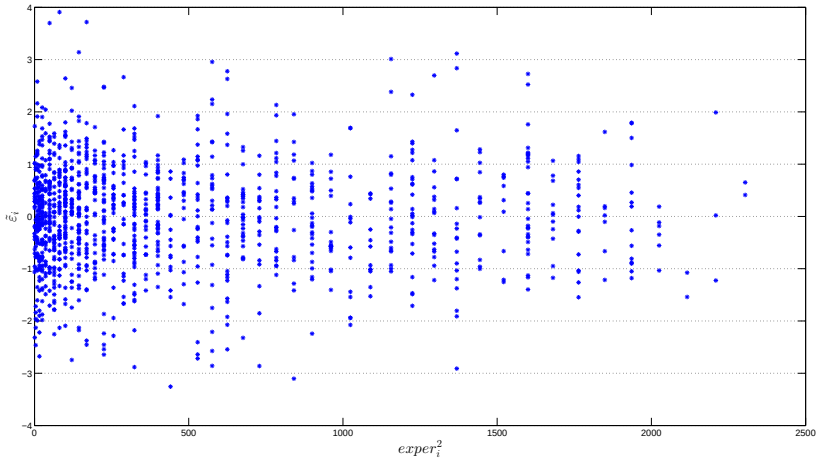



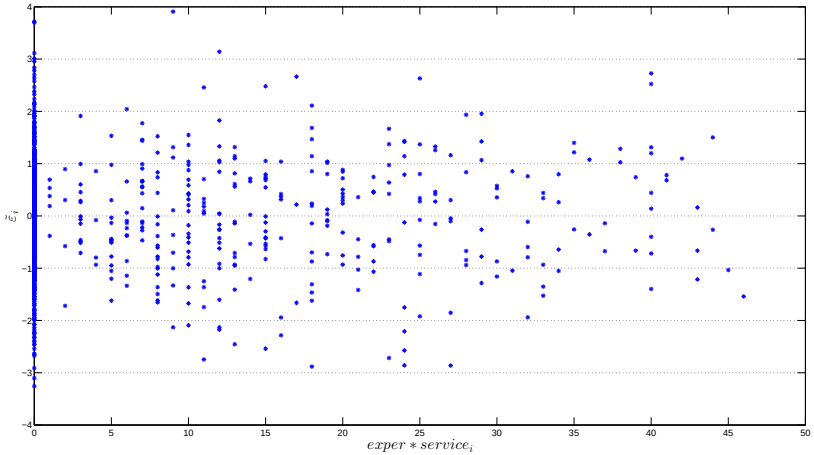



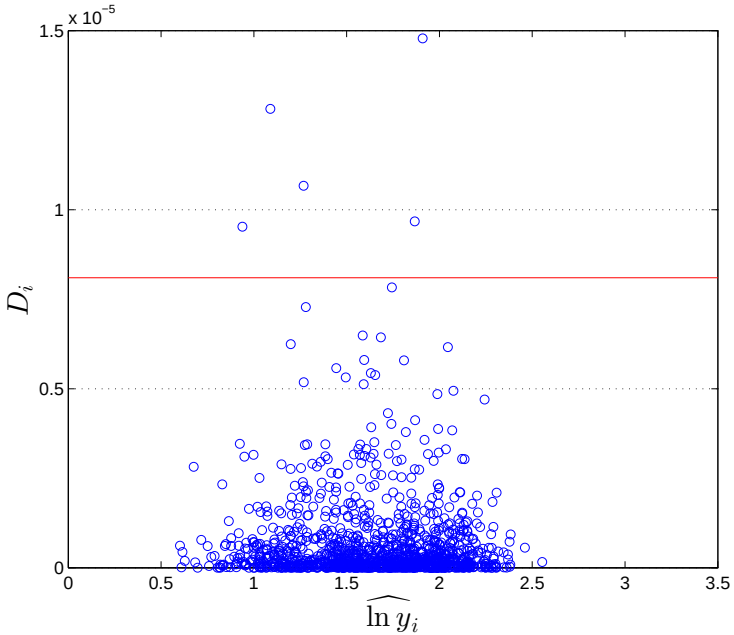
# Остатки модели 5

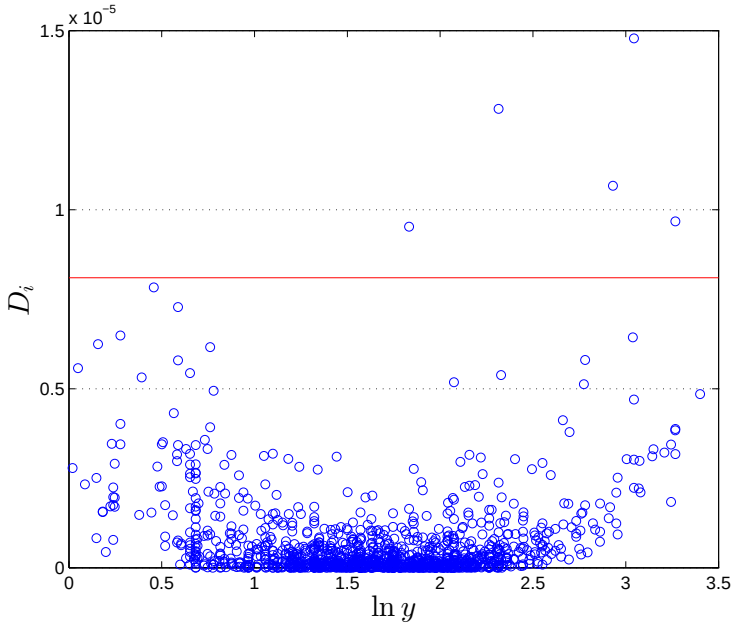


# Расстояние Кука для модели 5




Порог выбран визуально.

# Модель 6

Исключим наблюдения с наибольшими расстояниями Кука и перестроим модель 5:

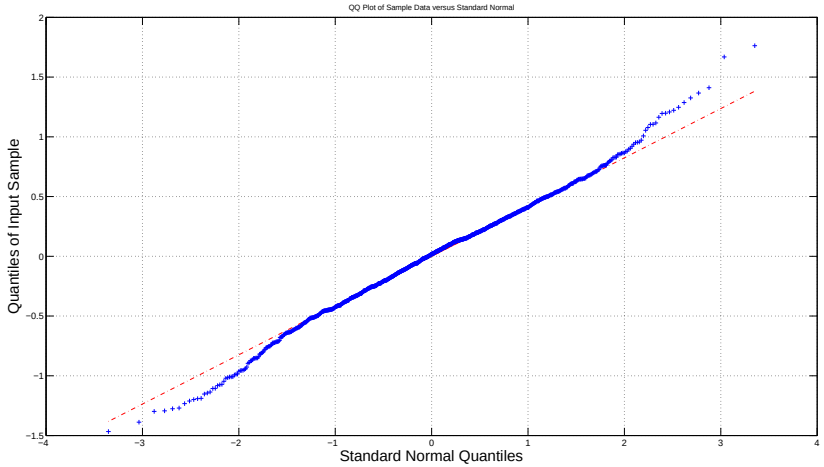
$$\ln wage = 0.34 + 0.04exper - 0.0007exper^2 + 0.18union - 0.40female + \\ + 0.08educ - 0.009exper * service - \\ - 0.008aboveavg - 0.15belogavg.$$

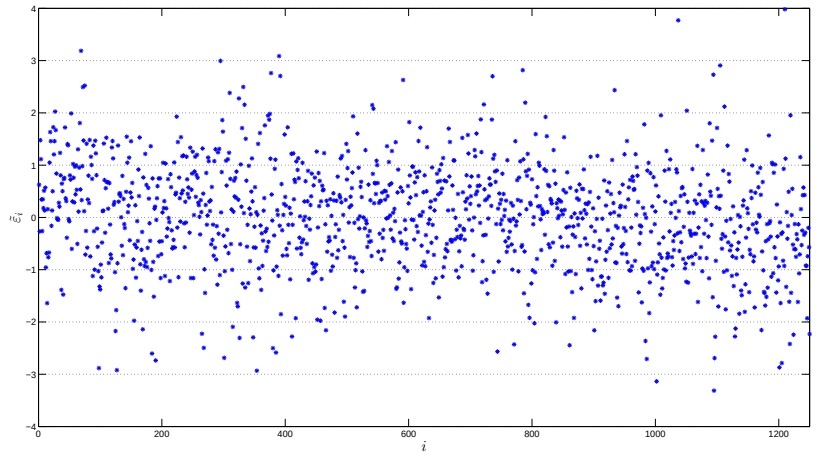
$F = 110.31,\ p = 5.2 \times 10^{-139},\ R^2 = 0.416,\ R_a^2 = 0.412.$

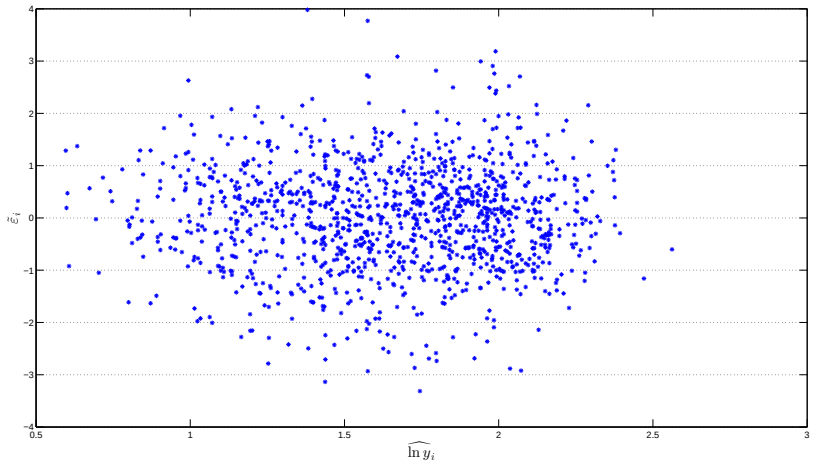
| Критерий | p-value |
|---|---|
| Шапиро-Уилка (нормальность) | $4.1 \times 10^{-4}$ |
| знаковых рангов (несмещённость) | $0.7591$ |
| Бройша-Пагана (гомоскедастичность) | $1.0 \times 10^{-5}$ |

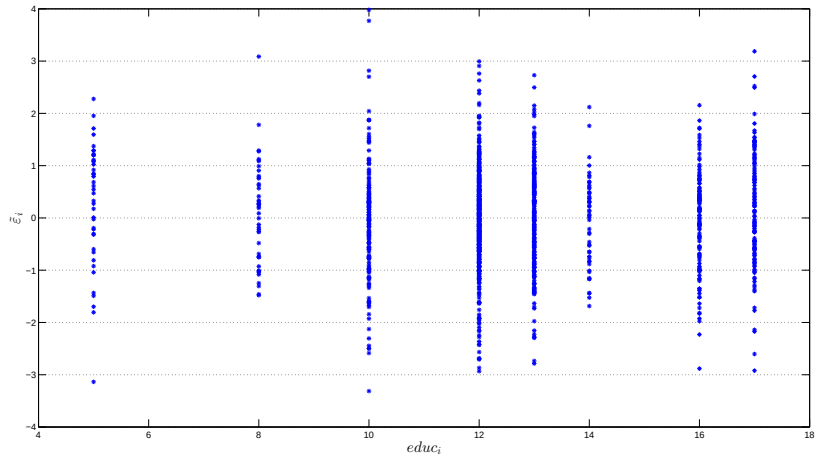
Значимы все признаки, кроме $aboveavg$ (множественная проверка с дисперсиями Уайта).

# Остатки модели 6

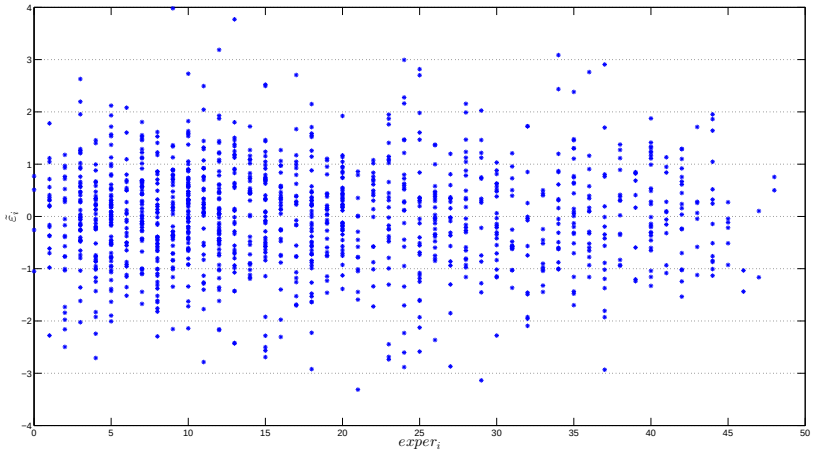


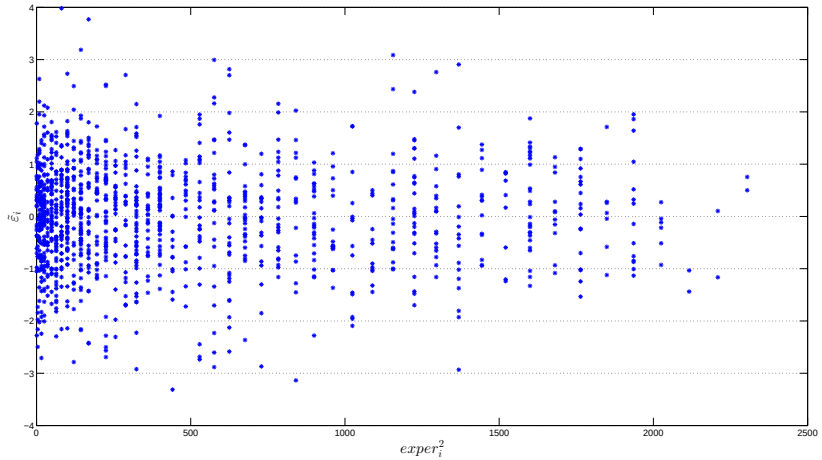



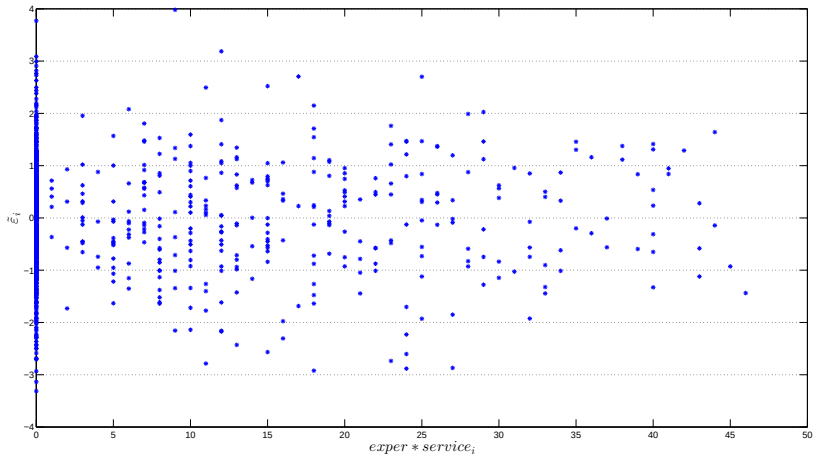



# Остатки модели 6

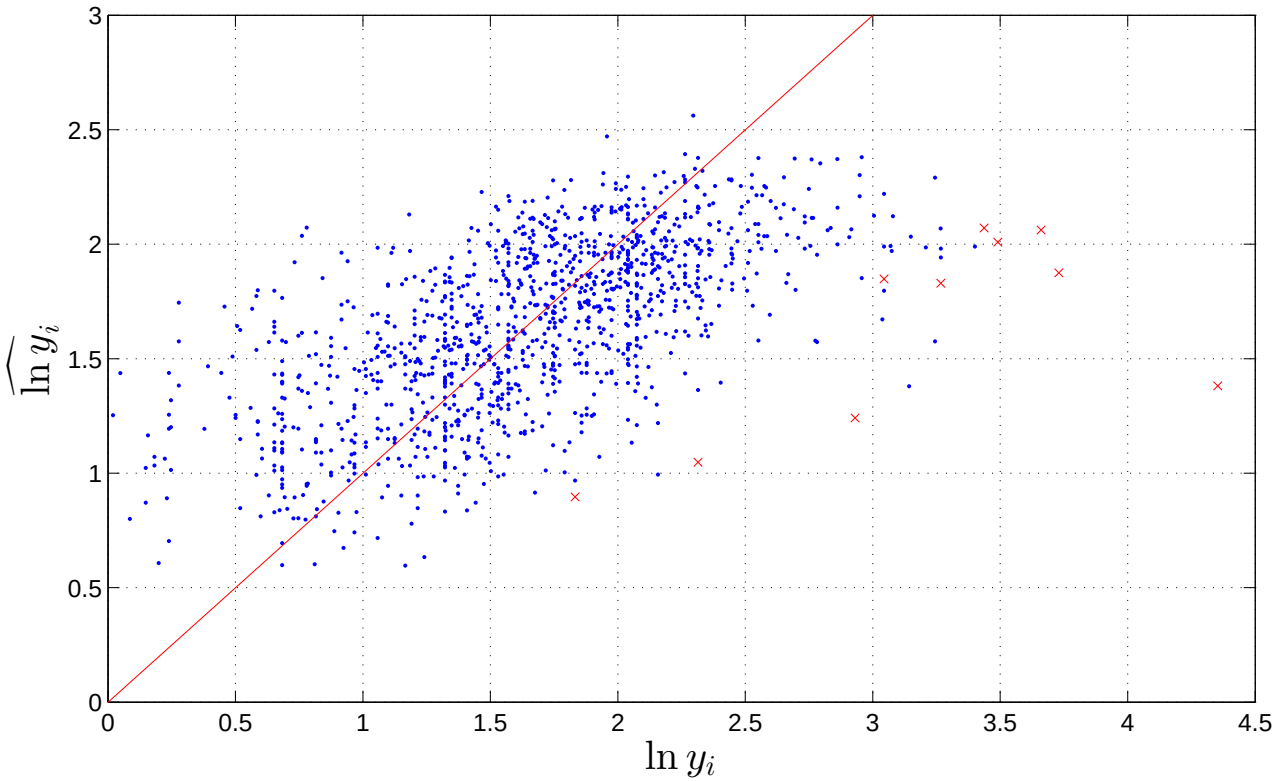


# Результат

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;
- множественная 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;
- доверительные ленты — Liu.

# 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.

Liu W. *Simultaneous Inference in Regression*. — Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2010.

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.