

Прикладной статистический анализ данных.  
7. Регрессионный анализ.

Рябенко Евгений  
riabenko.e@gmail.com

I/2015

## 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  $y \approx f(x_1, \dots, x_k)$ ;

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

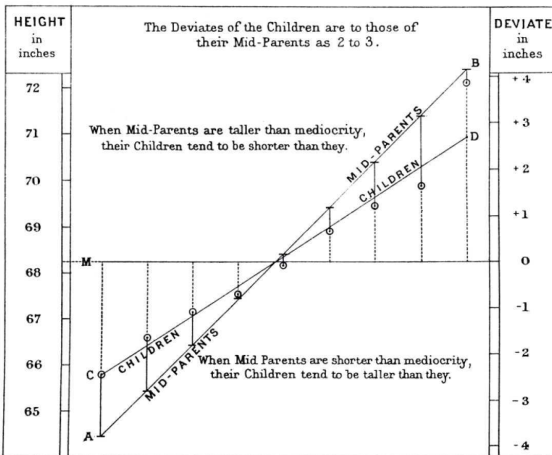
$\mathbb{E} (y | x_1, \dots, x_k) = f(x_1, \dots, x_k)$  — модель регрессии;

$\mathbb{E} (y | x_1, \dots, x_k) = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j$  — 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».



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



# 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:

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

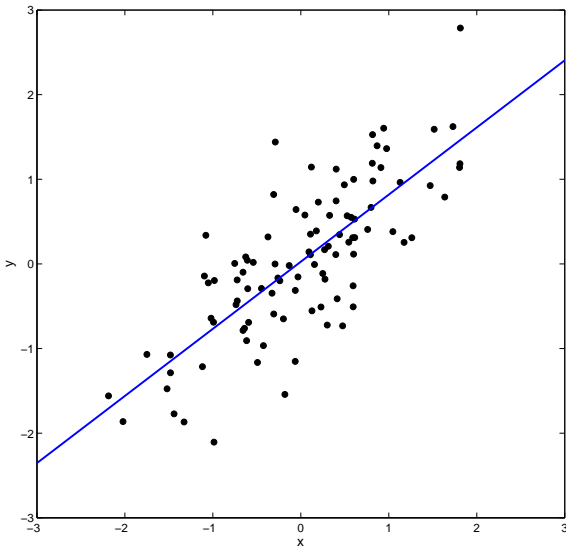
$$\|y - X\beta\|_2^2 \rightarrow \min_{\beta};$$

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

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

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

# Инверсия задачи регрессии



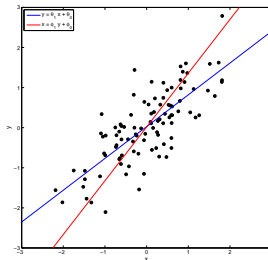








# Инверсия задачи регрессии



- 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  $y$ .

$$\hat{\theta}_1 = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}, \quad \hat{\phi}_1 = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum y^2 - (\sum y)^2},$$

$$\hat{r}_{xy} = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{\sqrt{(n \sum x^2 - (\sum x)^2) (n \sum y^2 - (\sum y)^2)}}.$$

## 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:

Тип должности	Dummy		Deviation	
	$x_1$	$x_2$	$x_1$	$x_2$
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 рабочего и инженера 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:

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

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

## Предположения модели

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

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

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

и состоятельными:

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

## Предположения модели

- 1 Линейность отклика:  $y = X\beta + \varepsilon$ .
- 2 Случайность выборки: наблюдения  $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$  независимы.
- 3 Полнота ранга: ни один из признаков не является константой или линейной комбинацией других признаков ни в популяции, ни в выборке ( $\text{rank } X = k + 1$ ).
- 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:

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

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

- Чем больше дисперсия ошибки  $\sigma^2$ , 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:

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

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

- ❶ Как найти доверительные интервалы для  $\beta_j$  и проверить гипотезу  $H_0: \beta_j = 0$ ?
- ❷ Как найти доверительный интервал для значений отклика на новом объекте  $y(x_0)$ ?
- ❸ Как проверить адекватность построенной модели?

## Предположение о нормальности ошибок

- Нормальность ошибок:  $\varepsilon | X \sim N(0, \sigma^2)$ .
- В предположениях (1-6) МНК-оценки совпадают с оценками максимального правдоподобия.

ММП:

$$p(\varepsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\varepsilon_i^2},$$
$$\ln \prod_{i=1}^n p(\varepsilon_i) \rightarrow \max_{\beta},$$
$$\sum_{i=1}^n \left( -\frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma) - \frac{1}{2\sigma^2} \varepsilon_i^2 \right) \rightarrow \max_{\beta},$$
$$\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n \left( y_i - \sum_{j=0}^k \beta_j x_{ij} \right)^2 \rightarrow \min_{\beta}.$$

## Предположение о нормальности ошибок

- Эквивалентная запись предположения (6):

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

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

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

кроме того,  $\frac{1}{\sigma^2} RSS \sim \chi_{n-k-1}^2$ .

- $\forall c \in \mathbb{R}^{k+1}$

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

## Доверительные и предсказательные интервалы

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

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

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

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

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

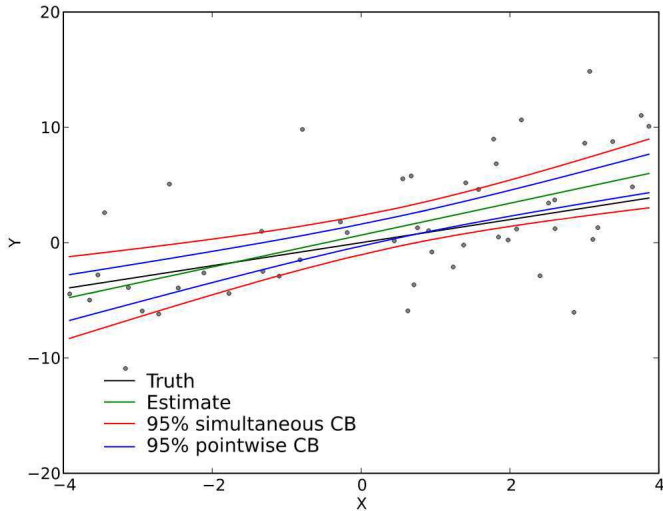
$$x_0^T \hat{\beta} \pm t_{n-k-1,1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}.$$

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

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

# Доверительные и предсказательные интервалы

Доверительная лента:



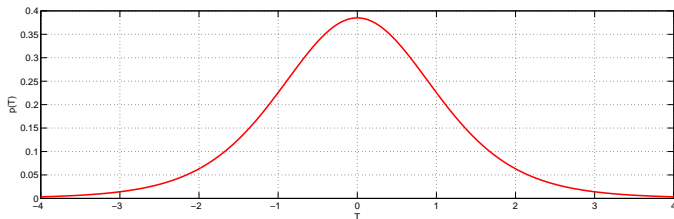
## t-критерий Стьюдента

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

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

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

$T \sim St(n-k-1)$  при  $H_0$ .







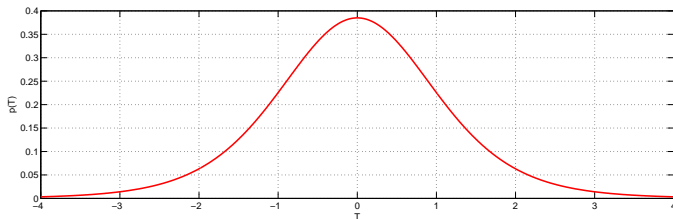
## t-критерий Стьюдента

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

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

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

$T \sim St(n - k - 1)$  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?

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

$$H_1: H_0 \text{ неверна} \Rightarrow p = 0.2421.$$

## 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.

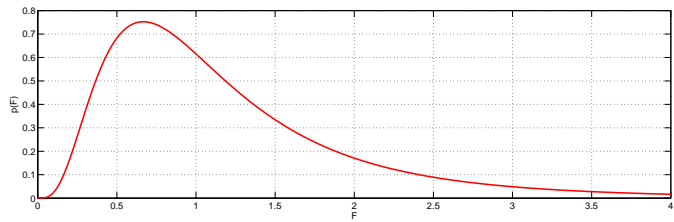
Иногда критерия Фишера не отвергает гипотезу о незначимости признаков  $X_2$ , а критерий Стьюдента признаёт значимыми некоторые из них.

Возможные объяснения:

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

# Критерий Фишера

нулевая гипотеза:  $H_0: \beta_1 = \dots = \beta_k = 0$ ;  
 альтернатива:  $H_1: H_0$  неверна;  
 статистика:  $F = \frac{R^2/k}{(1-R^2)/(n-k-1)}$ ;  
 $F \sim F(k, n - k - 1)$  при  $H_0$ .



# Критерий Фишера

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

$$H_0: \beta_1 = \dots = \beta_5 = 0.$$

$$H_1: H_0 \text{ неверна} \Rightarrow p = 6.0331 \times 10^{-9}.$$



## Сравнение невложенных моделей

**Пример:** имеются две модели:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon, \quad (1)$$

$$y = \gamma_0 + \gamma_1 \log x_1 + \gamma_2 \log x_2 + \varepsilon. \quad (2)$$

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:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 \hat{y} + \varepsilon,$$

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

При помощи критерия Стьюдента проверим

$$H_{01} : \beta_3 = 0, \quad H_{11} : \beta_3 \neq 0,$$

$$H_{02} : \gamma_3 = 0, \quad H_{12} : \gamma_3 \neq 0.$$

$H_{01} \backslash H_{02}$	Принята	Отвергнута
Принята	Обе модели хороши	Модель (1) значительно лучше
Отвергнута	Модель (2) значительно лучше	Обе модели плохи

## Неправильное определение модели

**Недоопределение:** если зависимая переменная определяется моделью

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

а вместо этого используется модель

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

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

**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:

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

## 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

(Freedman, 1983): 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.

## Отбор признаков с учётом эффекта множественной проверки гипотез

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

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

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

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

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

## Отбор признаков с учётом эффекта множественной проверки гипотез

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))
```

Короткий способ:

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

Работает при  $k \lesssim 100$ .



## 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**:

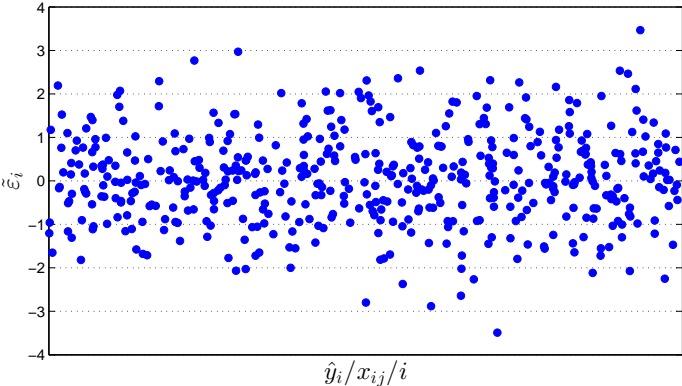
$$\hat{\varepsilon}_i = y_i - \hat{y}_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Стандартизированные остатки:

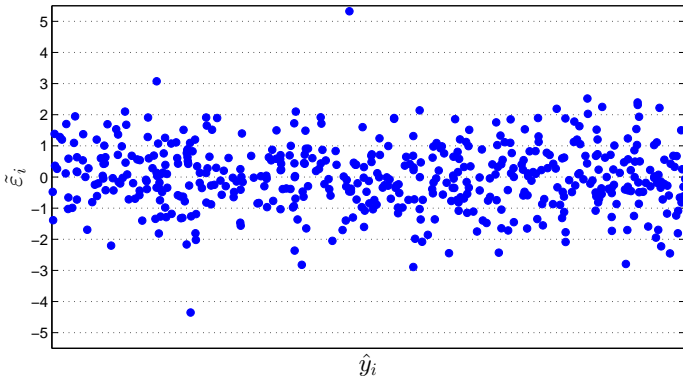
$$\tilde{\varepsilon}_i = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{\hat{\sigma}}, \quad i = 1, \dots, n.$$

# Визуальный анализ

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

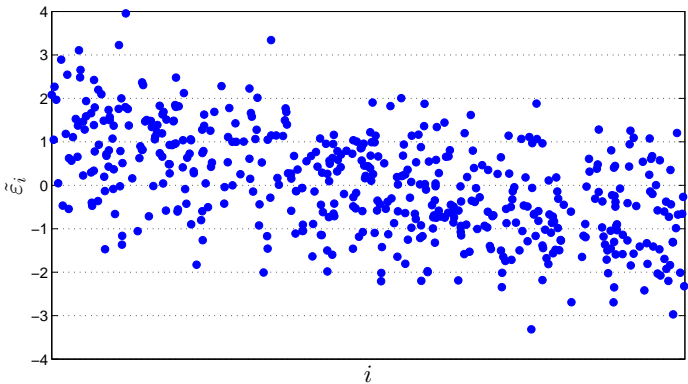


# Визуальный анализ



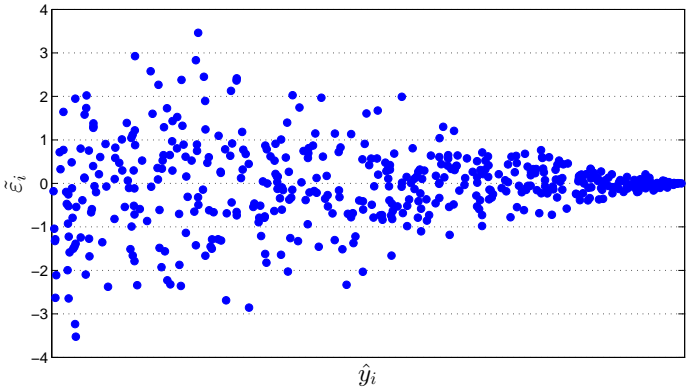
Возможно, присутствуют выбросы

# Визуальный анализ



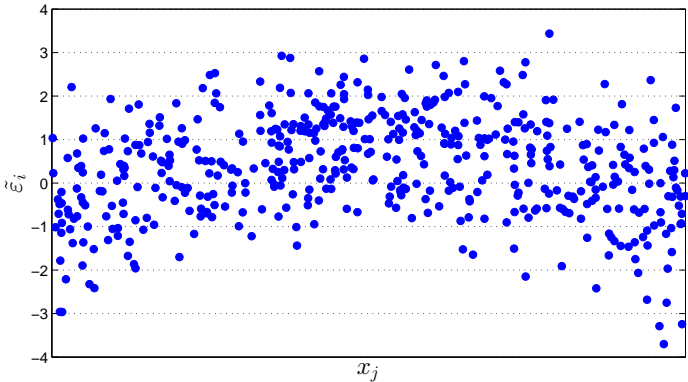
В данных имеется тренд

# Визуальный анализ



Гетероскедастичность

# Визуальный анализ



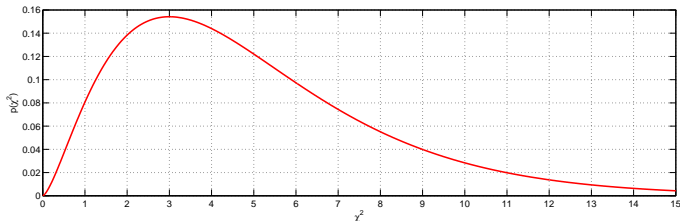
Стоит добавить квадрат признака  $x_j$

# 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

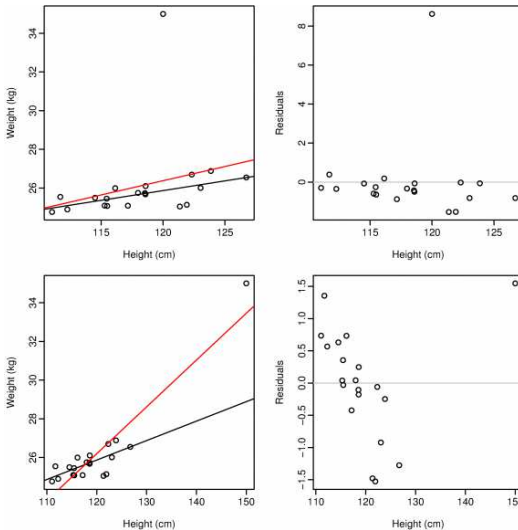
нулевая гипотеза:  $H_0: \mathbb{D}\varepsilon_i = \sigma^2$ ;  
 альтернатива:  $H_1: H_0$  неверна;  
 статистика:  $LM = nR_{\varepsilon^2}^2$ ,  $R_{\varepsilon^2}^2$  — коэффициент детерминации при регрессии квадратов остатков на признаки;  
 $LM \sim \chi_k^2$  при  $H_0$ .





# Расстояние Кука

Регрессия сильно подстраивается под далеко стоящие наблюдения.



## Расстояние Кука

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

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

$\hat{y}_{j(i)}$  — предсказания модели, настроенной по наблюдениям  $1, \dots, i-1, i+1, \dots, n$ , для наблюдения  $j$ ;

$h_i$  — диагональный элемент матрицы  $H = X(X^T X)^{-1} X^T$  (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  $y_1, \dots, y_n$  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

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

но оно сильно варьируется по  $\lambda$ .

Вместо него можно рассмотреть семейство преобразований

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

где  $\dot{y} = (y_1 y_2 \dots y_n)^{1/n}$  — 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  $\min_{\lambda} RSS(\lambda) \cdot e^{\chi_{1,1-\alpha}^2/n}$ . 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):

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

Асимптотика устойчивой оценки:

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

$$\hat{\Omega} = n (X^T X)^{-1} (X^T \text{diag}(\hat{\varepsilon}_1^2, \dots, \hat{\varepsilon}_n^2) X) (X^T X)^{-1}.$$

# 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

Пакет sandwich:

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

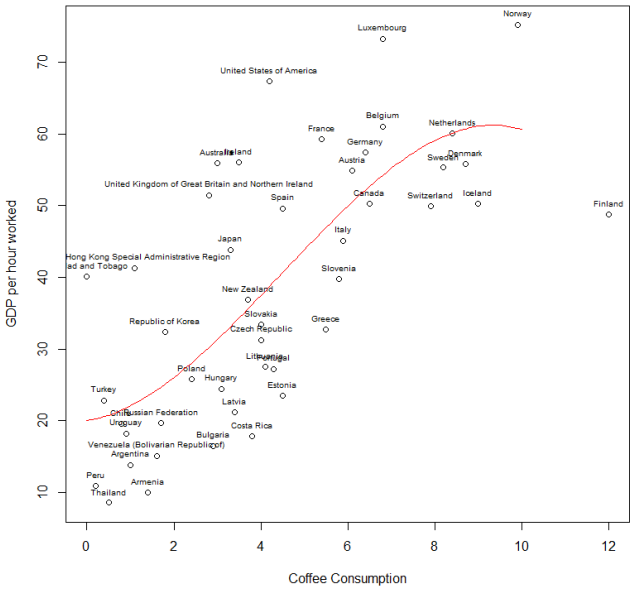
#significance of every predictor
coefTest(m, df = Inf, vcov = vcovHC(m, type = "HC0"))

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

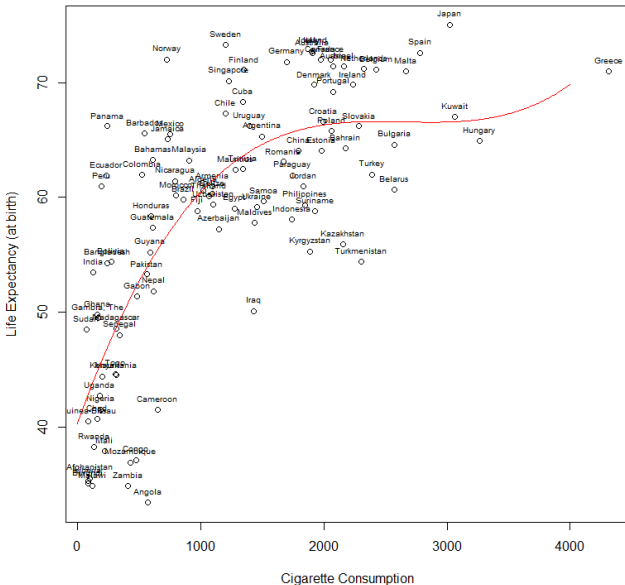
#significance of the whole equation
waldTest(m, vcov = vcovHC(m, type = "HC0"))
```



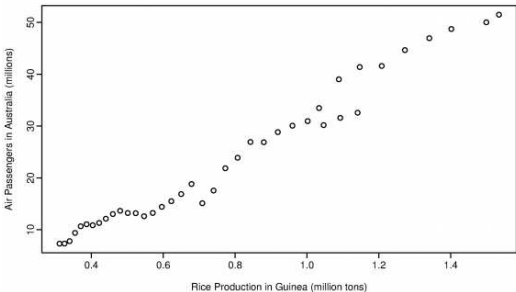
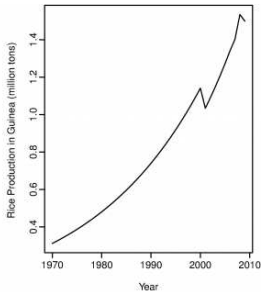
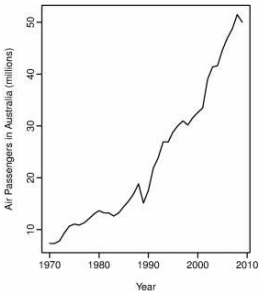
# Интерпретация регрессионной модели



# Интерпретация регрессионной модели



# Интерпретация регрессионной модели



# Пример

Привлекательность и уровень заработной платы:  
<https://yadi.sk/d/Lf2g2bMGfDM2N>

# 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;
- визуальный анализ остатков;
- проверка гипотез об остатках: нормальность, несмещённость, гомоскедастичность;
- отбор признаков с учётом множественной проверки гипотез и возможной гетероскедастичности;
- 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.

