

Лекция 3. Линейные модели. Продолжение.

27 марта 2013 г.

Обобщенные линейные модели

Определение (Экспоненциальное семейство распределений)

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

θ - параметр сдвига, ϕ - параметр масштаба.

Пример (Нормальное распределение)

$$\begin{aligned} f(y|\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) = \\ &= \exp\left(\frac{y\mu - \mu^2/2}{\sigma^2} - \frac{1}{2}\left(\frac{y^2}{\sigma^2} + \log(2\pi\sigma^2)\right)\right) \end{aligned}$$

$$\theta = \mu, \phi = \sigma^2, a(\phi) = \phi, b(\theta) = \theta^2/2 \text{ и}$$
$$c(y, \phi) = -(y^2/\phi + \log(2\pi\phi))/2$$

Обобщенные линейные модели

Пример (Распределение Пуассона)

$$f(y|\theta, \phi) = \frac{e^{-\mu} \mu^y}{y!} = \exp(y \log \mu - \mu - \log y!)$$

$\theta = \log(\mu)$, $\phi = 1$, $a(\phi) = 1$, $b(\theta) = \exp(\theta)$ и $c(y, \phi) = -\log y!$

Пример (Биномиальное распределение)

$$\begin{aligned} f(y|\theta, \phi) &= \binom{n}{k} \mu^y (1-\mu)^{n-y} = \\ &= \exp\left(y \log \frac{\mu}{1-\mu} + n \log(1-\mu) + \log \binom{n}{k}\right) \end{aligned}$$

$\theta = \log(\frac{\mu}{1-\mu})$, $a(\phi) = 1$, $b(\theta) = -n \log(1-\mu)$ и $c(y, \phi) = \log \binom{n}{k}$

Обобщенные линейные модели

Определение (Link function)

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p = x^T \beta$$

Пусть $EY = \mu$. Тогда

$$\eta = g(\mu)$$

функция g называется *link function*.

Link function называется канонической, если

$$g(\mu) = \theta$$

Основная идея *link function* - сопоставить среднее значение y и линейный предиктор.

Пример (Канонические link functions)

Нормальное распределение: $\eta = \mu$

Распределение Пуассона: $\eta = \log \mu$

Биномиальное распределение: $\eta = \log(\mu / (1 - \mu))$

Обобщенные линейные модели

Использование в R

```
> library(faraway) #для получения датасета
> glm1<-glm(Species~Area+Elevation+Nearest+Scruz+Adjacent,
  data=gala,family=gaussian)
Call: glm(formula = Species ~ Area + Elevation + Nearest +
  Scruz + Adjacent, family = gaussian, data = gala)
Coefficients:
(Intercept)          Area        Elevation       Nearest
             7.068221     -0.023938      0.319465      0.009144
           Scruz        Adjacent
             -0.240524     -0.074805
Degrees of Freedom: 29 Total (i.e. Null);  24 Residual
Null Deviance:      381100
Residual Deviance: 89230   AIC: 339.1
```

Deviance statistic

Определение (Deviance)

Если $I(y, \phi|y)$ - логарифм функции правдоподобия для "полной" модели (которая предсказывает значения выборки точно), а $I(\hat{\mu}, \phi|y)$ - логарифм функции правдоподобия для используемой, то *deviance* будем называть:

$$D(y, \hat{\mu}) = 2(I(y, \phi|y) - I(\hat{\mu}, \phi|y))$$

Null deviance - *deviance* для "нулевой" модели (которая представляет собой только *intercept*)

Биномиальная(логистическая) регрессия

Определение

$$P(Y_i = y_i) = \binom{n_i}{y_i} p_i^{y_i} (1 - p_i)^{n_i - y_i}$$

Link function:

$$\eta_i = g(p_i), \quad 0 \leq g^{-1}(\eta) \leq 1$$

Обычно выбирают одну из 3:

- 1) *Logit*: $\eta = \log(p/(1 - p))$
- 2) *Probit*: $\eta = \Phi^{-1}(p)$, где Φ - функция нормального распределения
- 3) *Complementary log-log*: $\eta = \log(-\log(1 - p))$

Биномиальная(логистическая) регрессия

Использование в R

```
> (logitmod <- glm(cbind(damage, 6-damage) ~ temp,
family=binomial, orings))
Coefficients:
(Intercept)      temp
    11.6630     -0.2162
Degrees of Freedom: 22 Total (i.e. Null);  21 Residual
Null Deviance:      38.9
Residual Deviance: 16.91   AIC: 33.67

> (logitmod<-glm(damage/6~temp,family=binomial, orings))
Coefficients:
(Intercept)      temp
    11.6630     -0.2162
Degrees of Freedom: 22 Total (i.e. Null);  21 Residual
Null Deviance:      6.483
Residual Deviance: 2.819   AIC: 8.058
```

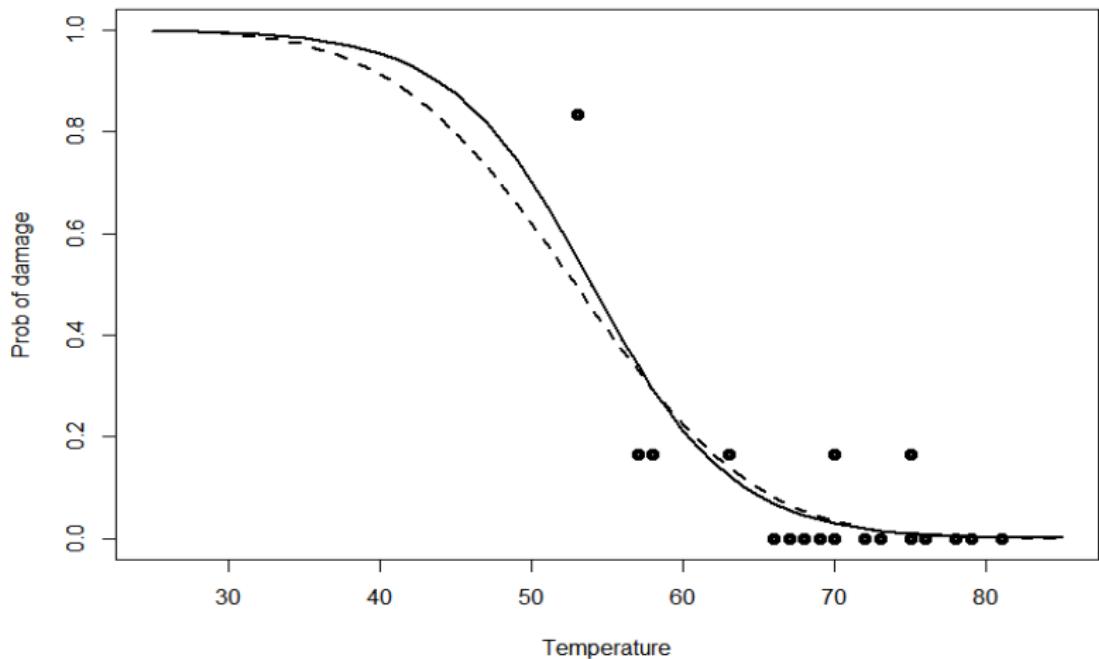
Биномиальная(логистическая) регрессия

Использование в R

```
> (probitmod <- glm(cbind(damage,6-damage) ~ temp,
family=binomial(link=probit), orings))
Coefficients:
(Intercept)          temp
      5.5915       -0.1058
Degrees of Freedom: 22 Total (i.e. Null);  21 Residual
Null Deviance:      38.9
Residual Deviance:  18.13  AIC: 34.89

> plot (damage/6 ~ temp, orings, xlim=c(25,85),lwd=4
ylim=c(0,1),xlab="Temperature", ylab="Prob of damage")
> x <- seq(25,85,1)
> lines(x,ilogit(11.6630-0.2162*x),lwd=2)
> lines(x, pnorm(5.5915-0.1058*x), lty=2,lwd=2)
```

Биномиальная(логистическая) регрессия



Оценка качества биномиальной регрессии

Определение

$$D \sim \chi^2(n - l)$$

где n - количество наблюдений, l - количество предикторов

Использование в R

```
# для модели биномиальной регрессии  
> pchisq(deviance(logitmod),df.residual(logitmod),lower=F)  
[1] 0.7164099  
  
# для "нулевой" модели  
> pchisq(38.9,22,lower=F)  
[1] 0.01448877
```

Оценка качества биномиальной регрессии

Определение (Аналог статистики R^2)

$$R^2 = \frac{1 - \exp((D - D_{null})/n)}{1 - \exp(-D_{null}/n)}$$

n - общее количество наблюдений

Использование в R

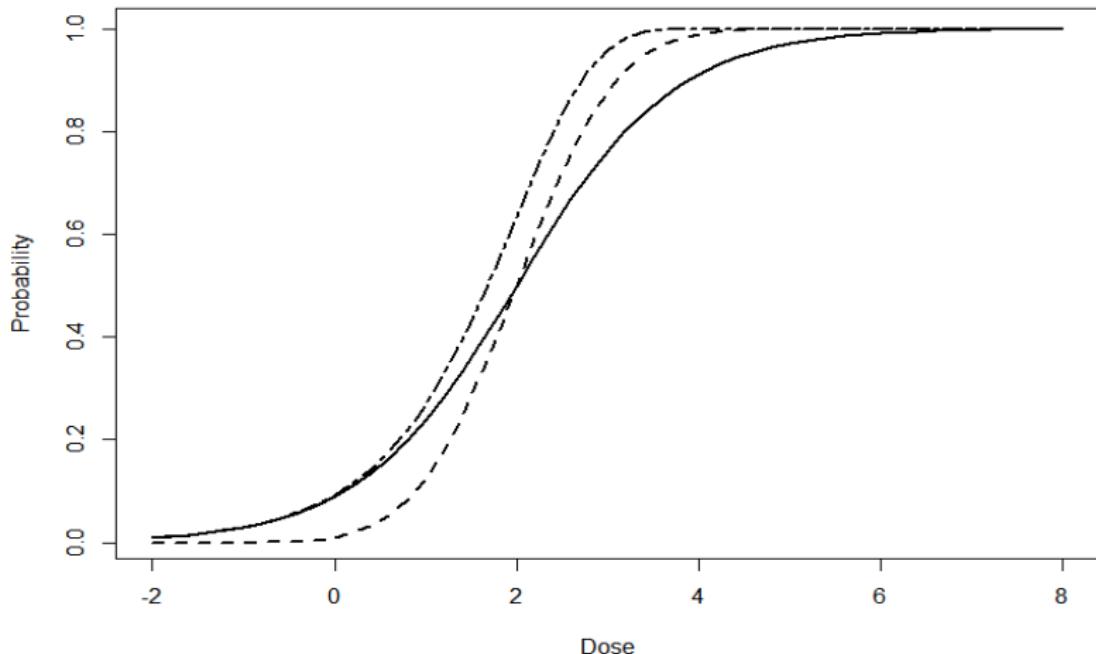
```
> modl<-glm(cbind(dead,alive)~conc,family=binomial,bliss)
> (1-exp((modl$dev-modl>null)/150))/(1-exp(-modl>null/150))
[1] 0.9953178
```

Сравнение link function биномиальной регрессии

Использование в R

```
> modl<-glm(cbind(dead,alive)~conc,family=binomial,  
data=bliss)  
> modp<-glm(cbind(dead,alive)~conc,  
family=binomial(link=probit),data=bliss)  
> modc<-glm(cbind(dead,alive)~conc,  
family=binomial(link=cloglog),data=bliss)  
> x<-seq(-2,8,0.2)  
> pl<-ilogit(modl$coef[1]+modl$coef[2]*x)  
> pp<-pnorm(modl$coef[1]+modl$coef[2]*x)  
> pc<-1-exp(-exp(modl$coef[1]+modl$coef[2]*x))  
> plot(x,pl,type="l",ylab="Probability",xlab="Dose",lwd=2)  
> lines(x,pp,lty=2,lwd=2)  
> lines(x,pc,lty=6,lwd=2)
```

Сравнение link function биномиальной регрессии



Проблема сходимости в биномиальной регрессии

Использование в R

```
> mod1<-glm(orientation~estrogen+androgen,hormone,  
family=binomial)  
Warning messages:  
1: glm.fit: algorithm did not converge  
2: glm.fit: fitted probabilities numerically 0 or 1  
occurred
```

Проблема сходимости в биномиальной регрессии

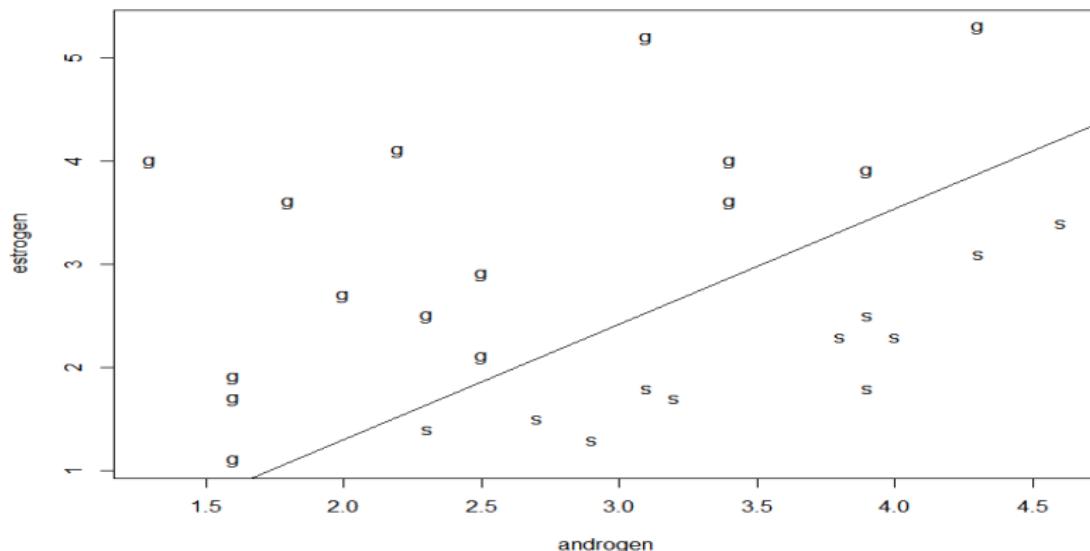
Использование в R

```
> summary(mod1)
Deviance Residuals:
    Min          1Q      Median          3Q      Max
-2.759e-05 -2.100e-08 -2.100e-08  2.100e-08  3.380e-05
Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -84.49     136095.03 -0.001   1.000
estrogen      -90.22      75910.98 -0.001   0.999
androgen      100.91      92755.62  0.001   0.999
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
Null deviance: 3.5426e+01 on 25 degrees of freedom
Residual deviance: 2.3229e-09 on 23 degrees of freedom
AIC: 6
Number of Fisher Scoring iterations: 25
```

Проблема сходимости в биномиальной регрессии

Использование в R

```
> plot(estimate~androgen, data=hormone,  
pch=as.character(orientation))  
> abline(-84.5/90.2, 100.9/90.2)
```



Пуассоновская регрессия

Определение

$$P(Y = y) = \frac{e^{-\mu} \mu^y}{y!}$$

Причины появления распределения Пуассона:

- 1) Вероятность успеха мала, а число случаев достаточно большое. Например, наличие редкой формы рака.
- 2) Вероятность события на некотором интервале времени пропорциональна его размеру и не зависит от появления других событий. Например, количество телефонных звонков.
- 3) Времена между событиями независимы и экспоненциально распределены. Главное отличие от биномиального распределения - число успехов не ограничено.

Пуассоновская регрессия

Использование в R

```
> modp<-glm(Species~Area+Elevation+Nearest+Scruz+
Adjacent,family=poisson,gala)
> summary(modp)

Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) 3.155e+00 5.175e-02 60.963 < 2e-16 ***
Area        -5.799e-04 2.627e-05 -22.074 < 2e-16 ***
Elevation   3.541e-03 8.741e-05  40.507 < 2e-16 ***
Nearest     8.826e-03 1.821e-03   4.846 1.26e-06 ***
Scruz       -5.709e-03 6.256e-04  -9.126 < 2e-16 ***
Adjacent    -6.630e-04 2.933e-05 -22.608 < 2e-16 ***
Signif.codes:0‘***’0.001‘**’0.01‘*’0.05‘.’0.1‘ ’1
(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)

Null deviance: 3510.73 on 29 degrees of freedom
Residual deviance: 716.85 on 24 degrees of freedom
AIC: 889.68
```

Непараметрическая регрессия

Определение

$$\hat{f}_\lambda(x) = \frac{1}{n\lambda} \sum_{j=1}^n K\left(\frac{x-x_j}{\lambda}\right) Y_j = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n w_j Y_j$$

где $w_j = K\left(\frac{x-x_j}{\lambda}\right)/\lambda$ и $\int K(x)dx = 1$. Функция K называется ядром регрессии.

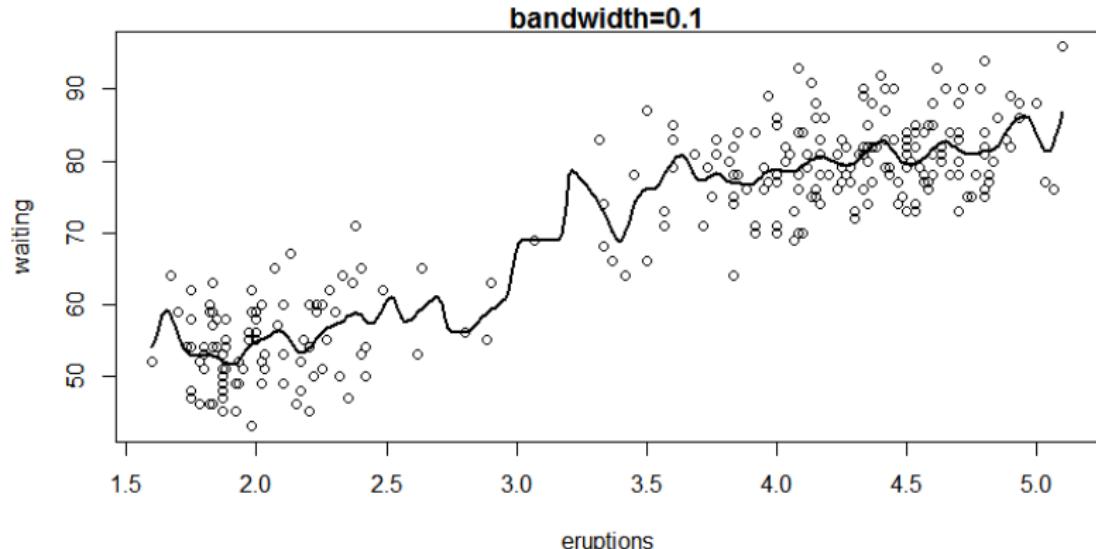
Определение (Оценка Nadaraya-Watson)

$$f_\lambda(x) = \frac{\sum_{j=1}^n w_j Y_j}{\sum_{j=1}^n w_j}$$

Непараметрическая регрессия

Использование в R

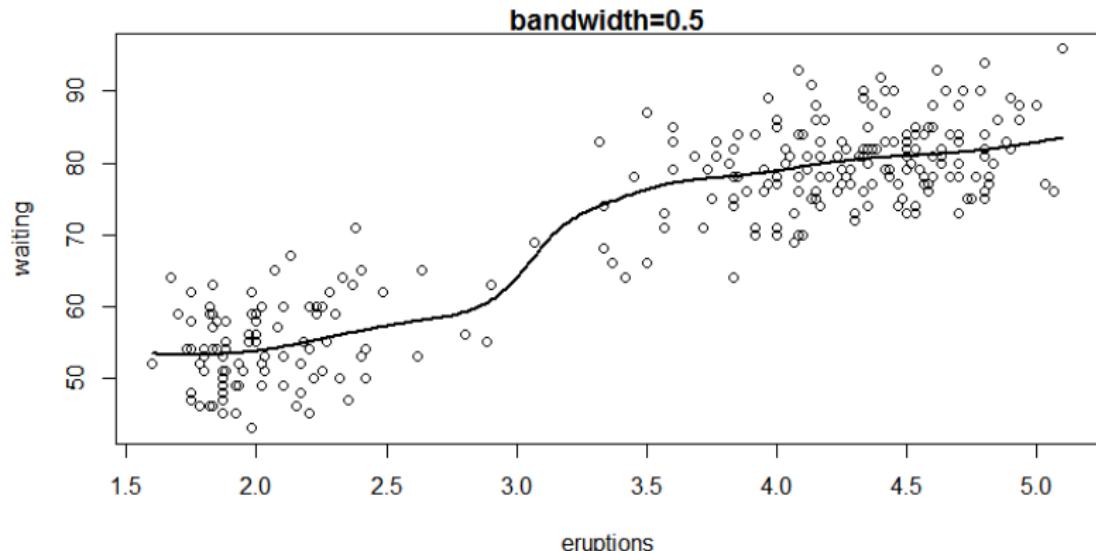
```
> plot(waiting~eruptions,faithful,main="bandwidth=0.1")
> lines(ksmooth(faithful$eruptions,faithful$waiting,
"normal",0.1),lwd=2)
```



Непараметрическая регрессия

Использование в R

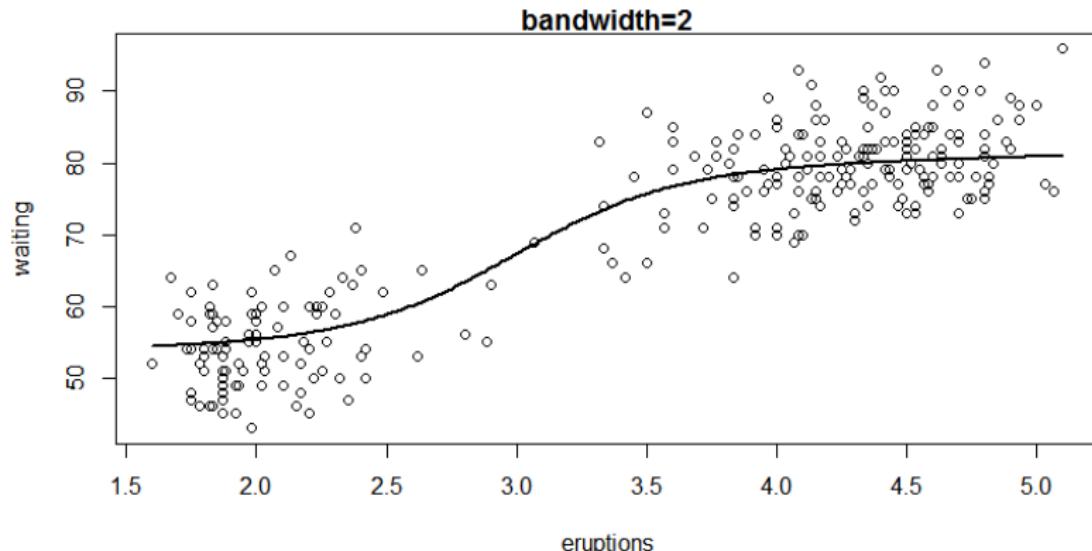
```
> plot(waiting~eruptions,faithful,main="bandwidth=0.5")
> lines(ksmooth(faithful$eruptions,faithful$waiting,
"normal",0.5),lwd=2)
```



Непараметрическая регрессия

Использование в R

```
> plot(waiting~eruptions,faithful,main="bandwidth=2")
> lines(ksmooth(faithful$eruptions,faithful$waiting,
"normal",2),lwd=2)
```



Определение

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p f_j(X_j) + \epsilon$$

где f_j - сглаживающие функции.

Определение (Backfitting algorithm)

1) $\beta_0 = \bar{y}$ и $f_j = 0$

Повторять до сходимости:

2) $f_j = S(x_j, y - \beta(0) - \sum_{k \neq j} f_k)$

где S - какая-нибудь сглаживающая функция.

Аддитивные модели

Использование в R

```
> amgam<-gam(O3~lo(temp)+lo(ibh)+lo(ibt),data=ozone)
> summary(amgam)

Deviance Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q      Max 
-13.1146 -2.3624 -0.2092  2.1732 12.4447 

(Dispersion Parameter for gaussian family taken to be 18.663)

Null Deviance: 21115.41 on 329 degrees of freedom
Residual Deviance: 5935.096 on 318.0005 degrees of freedom
AIC: 1916.049

Number of Local Scoring Iterations: 2

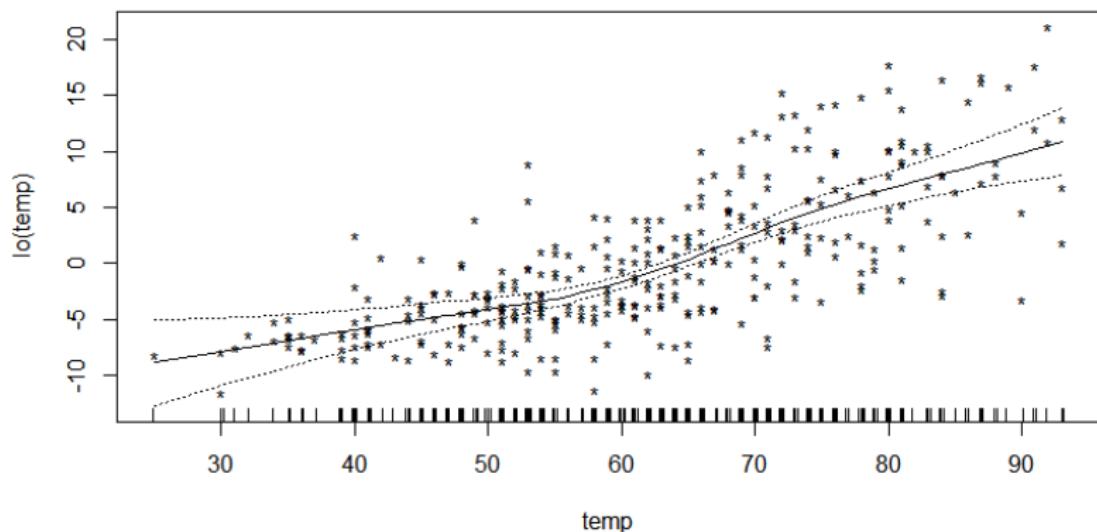
DF for Terms and F-values for Nonparametric Effects

          Df Npar Df Npar F      Pr(F)
(Intercept) 1
lo(temp)     1      2.5 7.4550 0.0002456 ***
lo(ibh)      1      2.9 7.6205 8.243e-05 ***
lo(ibt)      1      2.7 7.8434 9.917e-05 ***
```

Аддитивные модели

Использование в R

```
> plot(amgam, residuals=T, se=T, pch="*")
```



Регуляризация

Определение (Ридж регрессия)

$$J(\theta) = \frac{1}{2}(y - f(X\theta))^T(y - f(X\theta)) + \frac{\lambda}{2}||\theta||_{L^2}$$

Определение (Лассо регрессия)

$$J(\theta) = \frac{1}{2}(y - f(X\theta))^T(y - f(X\theta)) + \frac{\lambda}{2}||\theta||_{L^1}$$

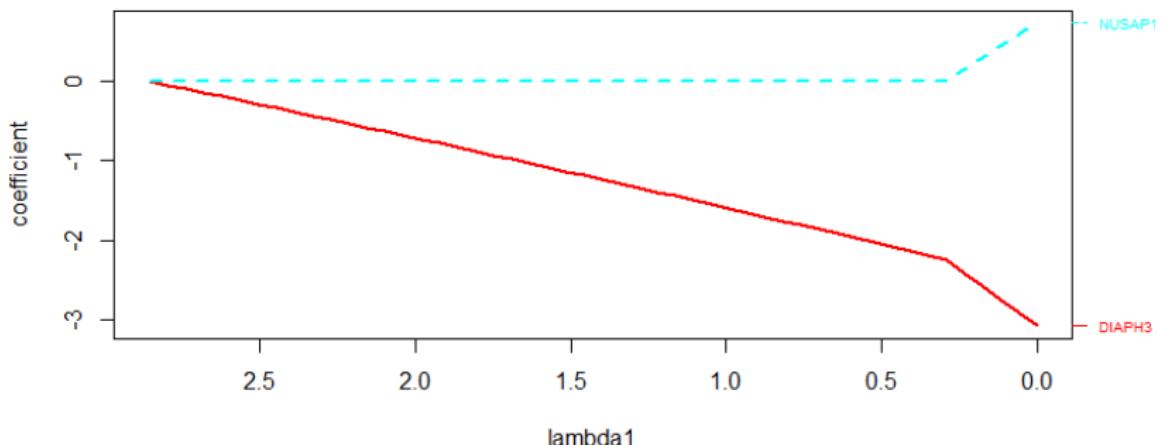
Использование в R

```
> library(penalized)
> data(nki70)
> lmr1 <- penalized(ER~DIAPH3+NUSAP1,data=nki70,lambda1=1)
# nonzero coefficients: 2
> lmr2 <- penalized(ER~DIAPH3+NUSAP1,data=nki70,lambda2=1)
> coefficients(lmr1)
(Intercept)      DIAPH3
 1.457045     -1.587166
> coefficients(lmr2)
(Intercept)      DIAPH3      NUSAP1
 1.4475712    -1.2150576   -0.2340205
```

Изменение коэффициентов в лasso регрессии

Использование в R

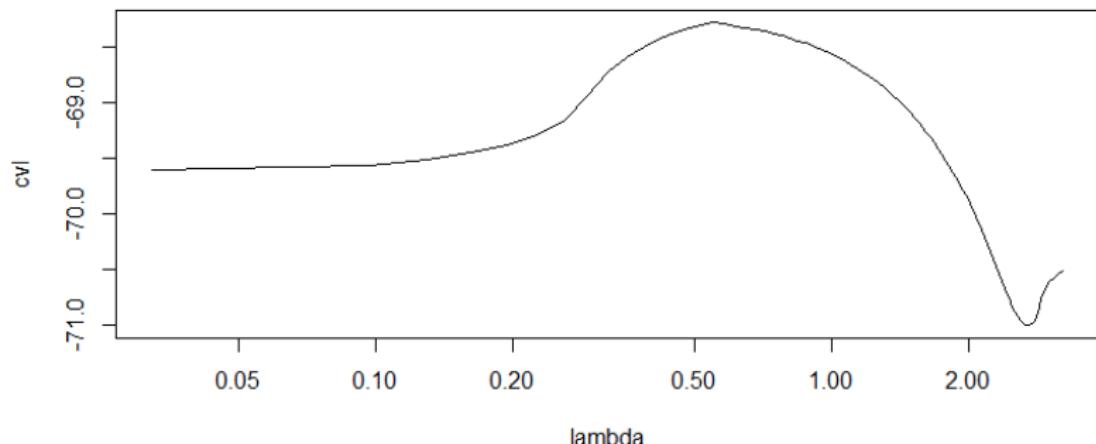
```
lmr1 <- penalized(ER~DIAPH3+NUSAP1, data=nki70,  
lambda1=0,step=50)  
plotpath(lmr1,lwd=2)
```



Подбор оптимального параметра λ_1

Использование в R

```
> profL1(ER~DIAPH3+NUSAP1, data=nki70, plot=T, trace=F)
> optL1(ER~DIAPH3+NUSAP1, data=nki70, trace=F)$lambda
[1] 0.5486795
```



Подбор оптимального параметра λ_2

Использование в R

```
> profL2(ER~DIAPH3+NUSAP1, data=nki70, minlambda=0.01,  
maxlambda=5, plot=T, trace=F)  
> optL2(ER~DIAPH3+NUSAP1, data=nki70, trace=F)$lambda  
[1] 0.6114319
```

