

M5VM05 Statistické modelování

6. Ověřování předpokladů v klasickém modelu lineární regrese – II

Jan Koláček (kolacek@math.muni.cz)

Ústav matematiky a statistiky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Brno



Multikolaritou se rozumí vzájemná lineární závislost vysvětlujících proměnných. Přesnou multikolaritou se rozumí případ, kdy jednotlivé sloupce \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, k$ matice plánu \mathbf{X} jsou lineárně závislé, takže pro aspoň jednu nenulovou konstantu c_j platí

$$c_1 \mathbf{x}_1 + \dots + c_k \mathbf{x}_k = \mathbf{0}.$$

V praxi bychom se s tímto případem neměli setkávat, neboť při rozumně sestaveném regresním modelu využijeme lineární kombinaci a zmenšíme počet vysvětlujících proměnných. Podobně nereálný je v praxi případ ortogonálních vysvětlujících proměnných, kdy matice \mathbf{X} je ortogonální a platí, že $\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{I}_k$. V praxi se tedy **multikolaritou** rozumí případ, kdy **přibližně** platí rovnice vyjadřující lineární kombinaci vysvětlujících proměnných. V případě silné multikolarity je determinant informační matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ blízký nule, nejmenší vlastní číslo je rovněž blízké nule a matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ je „skoro singulární“. O multikolaritě svědčí i vysoké hodnoty poměru největšího a nejmenšího vlastního čísla.

Důvody multikolinearity

- Multikolinearitu způsobuje regresní rovnice obsahující **nadbytečné** vysvětlující proměnné. Statistickými technikami můžeme přebytečné proměnné identifikovat a vyloučit z regresní rovnice.
- Multikolinearitu jen ztěží odstraníme v úlohách, kdy vzájemná spříženost hodnot vysvětlujících proměnných je způsobena neuvažovanými veličinami nebo **formou statistického zjišťování**. Jde-li např. o údaje z časových řad, je podobný vývoj sledovaných veličin dostatečným důvodem vzniku multikolinearity. Vzhledem k tomu, že multikolinearitu hodnotíme výhradně na základě určitého souboru pozorování, stačí nesprávný výběr kombinací hodnot vysvětlujících proměnných, nerepresentujících obor možných hodnot, k existenci významné multikolinearity.
- Závažným důvodem multikolinearity je **skutečný vztah** vysvětlujících proměnných v rámci sledovaného jevu, procesu nebo systému. V tomto případě je třeba využít všechny informace nevýběrového charakteru k zlepšení kvality regresních odhadů.

Důsledky multikolinearity

V případě přesné multikolinearity je matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ singulární a běžnou inverzí nepořídíme odhad neznámých parametrů β metodou nejmenších čtverců. Pro přibližnou multikolinearitu jsme sice schopni matici $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ invertovat, ale kvalita pořízených odhadů je poměrně nízká.

Snížení kvality se projeví

- v kovarianční matici $var(\hat{\beta}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$
- v přesnosti prováděných výpočtů

neboť důsledkem vysokých rozptylů odhadů jsou příliš široké intervaly spolehlivosti, a tedy malá přesnost odhadu.

Logickým důsledkem multikolinearity je obtížné vyjádření individuálního vlivu jednotlivých vysvětlujících proměnných. Projeví se to nízkými hodnotami testových kritérií v t -testech nedovolujícími potvrdit závažnost jednotlivých regresorů v regresní funkci. Závažným důsledkem je značná výpočetní nespolehlivost a nestabilní hodnoty regresních odhadů. Stačí malý zásah do statistických údajů a výsledné odhady jsou odlišné.

VIF – Variance Inflation Factors

Diagonální prvky matice $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$, tj.

$$\mathbf{a} = \text{diag}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$$

označované v literatuře jako **VIF – variance inflation factors** úzce souvisí s **vícenásobnými korelačními koeficienty**, vyjadřující vztah j -té vysvětlující proměnné a lineární funkce ostatních vysvětlujících proměnných. Lze je zapsat jako

$$a_j = \frac{1}{(1 - r_j^2)\mathbf{x}_j'\mathbf{x}_j}$$

kde $r_j = r_{x_j \cdot x_1 x_2 \dots x_{j-1} x_{j+1} \dots x_k}$ je koeficient mnohonásobné korelace.

Vysoký stupeň multikolinearity se projevuje vysokými hodnotami korelačních koeficientů r_j , ale i vysokými hodnotami některých jednoduchých korelačních koeficientů.

Detekce multikolinearity

Testujeme hypotézu $H_0 : \mathbf{R} = \mathbf{I}_k$ proti $H_1 : \mathbf{R} \neq \mathbf{I}_k$, kde \mathbf{R} je korelační matice proměnných. Platí-li nulová hypotéza, pak

$$K = - \left[n - 1 - \frac{1}{6}(2k + 7) \right] \ln |\mathbf{R}| \sim \chi^2 \left(\frac{k(k-1)}{2} \right).$$

Hypotézu H_0 tedy na hladině významnosti α zamítáme, pokud $K > \chi_{1-\alpha}^2 \left(\frac{k(k-1)}{2} \right)$.

Identifikace proměnných způsobujících multikolinearitu

Pro identifikaci proměnných způsobujících multikolinearitu se doporučují statistiky

$$F_j = \frac{n - k}{k - 1} (d_{jj} - 1),$$

kde d_{jj} jsou diagonální prvky matice $\mathbf{D} = \mathbf{R}^{-1}$. V případě, že proměnná X_j nezpůsobuje multikolinearitu, má veličina F_j Fisherovo – Snedecorovo rozdělení $F(k - 1, n - k)$.

Odstranění multikolinearity

Do modelu zařadíme jen ty regresory, které významně přispívají ke zlepšení kvality odhadu β . K výběru nejlepší podmnožiny regresorů použijeme **metodu postupné regrese**.

Algoritmus:

- 1 Spočteme korelační matici \mathbf{R} a provedeme test hypotézy $H_0 : \mathbf{R} = \mathbf{I}_k$. Je-li korelace prokázána, pokračujeme dalším krokem.
- 2 Spočteme korelační koeficienty $r_{Y,X_1}, \dots, r_{Y,X_k}$ a vybereme ten regresor X_i , jehož r_{Y,X_i} je v absolutní hodnotě největší.
- 3 Sestavíme model $Y = \beta_0 + \beta_1 X_i$ a odhadneme jeho parametry. Vypočteme hodnotu statistiky $F = \frac{(n-2)s_Y^2}{s^2} = \frac{(n-2)ID}{1-ID}$, kde ID značí index determinace. Pokud $F > F_{1-\alpha}(1, n-2)$, ponecháme regresor X_i v modelu.
- 4 Spočteme parciální korelační koeficienty $r_{Y,X_1 \cdot X_i}, \dots, r_{Y,X_{i-1} \cdot X_i}, r_{Y,X_{i+1} \cdot X_i}, \dots, r_{Y,X_k \cdot X_i}$ a vybereme ten regresor X_j , jehož $r_{Y,X_j \cdot X_i}$ je v absolutní hodnotě největší.

Odstranění multikolinearity

- 5 Sestavíme model $Y = \beta_0 + \beta_1 X_i + \beta_2 X_j$ a odhadneme jeho parametry.
Vypočteme hodnotu statistiky $F = \frac{(n-3)\Delta ID}{1-ID}$, kde ΔID je přírůstek indexu determinace při zařazení X_j do modelu a ID je index determinace pro model $Y = \beta_0 + \beta_1 X_i + \beta_2 X_j$. Pokud $F > F_{1-\alpha}(2, n-3)$, ponecháme regresor X_j v modelu.
- 6 Spočteme parciální korelační koeficienty $r_{Y, X_1 \cdot (X_i, X_j)}, \dots, r_{Y, X_k \cdot (X_i, X_j)}$ a vybereme ten regresor X_l , jehož $r_{Y, X_l \cdot (X_i, X_j)}$ je v absolutní hodnotě největší a tak pokračujeme dále.

Zlepšování podmíněnosti matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$

- **Model standardizovaných proměnných.** Místo původních proměnných y_i a x_{ij} pracujeme s proměnnými ve tvaru

$$q_i = \frac{y_i - \bar{y}}{s_y}, \quad z_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_{x_j}},$$

kde s_y a s_{x_j} jsou směrodatné odchylky jednotlivých proměnných. Standardizací vysvětlujících proměnných dostáváme při použití metody nejmenších čtverců místo matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ korelační matici $\mathbf{R} = \mathbf{Z}'\mathbf{Z}/n$. Vektor $\mathbf{Z}'\mathbf{q}/n$ obsahuje jednoduché korelační koeficienty r_{yx_j} . Standardizací proměnných se zmenšují zaokrouhlovací chyby a zlepšují se možnosti hodnocení individuálního vlivu proměnných pomocí regresních parametrů.

- **Model v kanonickém tvaru.** Místo modelu ve tvaru

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}'\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

pracujeme s modelem

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}'\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

kde matice $\mathbf{U} = \mathbf{XV}$, vektor $\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{V}'\boldsymbol{\beta}$ a \mathbf{V} je matice standardizovaných vlastních vektorů odpovídajících vlastním číslům matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$. Odhady parametrů v kanonickém tvaru:

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{U}'\mathbf{Y},$$

kde \mathbf{L} je diagonální matice s vlastními čísly matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$. Kovarianční matice odhadů $\text{var}(\hat{\boldsymbol{\gamma}}) = \sigma^2\mathbf{L}^{-1}$ ukazuje, že i v tomto případě jsou odhady nezávislé. Residuální součet čtverců se transformací nemění.

- **Hřebenová regrese** (ridge regression) – `lm.ridge` v balíku MASS

Příklad

V souboru „vydaje.Rdata“ jsou uložena data o 20 náhodně vybraných domácnostech. Sloupce proměnné „domacnosti“ obsahují postupně tyto údaje: výdaje za potraviny a nápoje (Y), počet členů domácnosti (X_1), počet dětí (X_2), průměrný věk výdělečně činných (X_3) a příjem domácnosti (X_4). Metodou postupné regrese zkonstruuje model s nejlepší podmíněností regresorů.

Řešení Uvažujme nejdřív model se všemi regresory. Spočtěme nejprve pro ilustraci $\det((\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}) = 4,65 \times 10^{-16}$. Také hodnoty VIF jsou pro první dva regresory vysoké:

$$\begin{array}{cccc} \text{clenu} & \text{deti} & \text{vek} & \text{prijem} \\ \hline 21,23 & 16,18 & 1,31 & 3,4 \end{array}$$

Testujeme-li hypotézu $H_0 : \mathbf{R} = \mathbf{I}_4$, hodnota testové statistiky

$$K = - \left[19 - \frac{15}{6} \right] \ln |\mathbf{R}| = 64,94$$

výrazně převyšuje kritickou hodnotu $\chi_{0,95}^2(6) = 12,59$. Hypotézu H_0 tedy na hladině významnosti 0,05 zamítáme.

Pro identifikaci proměnných způsobujících multikolinearitu můžeme spočítat dílčí statistiky F_j

clenu	deti	vek	prijem
107,88	80,94	1,66	12,83

které porovnáme s kritickou hodnotou $F_{0,95}(3, 16) = 3,24$.

Postupná regrese

- 1 Spočteme korelační koeficienty $r_{Y,X_1}, \dots, r_{Y,X_4} = (0,77; 0,67; 0,18; 0,73)$. Vybereme regresor X_1 , neboť jeho korelace je v absolutní hodnotě největší.
- 2 Sestavíme model $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1$. Vypočteme hodnotu statistiky $F = \frac{(n-2)ID}{1-ID} = \frac{18 \cdot 0,5897}{1-0,5897} = 25,87$. Tato hodnota je větší než $F_{0,95}(1, 18) = 4,41$, takže regresor X_1 ponecháme v modelu.
- 3 Spočteme parciální korelační koeficienty $r_{Y,X_2 \cdot X_1}, r_{Y,X_3 \cdot X_1}, r_{Y,X_4 \cdot X_1} = (0,36; 0,499; 0,32)$. Vybereme regresor X_3 , jehož parciální korelační koeficient je v absolutní hodnotě největší.

- 4 Sestavíme model $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_3$. Vypočteme hodnotu statistiky $F = \frac{(n-3)\Delta ID}{1-ID} = \frac{17 \cdot 0,102}{1-0,69} = 5,64$. Tato hodnota je větší než $F_{0,95}(2, 17) = 3,59$, tedy ponecháme regresor X_3 v modelu.
- 5 Spočteme parciální korelační koeficienty $r_{Y, X_2 \cdot (X_1, X_3)}, r_{Y, X_4 \cdot (X_1, X_3)} = (0,19; 0,17)$. Vybereme regresor X_2 , jehož parciální korelační koeficient je v absolutní hodnotě největší.
- 6 Sestavíme model $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_3 + \beta_3 X_2$. Vypočteme hodnotu statistiky $F = \frac{(n-4)\Delta ID}{1-ID} = \frac{16 \cdot 0,012}{1-0,704} = 0,63$. Tato hodnota je menší než $F_{0,95}(3, 16) = 3,24$, a tedy regresor X_2 již nezahrneme do modelu.

Výsledný model je tedy tvaru

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_3.$$

Úlohy k procvičení

Příklad 1

V souboru „*cement.RData*“ jsou uloženy údaje, které se týkají chemického složení portlandského cementu:

- y množství tepla v kaloriích na gram cementu
- x_1 Tricalcium aluminate $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ v %
- x_2 Tricalcium silicate $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ v %
- x_3 Tetraaluminium ferrite $4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ v %
- x_4 Dicalcium silicate $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ v %

Testujte multikolinearitu v daném modelu. Metodou postupné regrese nalezněte vhodný model. Poté ověřte normalitu residuí.

[Multikolinearita se nezamítá, vhodný model: $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_4$, normalita residuí se nezamítá.]

Úlohy k procvičení

Příklad 2

V proměnné „*mtcars*“^a jsou uložena data pro modelování závislosti spotřeby paliva osobních automobilů (proměnná *mpg*, počet mil/galon) na vlastnostech motoru, které jsou popsány následujícími proměnnými:

<i>cyl</i>	počet válců
<i>disp</i>	objem válců (kubické palce)
<i>hp</i>	výkon (počet koní)
<i>drat</i>	převodový poměr zadní nápravy
<i>wt</i>	hmotnost vozidla (kilolibry)
<i>qsec</i>	zrychlení (počet sekund z 0 na 1/4 míle)
<i>vs</i>	uspořádání válců (1 – „V“, 0 – za sebou)
<i>am</i>	převodovka (0 – automat, 1 – manuál)
<i>gear</i>	počet převodových stupňů
<i>carb</i>	počet karburátorů

Testujte multikolinearitu v daném modelu. Metodou postupné regrese nalezněte vhodný model. Ověřte také normalitu residuí.

^adatový soubor implementovaný v jazyce R

Úlohy k procvičení

[Multikolinearita se nezamítá, vhodný model: $\text{mpg} = \beta_0 + \beta_1 \text{wt} + \beta_2 \text{cyl}$, normalita residuí se nezamítá.]

Příklad 3 (pro náročné)

Naprogramujte funkci „multicol.R“, která pro zadaný model zjistí přítomnost multikolinearity v datech. V případě, že je multikolinearita přítomna, metodou postupné regrese nalezne vhodný model.