

M5VM05 Statistické modelování

6. Ověřování předpokladů v klasickém modelu lineární regrese – I

Jan Koláček (kolacek@math.muni.cz)

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

podzim 2013



Motivace

Možnost použití statistických testů je podmíněna nějakými předpoklady o datech. Velmi často je to předpoklad o typu rozložení, z něhož získaná data pocházejí. Mnoho testů je založeno na předpokladu normality. Opomíjení předpokladů o typu rozložení může v praxi vést i ke zcela zavádějícím výsledkům, proto je nutné věnovat tomuto problému patřičnou pozornost.

Testování normality

Graficky

① Histogram

- ▶ třídicí intervaly $(u_1, u_2), \dots, (u_r, u_{r+1})$
- ▶ doporučuje se volit r blízké \sqrt{n} .

Četnostní hustota j -tého třídicího intervalu je definována vztahem

$$f_j = \frac{p_j}{d_j}$$

kde $d_j = u_{j+1} - u_j$. Soustava obdélníků sestrojených nad třídicími intervaly, jejichž plochy jsou rovny relativním četnostem, se nazývá **histogram**.

Testování normality

② Quantile - quantile plot (Q-Q plot)

Q-Q plot konstruujeme tak, že na svislou osu vynášíme uspořádané hodnoty $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$ a na vodorovnou osu kvantily $K_{\alpha_j}(X)$ vybraného rozložení, kde

$$\alpha_j = \frac{j - r_{adj}}{n + n_{adj}},$$

přičemž r_{adj} a n_{adj} jsou korigující faktory $\leq 0,5$. Implicitně se klade $r_{adj} = 0,375$ a $n_{adj} = 0,25$. Pokud vybrané rozložení závisí na nějakých parametrech, pak se tyto parametry odhadují z dat, nebo se volí na základě teoretického modelu. Body $(K_{\alpha_j}(X), x_{(j)})$ se metodou nejmenších čtverců proloží přímka. Čím méně se body odchylují od této přímky, tím lepší je soulad mezi empirickým a teoretickým rozložením.

Jsou-li některé hodnoty $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$ stejné, pak za j bereme průměrné pořadí odpovídající takové skupince.

Testování normality

③ Graf výběrové distribuční funkce

Položme

$$z_{(i)} = \frac{x_{(i)} - \bar{x}}{s}, \quad i = 1, \dots, n, \quad s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}.$$

x -ová osa: hodnoty $z_{(i)}$

y -ová osa: hodnoty distribuční funkce $N(0, 1)$ $\phi(z_{(i)})$ porovnat s hodnotami výběrové distribuční funkce $F_n(z_{(i)}) = \frac{i}{n}$, $i = 1, \dots, n$.

Testování normality

Výpočtem

① Kolmogorovův – Smirnovův test

Testujeme hypotézu, která tvrdí, že náhodný výběr X_1, \dots, X_n pochází z rozložení s distribuční funkcí $\Phi(x)$. Nechť $F_n(x)$ je výběrová distribuční funkce. Testovou statistikou je statistika

$$D_n = \sup_{-\infty < x < \infty} |F_n(x) - \Phi(x)|.$$

Nulovou hypotézu zamítáme na hladině významnosti α , když $D_n \geq D_n(\alpha)$, kde $D_n(\alpha)$ je tabelovaná kritická hodnota. Pro $n \geq 30$ lze $D_n(\alpha)$ approximovat výrazem

$$\sqrt{\frac{1}{2n} \ln \frac{2}{\alpha}}.$$

Testování normality

② Shapirův – Wilkův test normality

Testujeme hypotézu, která tvrdí, že náhodný výběr X_1, \dots, X_n pochází z rozložení $N(\mu, \sigma^2)$. Test je založen na zjištění, zda body v Q-Q plotu jsou významně odlišné od regresní přímky proložené těmito body. Shapirův – Wilkův test se používá především pro výběry menších rozsahů, $n < 50$.

Testování normality

3 Testy dobré shody

H_0 : „náhodný výběr X_1, \dots, X_n pochází z rozdělení s distr. funkcí $\Phi(x)$ “

- Je-li distribuční funkce spojitá, pak data rozdělíme do r třídicích intervalů $(u_j, u_{j+1}), j = 1, \dots, r$. Zjistíme absolutní četnost n_j j -tého třídicího intervalu a vypočteme pravděpodobnost p_j , že náhodná veličina X s distribuční funkcí $\Phi(x)$ se bude realizovat v j -tém třídicím intervalu. Platí-li nulová hypotéza, pak $p_j = \Phi(u_{j+1}) - \Phi(u_j)$.
- Má-li distribuční funkce nejvýše spočetně mnoho bodů nespojitosti, pak místo třídicích intervalů použijeme varianty $x_{[j]}, j = 1, \dots, r$. Pro variantu $x_{[j]}$ zjistíme absolutní četnost n_j a vypočteme pravděpodobnost p_j , že náhodná veličina X s distribuční funkcí $\Phi(x)$ se bude realizovat variantou $x_{[j]}$. Platí-li nulová hypotéza, pak

$$p_j = \Phi(x_{[j]}) - \lim_{x \rightarrow x_{[j]}^-} \Phi(x) = P(X = x_{[j]}). \quad (1)$$

Testová statistika:

$$K = \sum_{j=1}^r \frac{(n_j - np_j)^2}{np_j} \approx \chi^2(r - 1 - p). \quad (2)$$

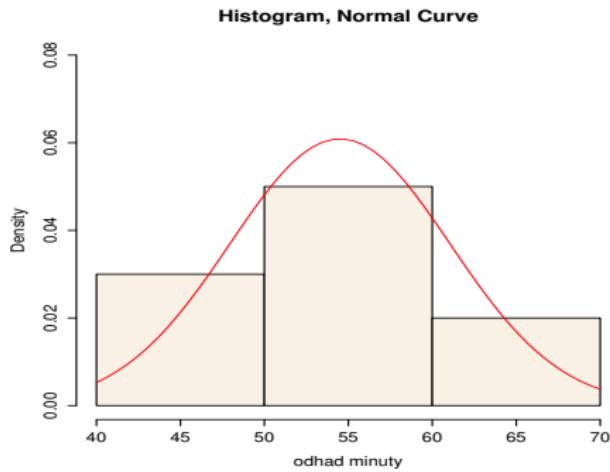
Aproximace se považuje za vyhovující, když $np_j \geq 5, j = 1, \dots, r$.

Příklad

Příklad 1

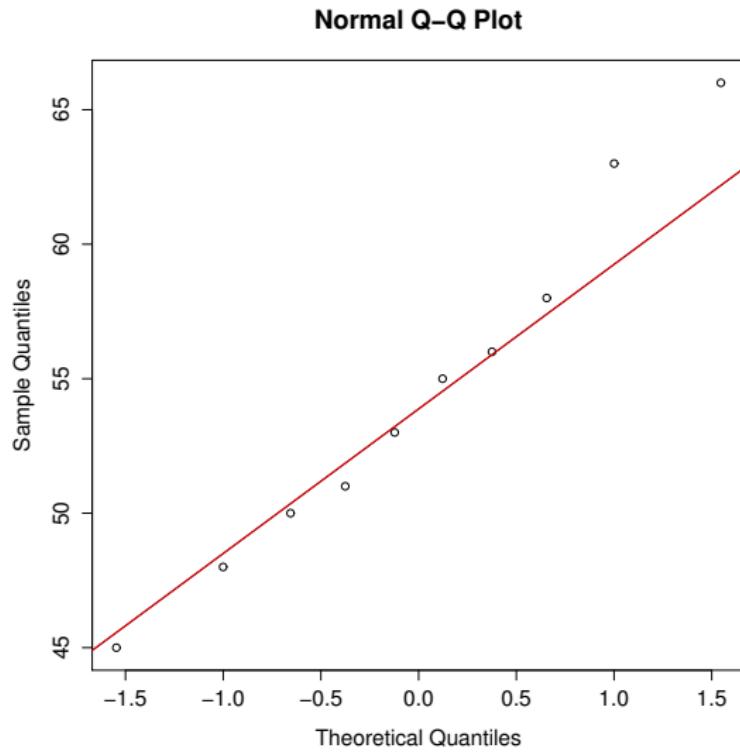
Deset pokusných osob mělo nezávisle na sobě bez předchozího nácviku odhadnout, kdy od daného signálu uplyne jedna minuta. Výsledky pokusu jsou uloženy v souboru „minuta.RData“. Testujte graficky i výpočtem, zda se jedná o výběr z normálního rozdělení.

Řešení Histogram a teoretická hustota



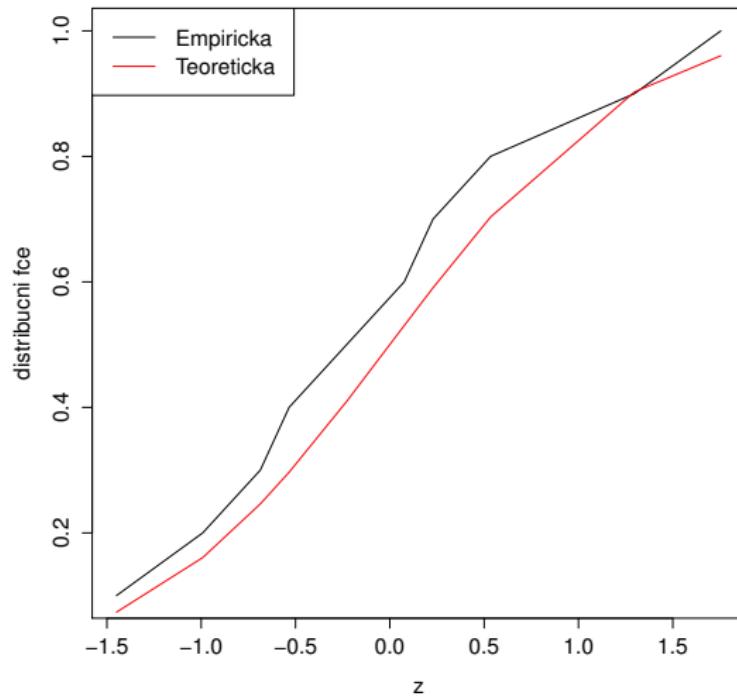
Řešení

Q–Q plot



Řešení

Výběrová distribuční funkce



Výpočtem

- Kolmogorovův – Smirnovův test

$$p-value = 0,9985$$

- Shapirův–Wilkův test

$$p-value = 0,9164$$

- Test dobré shody

$$p-value = 0,9189$$

Autokorelace

V některých případech (často v časových řadách) hodnoty náhodné chyby ε_i závisí na předchozích hodnotách ε_{i-k} , $k = 1, 2, \dots$, což má za následek, že efekt náhodných chyb není okamžitý, ale je pociťován i v budoucnosti. Tento případ se nazývá **autokorelace**.

Nejjednodušší typ: **autoregresce 1. řádu** – ozn. $AR(1)$

$$\varepsilon_i = \theta \varepsilon_{i-1} + u_i,$$

kde θ je neznámý parametr, $|\theta| < 1$, $E u_i = 0$, $cov(u_i, u_j) = \begin{cases} \sigma_u^2 & i = j, \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$

AR(1)

$$\varepsilon_i = \theta \varepsilon_{i-1} + u_i = \theta(\theta \varepsilon_{i-2} + u_{i-1}) + u_i = \theta^2 \varepsilon_{i-2} + \theta u_{i-1} + u_i = \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \theta^j u_{i-j}$$

$$E\varepsilon_i = E \sum_{j=0}^{\infty} \theta^j u_{i-j} = \sum_{j=0}^{\infty} \theta^j E u_{i-j} = 0$$

$$D\varepsilon_i = D \sum_{j=0}^{\infty} \theta^j u_{i-j} = \sum_{j=0}^{\infty} \theta^{2j} D u_{i-j} = \sigma_u^2 \sum_{j=0}^{\infty} \theta^{2j} = \frac{\sigma_u^2}{1-\theta^2}$$

$$cov(\varepsilon_i, \varepsilon_{i-j}) = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \theta^r \theta^s cov(u_{i-r}, u_{i-j-s}) = \theta^j \sigma_u^2 \sum_{r=0}^{\infty} \theta^{2r} = \frac{\theta^j \sigma_u^2}{1-\theta^2} \text{ pro } j > 0$$

Tedy

$$D\varepsilon = \frac{\sigma_u^2}{1-\theta^2} \begin{pmatrix} 1 & \theta & \theta^2 & \dots & \theta^{n-1} \\ \theta & 1 & \theta & \dots & \theta^{n-2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \theta \\ \theta^{n-1} & \dots & \theta^2 & \theta & 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{\sigma_u^2}{1-\theta^2}}_{\sigma_\varepsilon^2} \mathbf{W}.$$

Máme tedy model tvaru:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \varepsilon, \quad E\varepsilon = \mathbf{0}, \quad D\varepsilon = \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{W}, \quad \text{píšeme} \quad \mathbf{Y} \sim \mathcal{L}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{W})$$

Rozšířený lineární model

Věta 2 (Aitkenův odhad)

Mějme regresní model $\mathbf{Y} \sim \mathcal{L}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W})$ plné hodnosti, kde $\mathbf{W} > 0$. Pak odhad pomocí metody nejmenších čtverců je roven

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathbf{W}} = (\mathbf{X}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{Y}.$$

Z věty tedy plyne, že pokud známe parametr θ , můžeme v uvedeném modelu najít odhady $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.

Detekce autokorelace

1 Graficky

Označme $\hat{\epsilon} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$. Do grafu postupně vykreslíme hodnoty $\hat{\epsilon}_i$ v závislosti na $\hat{\epsilon}_{i-1}$, $i = 2, \dots, n$. Bude-li z grafu zřejmá přibližná lineární závislost, svědčí to o autokorelaci 1. řádu nebo o špatné volbě modelu.

2 Test hypotézy $H_0 : \theta = 0$ proti $H_1 : \theta \neq 0$

(a) Asymptotický test: Pro dostatečně velká n ($n \geq 30$) platí

$$U_{\hat{\theta}} = \frac{\hat{\theta} - \theta}{\sqrt{\frac{1-\theta^2}{n}}} \xrightarrow{A} N(0, 1).$$

Za platnosti hypotézy má tedy statistika

$$\sqrt{n}\hat{\theta} \xrightarrow{A} N(0, 1).$$

Pak nulovou hypotézu zamítáme, pokud $|\sqrt{n}\hat{\theta}| > u_{1-\frac{\alpha}{2}}$.

Detekce autokorelace

(b) Durbin – Watsonův test: je založen na statistice

$$D = \frac{\sum_{i=2}^n (\hat{\varepsilon}_i - \hat{\varepsilon}_{i-1})^2}{\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2}$$

Pokud budou residua málo korelovaná, hodnota D se bude pohybovat kolem 2. Kladná hodnota způsobí, že $D \in (0, 2)$ a záporná korelace způsobí, že $D \in (2, 4)$. Přesné hodnoty kritických oborů pro test nalezneme v tabulkách.

Odhad parametru θ

Odhad parametru θ

- ① Odhadujeme jako regresní koeficient v modelu

$$\hat{\varepsilon}_i = \theta \hat{\varepsilon}_{i-1} + u_i, \quad i = 2, \dots, n$$

metodou nejmenších čtverců. Odtud pak

$$\hat{\theta} = \frac{\sum_{i=2}^n \hat{\varepsilon}_i \hat{\varepsilon}_{i-1}}{\sum_{i=2}^n \hat{\varepsilon}_{i-1}^2}.$$

- ② Pomocí Durbin – Watsonovy statistiky:

$$\hat{\theta} = 1 - \frac{D}{2}.$$

Odstránění autokorelace 1. řádu

Postup:

- ① Nalezneme odhad $\hat{\theta}$
- ② Vytvoříme nový model

$$Y_i^* = Y_{i+1} - \hat{\theta}Y_i; \quad X_{ij}^* = X_{i+1,j} - \hat{\theta}X_{ij}, \quad i = 1, \dots, n-1, \quad j = 1, \dots, k,$$

tj. vznikne model

$$\mathbf{Y}^* = \mathbf{X}^* \boldsymbol{\beta}^* + \boldsymbol{\varepsilon}^*, \quad E\boldsymbol{\varepsilon}^* = \mathbf{0}, \quad D\boldsymbol{\varepsilon}^* = \sigma_{\varepsilon^*}^2 \mathbf{I}_n$$

a hledáme odhady $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ standardním způsobem.

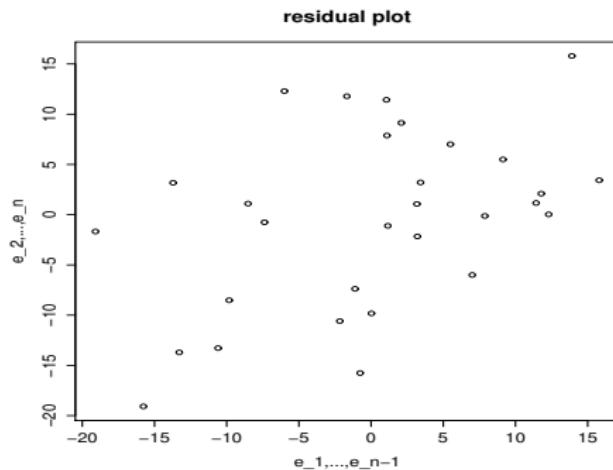
Příklad

Příklad 3

V letech 1953 – 1983 byly měřeny ztráty vody při distribuci do domácností. Výsledky měření jsou uloženy v souboru „voda.RData“. Proměnná x označuje množství vyrobené vody, proměnná Y ztrátu. Ověřte, zda se v datech vyskytuje autokorelace 1. řádu a případně ji odstraňte.

Řešení

Řešení Graficky



Z grafu je patrná lineární závislost.

Řešení

(a) Asymptotický test:

$$U_{\hat{\theta}} = |\sqrt{n}\hat{\theta}| = 2,339.$$

Nulovou hypotézu tedy **zamítáme**, neboť $|\sqrt{n}\hat{\theta}| > u_{1-\frac{\alpha}{2}} = 1,96$.

(b) Durbin – Watsonův test:

$$D = \frac{\sum_{i=2}^n (\hat{\varepsilon}_i - \hat{\varepsilon}_{i-1})^2}{\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2} = 1,082$$

a p -hodnota testu je 0,0016, takže také **zamítáme** nulovou hypotézu.

Řešení

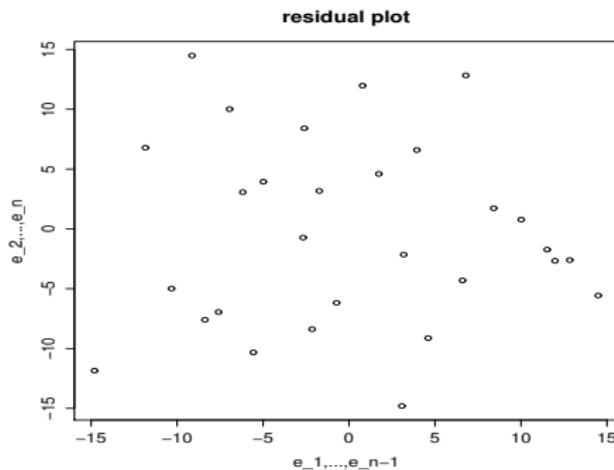
Odstranění autokorelace:

Odhady $\hat{\theta}$ jsou velmi podobné.

Metodou nejmenších čtverců: $\hat{\theta} = 0,42$

Z D-W statistiky: $\hat{\theta} = 0,459$

V nově vzniklému modelu vykreslíme residua:



Také D-W test již **nezamítá** nulovou hypotézu (p -hodnota = 0,4).

Úlohy k procvičení

Příklad 1.1

V souboru „studenti.RData“ jsou uloženy údaje o 96 studentech VŠE v Praze. Hodnoty v prvním sloupci značí hmotnost studentů v kg (proměnná Y), ve druhém sloupci je výška studentů v cm (proměnná X_1) a ve třetím sloupci je indikátor pohlaví studenta (proměnná X_2 , 0 – žena, 1 – muž). Předpokládejte regresní model

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2.$$

Odhadněte parametry modelu a ověřte normalitu residuí. Dále pak testujte přítomnost autokorelace 1. řádu, případně ji odstraňte.

Úlohy k procvičení

Příklad 1.2

V proměnné „LakeHuron“^a jsou uloženy roční údaje o hloubce jezera Huron (ve stopách) v letech 1875 – 1972. Nalezněte vhodný regresní model a ověřte, zda se v datech vyskytuje autokorelace 1. řádu. Případně se ji pokuste odstranit. Zkoumejte také normalitu residuů.

^adatový soubor implementovaný v jazyce R