# Laborator 5

# Elemente de regresie liniară simplă

Obiectivul acestui laborator este de a prezenta câteva exemple legate de problema de regresie liniară simplă.

# 1 Introducere

Regresia liniară simplă (sau  $modelul\ liniar\ simplu$ ) este un instrument statistic utilizat pentru a descrie relația dintre două variabile aleatoare, X (variabilă cauză, predictor sau covariabilă) și Y (variabilă răspuns sau efect) și este definit prin

$$\mathbb{E}[Y|X=x] = \beta_0 + \beta_1 x$$

sau altfel spus

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$$
.

În relațiile de mai sus,  $\beta_0$  și  $\beta_1$  sunt cunoscute ca ordonata la origine (*intercept*) și respectiv panta (*slope*) dreptei de regresie.

Ipotezele modelului sunt:

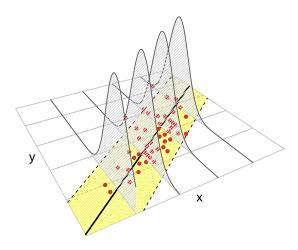
- i. Linearitatea:  $\mathbb{E}[Y|X=x] = \beta_0 + \beta_1 x$
- ii. Homoscedasticitatea:  $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$ , cu  $\sigma^2$  constantă pentru  $i = 1, \dots, n$
- iii. Normalitatea:  $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$  pentru  $i = 1, \dots, n$
- iv. Independența erorilor:  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$  sunt independente (sau necorelate,  $\mathbb{E}[\varepsilon_i \varepsilon_j] = 0$ ,  $i \neq j$ , deoarece sunt presupuse normale)

Altfel spus

$$Y|X = x \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x, \sigma^2)$$



- Nicio ipoteză nu a fost făcută asupra repartiției lui X (poate fi sau deterministă sau aleatoare)
- Modelul de regresie presupune că Y este continuă datorită normalității erorilor. În orice caz, X poate fi o variabilă discretă!



Dat fiind un eșantion  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  pentru variabilele X și Y putem estima coeficienții necunoscuți  $\beta_0$  și  $\beta_1$  minimizând suma abaterilor pătratice reziduale (Residual Sum of Squares - RSS)

$$RSS(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i)^2$$

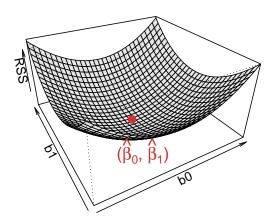
ceea ce conduce la

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}, \quad \hat{\beta}_1 = \frac{s_{xy}}{s_{xx}^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})Y_i}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$$

unde folosim notațiile

•  $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$  este media eșantionului •  $s_{xx}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2$  este varianța eșantionului •  $s_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})$  este covarianța eșantionului

Graficul functiei RSS pentru modelul y = -0.5 + 1.5x + e:



Odată ce avem estimatorii  $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ , putem defini:

• valorile prognozate (fitted values)  $\hat{Y}_1, \dots, \hat{Y}_n$  (valorile verticale pe dreapta de regresie), unde

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i, \quad i = 1, \dots, n$$

• reziduurile estimate (estimated residuals)  $\hat{\varepsilon}_1, \dots, \hat{\varepsilon}_n$  (distanțele verticale dintre punctele actuale  $(X_i, Y_i)$  și cele prognozate  $(X_i, \hat{Y}_i)$ ), unde

$$\hat{\varepsilon}_i = Y_i - \hat{Y}_i, \quad i = 1, \dots, n$$

Estimatorul pentru  $\sigma^2$  este

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{RSS(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2}{n-2}.$$

# 2 Aplicație



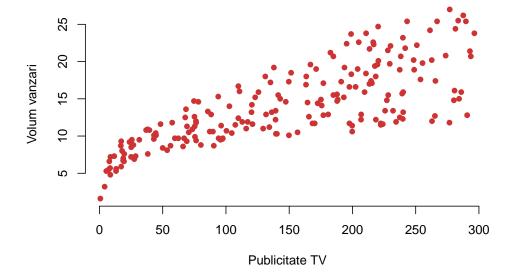
Ne propunem să investigăm relația dintre volumul vânzărilor dintr-un anumit produs (calculate în mii de unități) și bugetul (în milioane RON) alocat pentru publicitatea la televizor. Pentru aceasta vom folosi setul de date advertising care conține informații despre volumul vânzărilor și bugetul alocat publicității TV în 200 de piețe de desfacere.

Începem prin a înregistra setul de date

advertise = read.csv("dataIn/advertising.csv", row.names = 1)
summary(advertise)
 TV radio newspaper sales

```
Min. : 0.70
               Min. : 0.000
                               Min. : 0.30
                                               Min. : 1.60
1st Qu.: 74.38
               1st Qu.: 9.975
                               1st Qu.: 12.75
                                               1st Qu.:10.38
Median :149.75
               Median :22.900
                               Median : 25.75
                                               Median :12.90
Mean :147.04
               Mean
                     :23.264
                               Mean : 30.55
                                               Mean :14.02
                               3rd Qu.: 45.10
                                               3rd Qu.:17.40
3rd Qu.:218.82
                3rd Qu.:36.525
                              Max. :114.00
Max. :296.40
               Max. :49.600
                                               Max. :27.00
```

și a ilustra grafic diagrama de împrăștiere



## 2.1 Estimarea parametrilor

Considerăm modelul de regresie  $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$  (unde X = advertiseTV iar Y = advertisesales),  $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ , a cărui parametrii sunt  $\beta_0$ ,  $\beta_1$  și  $\sigma^2$ .

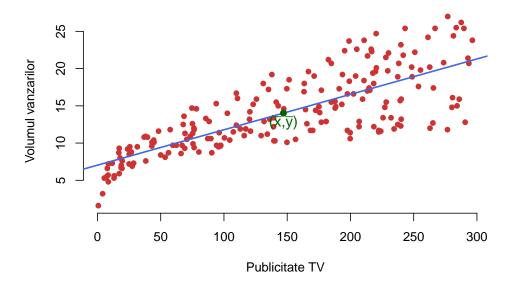
Observăm că estimatorii parametrilor  $\beta_0$  și  $\beta_1$  sunt

```
# pentru b1
b1 = cov(advertise$TV, advertise$sales)/var(advertise$TV)
cat("b1 = ", b1, "\n")
b1 = 0.04753664
# sau
sum((advertise$TV-mean(advertise$TV))*(advertise$sales))/sum((advertise$TV-mean(advertise$TV))^2)
```

```
[1] 0.04753664
# pentru b0
b0 = mean(advertise$sales) - b1*mean(advertise$TV)
cat("b0 = ", b0)
b0 = 7.032594
sau folosind funcția lm():
advertise_TV_model = lm(sales~TV, data = advertise)
names(advertise_TV_model)
[1] "coefficients" "residuals"
                                                     "rank"
                                     "effects"
 [5] "fitted.values" "assign"
                                     "gr"
                                                     "df.residual"
[9] "xlevels" "call"
                                                     "model"
                                     "terms"
advertise_TV_model$coefficients
(Intercept)
7.03259355 0.04753664
```

Dreapta de regresie este:





De asemenea pentru calculul estimatorului lui  $\sigma$   $(\hat{\sigma})$  avem

```
n = length(advertise$sales)
e_hat = advertise$sales - (b0+b1*advertise$TV)

rss = sum(e_hat^2)

sigma_hat = sqrt(rss/(n-2))
sigma_hat
[1] 3.258656
```

sau cu ajutorul funcției lm()

```
sqrt(deviance(advertise_TV_model)/df.residual(advertise_TV_model))
[1] 3.258656
```

sau încă

```
advertise_TV_model_summary = summary(advertise_TV_model)
advertise_TV_model_summary$sigma
[1] 3.258656
```

# 2.2 Intervale de încredere pentru parametrii

Repartițiile lui  $\hat{\beta}_0$  și  $\hat{\beta}_1$  sunt

$$\hat{\beta}_0 \sim \mathcal{N}\left(\beta_0, \operatorname{SE}(\hat{\beta}_0)^2\right), \quad \hat{\beta}_1 \sim \mathcal{N}\left(\beta_1, \operatorname{SE}(\hat{\beta}_1)^2\right)$$

unde

$$SE(\hat{\beta}_0)^2 = \frac{\sigma^2}{n} \left[ 1 + \frac{\bar{X}^2}{s_{xx}^2} \right], \quad SE(\hat{\beta}_1)^2 = \frac{\sigma^2}{ns_{xx}^2}.$$

Folosind estimatorul  $\hat{\sigma}^2$  pentru  $\sigma^2$  obținem că

$$\frac{\hat{\beta}_0 - \beta_0}{\hat{SE}(\hat{\beta}_0)} \sim t_{n-2}, \quad \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\hat{SE}(\hat{\beta}_1)} \sim t_{n-2}$$

unde

$$\hat{SE}(\hat{\beta}_0)^2 = \frac{\hat{\sigma}^2}{n} \left[ 1 + \frac{\bar{X}^2}{s_{xx}^2} \right], \quad \hat{SE}(\hat{\beta}_1)^2 = \frac{\hat{\sigma}^2}{ns_{xx}^2}$$

prin urmare, intervalele de încredere de nivel  $1-\alpha$  pentru  $\beta_0$  și  $\beta_1$  sunt

$$IC = (\hat{\beta}_j \pm \hat{SE}(\hat{\beta}_j)t_{n-2;1-\alpha/2}), \quad j = 0, 1.$$

În R avem

```
alpha = 0.05

# trebuie avut grija ca functia var si sd se calculeaza
# impartind la (n-1) si nu la n !!!

se_b0 = sqrt(sigma_hat^2*(1/n+mean(advertise$TV)^2/((n-1)*var(advertise$TV))))

se_b1 = sqrt(sigma_hat^2/((n-1)*var(advertise$TV)))

lw_b0 = b0 - qt(1-alpha/2, n-2)*se_b0

up_b0 = b0 + qt(1-alpha/2, n-2)*se_b0

cat("CI pentru b0 este (", lw_b0, ", ", up_b0, ")\n")

CI pentru b0 este (6.129719 , 7.935468 )

lw_b1 = b1 - qt(1-alpha/2, n-2)*se_b1

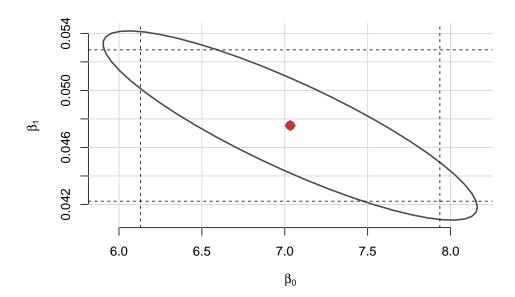
up_b1 = b1 + qt(1-alpha/2, n-2)*se_b1

cat("CI pentru b1 este (", lw_b1, ", ", up_b1, ")")

CI pentru b1 este (0.04223072 , 0.05284256 )
```

Același rezultat se obține apelând funcția confint():

Putem construi și o regiune de încredere pentru perechea  $(\beta_0, \beta_1)$ :



## 2.3 ANOVA pentru regresie

Este predictorul X folositor în prezicerea răspunsului Y? Vrem să testăm ipoteza nulă  $H_0$ :  $\beta_1 = 0$ . Introducem următoarele sume de abateri pătratice:

- $SS_T = \sum_{i=1}^n \left(Y_i \bar{Y}\right)^2$ , suma abaterilor pătratice totală (variația totală a lui  $Y_1, \dots, Y_n$ ).
- $SS_{reg} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i \bar{Y})^2$ , suma abaterilor pătratice de regresie (variabilitatea explicată de dreapta de regresie)
- $RSS = \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i \hat{Y}_i\right)^2$ , suma abaterilor pătratice reziduale

Avem următoarea descompunere ANOVA

$$\underbrace{SS_T}_{\text{Variația lui }Y_i} = \underbrace{SS_{reg}}_{\text{Variația lui }\hat{Y}_i} + \underbrace{RSS}_{\text{Variația lui }\hat{\varepsilon}_i}$$

și tabelul ANOVA corespunzător

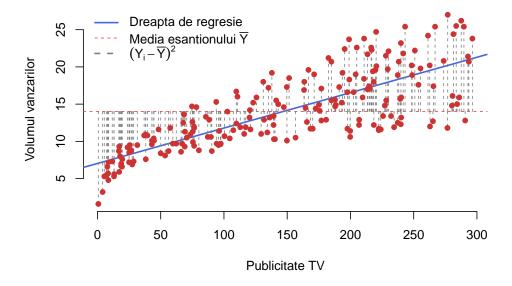
	Df	SS	MS	F	<i>p</i> -value
Predictor Residuuri	$1 \\ n-2$	$SS_{reg} \\ RSS$	$\frac{SS_{reg}}{1}$ $\frac{RSS}{n-2}$	$\frac{SS_{reg}/1}{RSS/(n-2)}$	p

Descompunerea ANOVA pentru problema noastră poate fi ilustrată astfel:

a) suma abaterilor pătratice totală:

```
plot(advertise$TV, advertise$sales, pch = 16, type = "n",
     main = paste("SST =", round(sum((advertise$sales - mean(advertise$sales))^2), 2)),
     col.main = "brown4",
     xlab = "Publicitate TV",
     ylab = "Volumul vanzarilor",
     bty = "n")
abline(advertise_TV_model$coefficients, col = "royalblue", lwd = 2)
abline(h = mean(advertise$sales), col = "brown2", lty = 2)
segments(x0 = advertise$TV, y0 = mean(advertise$sales),
         x1 = advertise$TV, y1 = advertise$sales,
         col = "grey50", lwd = 1, lty = 2)
legend("topleft",
      legend = expression("Dreapta de regresie", "Media esantionului " * bar(Y),
                                      (Y[i] - bar(Y))^2,
      1wd = c(2, 1, 2),
       col = c("royalblue", "brown2", "grey50"),
      1ty = c(1, 2, 2),
      bty = "n")
points(advertise$TV, advertise$sales, pch = 16, col = "brown3")
```

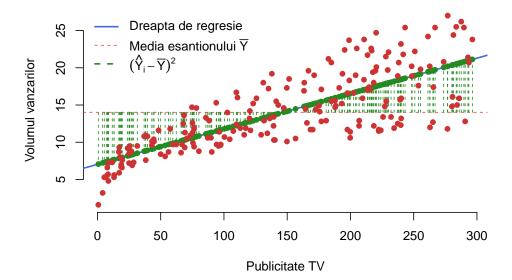
### SST = 5417.15



b) suma abaterilor pătratice de regresie

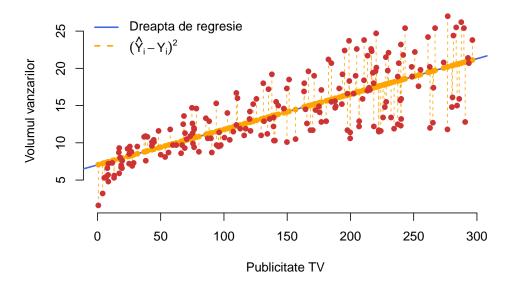
```
col.main = "forestgreen",
     xlab = "Publicitate TV",
     ylab = "Volumul vanzarilor",
     bty = "n")
abline(advertise_TV_model$coefficients, col = "royalblue", lwd = 2)
abline(h = mean(advertise$sales), col = "brown2", lty = 2)
segments(x0 = advertise$TV, y0 = mean(advertise$sales),
         x1 = advertise$TV, y1 = advertise_TV_model$fitted.values,
         col = "forestgreen", lwd = 1, lty = 2)
points(advertise$TV, advertise_TV_model$fitted.values, pch = 16, col = "forestgreen")
legend("topleft",
      legend = expression("Dreapta de regresie", "Media esantionului " * bar(Y),
                                      (hat(Y)[i] - bar(Y))^2),
      lwd = c(2, 1, 2),
       col = c("royalblue", "brown2", "forestgreen"),
       lty = c(1, 2, 2),
      bty = "n")
points(advertise$TV, advertise$sales, pch = 16, col = "brown3")
```

# SSreg = 3314.62



c) suma abaterilor pătratice reziduale

### RSS = 2102.53



#### Tabelul ANOVA se obține prin

```
# tabel ANOVA
anova(advertise_TV_model)
Analysis of Variance Table

Response: sales

Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)

TV 1 3314.6 3314.6 312.14 < 2.2e-16 ***

Residuals 198 2102.5 10.6

---

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Definiția  $coeficientului\ de\ determinare\ R^2$  este strâns legată de descompunerea ANOVA:

$$R^2 = \frac{SS_{reg}}{SS_T} = \frac{SS_T - RSS}{SS_T} = 1 - \frac{RSS}{SS_T}$$

 $R^2$  măsoară **proporția din variația** variabilei răspuns Y **explicată** de variabila predictor X prin regresie. Proporția din variația totală a lui Y care nu este explicată este  $1 - R^2 = \frac{RSS}{SS_T}$ . Intuitiv,  $R^2$  măsoară cât de bine modelul de regresie este în concordanță cu datele (cât de strâns este norul de puncte în jurul dreptei de regresie). Observăm că dacă datele concordă perfect cu modelul (adică RSS = 0) atunci  $R^2 = 1$ .

Putem vedea că  $R^2 = r_{xy}^2$ , unde  $r_{xy}$  este coeficientul de corelație empiric:

$$r_{xy} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X}) (Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2}}$$

Mai mult se poate verifica și că  $R^2 = r_{y\hat{y}}^2$ , adică coeficientul de determinare este egal cu pătratul coeficientului de corelație empirică dintre  $Y_1, \ldots, Y_n$  și  $\hat{Y}_1, \ldots, \hat{Y}_n$ .

Verificăm relația  $R^2 = r_{xy}^2 = r_{y\hat{y}}^2$  numeric:

```
yHat = advertise_TV_model$fitted.values

advertise_TV_model_summary$r.squared # R^2
[1] 0.6118751

cor(advertise$TV, advertise$sales)^2 # corelatia^2 dintre x si y
[1] 0.6118751

cor(advertise$sales, yHat)^2 # corelatia^2 dintre y si yHat
[1] 0.6118751
```

# 2.4 Inferență asupra parametrilor

Este predictorul X folositor în prezicerea răspunsului Y? Vrem să testăm ipoteza nulă  $H_0$ :  $\beta_j = 0$  (pentru j = 1 spunem că predictorul nivel de sare nu are un efect liniar semnificativ asupra tensiunii arteriale). Pentru aceasta vom folosi statistica de test

$$t_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\hat{SE}(\hat{\beta}_j)} \sim_{H_0} t_{n-2}.$$

Funcția summary ne întoarce p-valoarea corespunzătoare a acestor teste:

```
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 3.259 on 198 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.6119, Adjusted R-squared: 0.6099

F-statistic: 312.1 on 1 and 198 DF, p-value: < 2.2e-16
```

Observăm că ambele ipoteze sunt respinse în favoarea alternativelor bilaterale (la aceeași concluzie am ajuns și utitându-ne la intervalele de încredere - nu conțineau valoarea 0). Putem observa că  $t_1^2$  este exact valoarea F statisticii, deci cele două abordări ne dau aceleași rezultate numerice.

#### 2.4.1 Predictie

Pentru un nou set de predictori,  $x_0$ , răspunsul prognozat este  $\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$  și vrem să investigăm incertitudinea din această predicție. Putem face distincția între două tipuri de predicție: predicție asupra răspunsului viitor mediu (inferență asupra mediei condiționate  $\mathbb{E}[Y|X=x_0]$ ) sau predicție asupra observațiilor viitoare (inferență asupra răspunsului condiționat  $Y|X=x_0$ ).

Un interval de încredere pentru răspunsul viitor mediu este:

$$\left(\hat{y} \pm t_{n-2;1-\alpha/2} \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{n} \left(1 + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{s_x^2}\right)}\right)$$

Un interval de încredere pentru valoarea prezisă (interval de predicție) este:

$$\left(\hat{y} \pm t_{n-2;1-\alpha/2} \sqrt{\hat{\sigma}^2 + \frac{\hat{\sigma}^2}{n} \left(1 + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{s_x^2}\right)}\right)$$

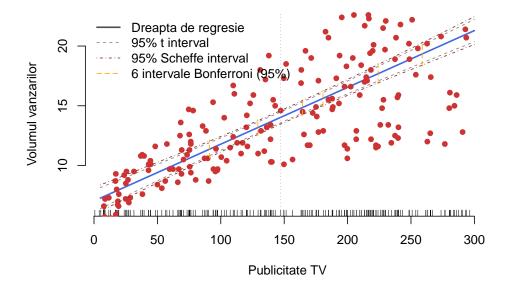
Pentru a găsi aceste intervale vom folosi funcția predict():

```
newData = data.frame(TV = 150)
newData2 = data.frame(TV = c(130, 140, 150))
# Predictie
predict(advertise_TV_model, newdata = newData)
14.16309
# Predictie pentru valoarea raspunsului mediu
predict(advertise_TV_model, newdata = newData, interval = "confidence")
               lwr
      fit
1 14.16309 13.70842 14.61776
predict(advertise_TV_model, newdata = newData2, interval = "confidence")
       fit
               lwr
1 13.21236 12.74905 13.67566
2 13.68772 13.23179 14.14365
3 14.16309 13.70842 14.61776
# Predictie asupra observatiilor viitoare
predict(advertise_TV_model, newdata = newData, interval = "prediction")
      fit
              lwr
1 14.16309 7.720898 20.60528
predict(advertise_TV_model, newdata = newData2, interval = "prediction")
```

```
fit lwr upr
1 13.21236 6.769550 19.65516
2 13.68772 7.245442 20.13000
3 14.16309 7.720898 20.60528
```

Volumul de vânzări prezis impreună cu intervalul de încredere de nivel 95% pentru răspunsul mediu este ilustrat în figura următoare

```
g = seq(5,300,0.5)
p = predict(advertise_TV_model, data.frame(TV = g), se = T, interval = "confidence")
matplot(g, p\$fit, type = "l", lty = c(1,2,2),
       lwd = c(2,1,1),
        col = c("royalblue", "grey50", "grey50"),
        xlab = "Publicitate TV",
        ylab = "Volumul vanzarilor",
       bty = "n")
rug(advertise$TV)
points(advertise$TV, advertise$sales, col = "brown3", pch = 16)
abline(v = mean(advertise$TV), lty = 3, col = "grey65")
# Scheffe's bounds
M = sqrt(2*qf(1-alpha, 2, n-2))
s_x = (n-1)*var(advertise$TV)
lw_scheffe = b0 + b1*g - M*sigma_hat*sqrt(1/n+(g-mean(advertise$TV))^2/s_xx)
up_scheffe = b0 + b1*g + M*sigma_hat*sqrt(1/n+(g-mean(advertise$TV))^2/s_xx)
lines(g, lw_scheffe, lty = 4, col = "brown4")
lines(g, up_scheffe, lty = 4, col = "brown4")
# Bonferroni bounds
x0 = runif(6, min = 10, max = 290)
m = length(x0)
t_{bonf} = qt(1-alpha/(2*m), n-2)
lw bonf = b0 + b1*x0 - t bonf*sigma hat*sqrt(\frac{1}{n}+(x0-mean(advertise$TV))^2/s xx)
up_bonf = b0 + b1*x0 + t_bonf*sigma_hat*sqrt(1/n+(x0-mean(advertise$TV))^2/s_xx)
segments(x0 = x0, y0 = lw_bonf, x1 = x0, y1 = up_bonf, col = "orange", lty = 5)
segments(x0 = x0-0.25, y0 = lw_bonf, x1 = x0+0.25, y1 = lw_bonf,
         col = "orange", lty = 1)
segments(x0 = x0-0.25, y0 = up_bonf, x1 = x0+0.25, y1 = up_bonf,
         col = "orange", lty = 1)
legend("topleft", legend = c("Dreapta de regresie", "95% t interval",
                                      "95% Scheffe interval",
                             pasteO(m, " intervale Bonferroni (95%)")),
       lwd = c(2, 1, 1, 1),
       col = c("grey30", "grey50", "brown4", "orange"),
       lty = c(1, 2, 4, 5),
       bty = "n")
```



## 2.5 Diagnostic

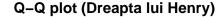
În această secțiune vom vedea dacă setul nostru de date verifică ipotezele modelului de regresie liniară.

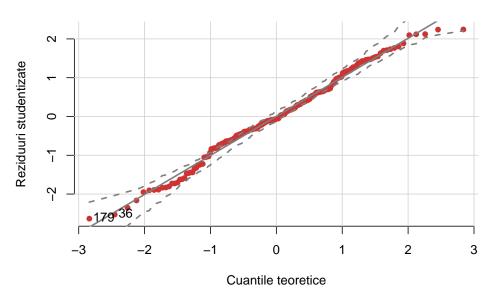
#### a) Independenta

Ipoteza de independență a variabilei răspuns (prin urmare și a erorilor) reiese, de cele mai multe ori, din modalitatea în care s-a desfășurat experimentul.

## b) Normalitatea

Pentru a verifica dacă ipoteza de normalitate a erorilor este satisfăcută vom trasa dreapta lui Henry (sau Q-Q plot-ul):





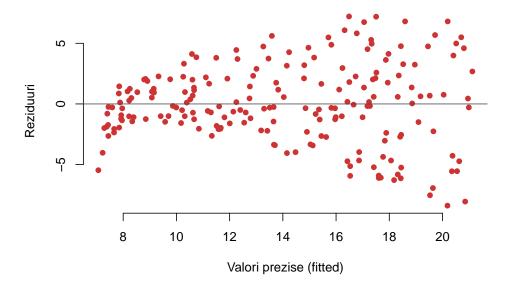
#### [1] 36 179

Putem folosi și testul Shapiro-Wilk:

### c) Homoscedasticitatea

Pentru a verifica proprietatea de homoscedasticitate a erorilor vom trasa un grafic al reziduurilor versus valorile prezise (fitted), i.e.  $\hat{\varepsilon}$  vs  $\hat{y}$ . Dacă avem homoscedasticitate a erorilor atunci ar trebui să vedem o variație constantă pe verticală  $(\hat{\varepsilon})$ .

# Reziduuri vs Valori prezise



Tot în acest grafic putem observa dacă ipoteza de liniaritate este verificată (în caz de liniaritate între variabila răspuns și variabila explicativă nu are trebui să vedem o relație sistematică între reziduuri și valorile prezise - ceea ce se și întâmplă în cazul nostru) ori dacă există o altă legătură structurală între variabila dependentă (răspuns) și cea independentă (predictor).