Laborator 6

Regresie liniară simplă și multiplă

Obiectivul acestui laborator este de a prezenta câteva noțiuni legate de problema de regresie.

1 Regresie liniară simplă

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, β_0 și β_1 sunt cunoscute ca ordonata la origine (*intercept*) și respectiv panta (*slope*) dreptei de regresie.

Ipotezele modelului sunt:

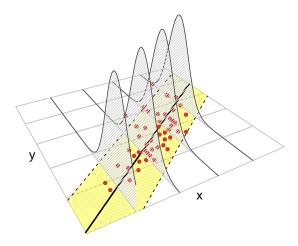
- i. Linearitatea: $\mathbb{E}[Y|X=x] = \beta_0 + \beta_1 x$
- ii. Homoscedasticitatea: $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$, cu σ^2 constantă pentru $i = 1, \dots, n$
- iii. Normalitatea: $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ pentru $i = 1, \dots, n$
- iv. Independența erorilor: $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ 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 β_0 și β_1 minimizând suma abaterilor pătratice reziduale (Residual Sum of Squares - RSS)

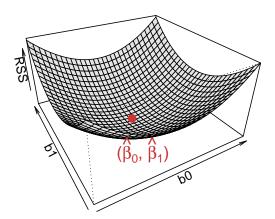
$$RSS(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i)^2$$

ceea ce conduce la

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

• $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$ este media eșantionului • $s_x^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2$ 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 σ^2 este

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

1.1 Aplicație



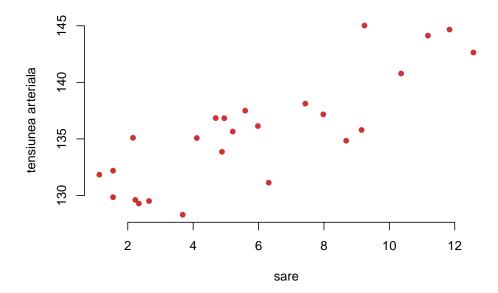
Ne propunem să investigăm relația dintre consumul de clorură de sodiu (sarea de bucătărie) și tensiunea arterială la persoanele trecute de 65 de ani. Pentru aceasta vom folosi setul de date saltBP care conține informații despre tensiunea arterială a 25 de pacienți.

Începem prin a înregistra setul de date

```
Median: 135.7 Median: 5.210 Median: 0.0
Mean: 135.7 Mean: 5.898 Mean: 0.4
3rd Qu.: 137.5 3rd Qu.: 8.680 3rd Qu.: 1.0
Max.: 145.0 Max.: 12.570 Max.: 1.0
```

și a ilustra grafic diagrama de împrăștiere

```
plot(saltBP$salt, saltBP$BP,
    xlab = "sare",
    ylab = "tensiunea arteriala",
    col = "brown3",
    pch = 16,
    bty="n")
```



1.1.1 Estimarea parametrilor

Considerăm modelul de regresie $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$ (unde X = saltBP\$salt iar Y = saltBP\$BP), $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, a cărui parametrii sunt β_0 , β_1 și σ^2 .

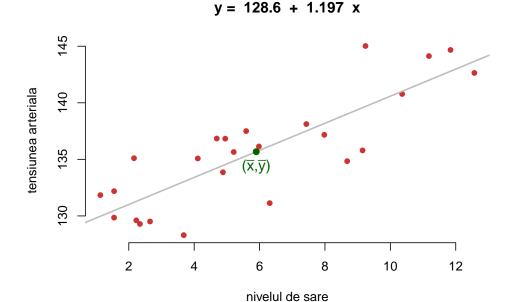
Observăm că estimatorii parametrilor β_0 și β_1 sunt

```
# pentru b1
b1 = cov(saltBP$salt, saltBP$BP)/var(saltBP$salt)
cat("b1 = ", b1, "\n")
b1 = 1.196894

# sau
sum((saltBP$salt-mean(saltBP$salt))*(saltBP$BP))/sum((saltBP$salt-mean(saltBP$salt))^2)
[1] 1.196894
```

```
# pentru b0
b0 = mean(saltBP$BP) - b1*mean(saltBP$salt)
cat("b0 = ", b0)
b0 = 128.6164
sau folosind functia lm():
saltBP_model = lm(BP~salt, data = saltBP)
names(saltBP_model)
 [1] "coefficients"
                     "residuals"
                                      "effects"
                                                       "rank"
 [5] "fitted.values" "assign"
                                      "qr"
                                                       "df.residual"
[9] "xlevels"
                      "call"
                                       "terms"
                                                       "model"
saltBP_model$coefficients
                   salt
(Intercept)
128.616397
              1.196894
```

Dreapta de regresie este:



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

```
n = length(saltBP$BP)
e_hat = saltBP$BP - (b0+b1*saltBP$salt)

rss = sum(e_hat^2)

sigma_hat = sqrt(rss/(n-2))
sigma_hat
[1] 2.745374
```

sau cu ajutorul funcției lm()

```
sqrt(deviance(saltBP_model)/df.residual(saltBP_model))
[1] 2.745374
```

sau încă

```
saltBP_model_summary = summary(saltBP_model)
saltBP_model_summary$sigma
[1] 2.745374
```

1.1.2 Intervale de încredere pentru parametrii

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

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

unde

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

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

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

unde

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

prin urmare, intervalele de încredere de nivel $1-\alpha$ pentru β_0 și β_1 sunt

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

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(saltBP$salt)^2/((n-1)*var(saltBP$salt))))
se_b1 = sqrt(sigma_hat^2/((n-1)*var(saltBP$salt)))

lw_b0 = b0 - qt(1-alpha/2, n-2)*se_b0
up_b0 = b0 + qt(1-alpha/2, n-2)*se_b0

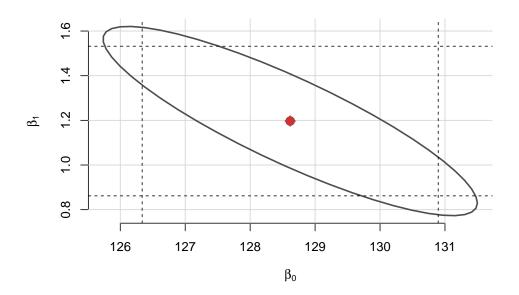
cat("CI pentru b0 este (", lw_b0, ", ", up_b0, ")\n")
CI pentru b0 este ( 126.337 , 130.8958 )

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 ( 0.8617951 , 1.531993 )
```

Același rezultat se obține apelând funcția confint():

Putem construi și o regiune de încredere pentru perechea (β_0, β_1) :



1.1.3 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).
- $SS_{reg} = \sum_{i=1}^{n} \left(\hat{Y}_i \bar{Y}\right)^2$, 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	$\frac{SS_{reg}}{1\atop RSS\atop n-2}$	$\frac{SS_{reg}/1}{RSS/(n-2)}$	p

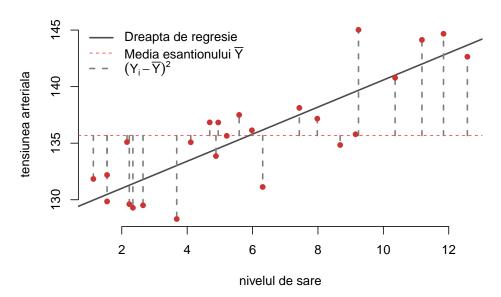
Descompunerea ANOVA pentru problema noastră poate fi ilustrată astfel:

a) suma abaterilor pătratice totală:

```
plot(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, type = "n",
    main = paste("SST =", round(sum((saltBP$BP - mean(saltBP$BP))^2), 2)),
    col.main = "brown4",
```

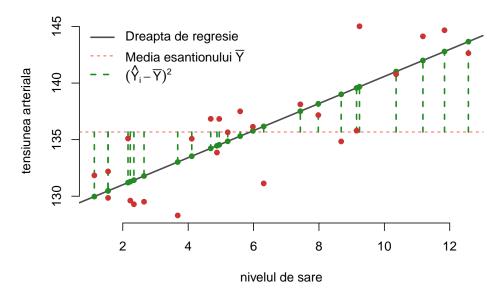
```
xlab = "nivelul de sare",
     ylab = "tensiunea arteriala",
     bty = "n")
abline(saltBP_model$coefficients, col = "grey30", lwd = 2)
abline(h = mean(saltBP$BP), col = "brown2", lty = 2)
segments(x0 = saltBP$salt, y0 = mean(saltBP$BP),
         x1 = saltBP$salt, y1 = saltBP$BP,
         col = "grey50", lwd = 2, lty = 2)
legend("topleft",
       legend = expression("Dreapta de regresie", "Media esantionului " * bar(Y),
                                      (Y[i] - bar(Y))^2),
       lwd = c(2, 1, 2),
       col = c("grey30", "brown2", "grey50"),
       lty = c(1, 2, 2),
       bty = "n")
points(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, col = "brown3")
```

SST = 584.83



b) suma abaterilor pătratice de regresie

SSreg = 411.48



c) suma abaterilor pătratice reziduale

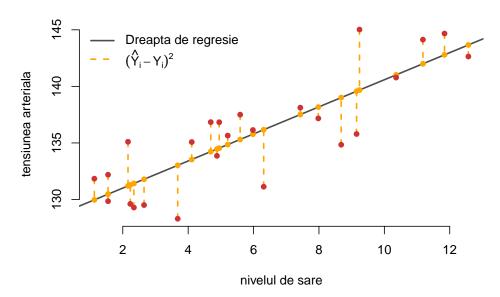
```
col = "orange", lwd = 2, lty = 2)

points(saltBP$salt, saltBP_model$fitted.values, pch = 16, col = "orange")

legend("topleft",
    legend = expression("Dreapta de regresie", (hat(Y)[i] - Y[i])^2),
    lwd = c(2, 2),
    col = c("grey30", "orange"),
    lty = c(1, 2),
    bty = "n")

points(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, col = "brown3")
```

RSS = 173.35



Tabelul ANOVA se obține prin

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 = saltBP_model$fitted.values

saltBP_model_summary$r.squared # R^2

[1] 0.7035842

cor(saltBP$salt, saltBP$BP)^2 # corelatia^2 dintre x si y

[1] 0.7035842

cor(saltBP$BP, yHat)^2 # corelatia^2 dintre y si yHat

[1] 0.7035842
```

1.1.4 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

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

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

```
summary(saltBP model)
lm(formula = BP ~ salt, data = saltBP)
Residuals:
            1Q Median
   \mathtt{Min}
                            3Q
                                   Max
-5.0388 -1.6755 0.3662 1.8824 5.3443
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 128.616 1.102 116.723 < 2e-16 ***
              1.197
                       0.162 7.389 1.63e-07 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 2.745 on 23 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7036,
                              Adjusted R-squared: 0.6907
F-statistic: 54.59 on 1 and 23 DF, p-value: 1.631e-07
```

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.

1.1.5 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:

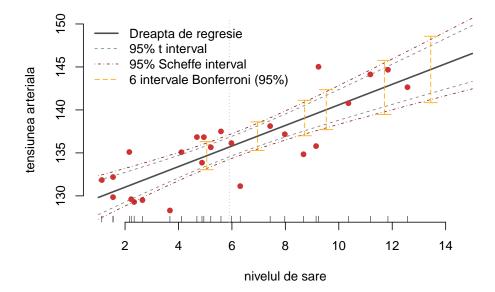
$$\left(\hat{y} \pm t_{n-2;1-\alpha/2} \sqrt{\hat{\sigma}^2 + \frac{\hat{\sigma}^2}{n} \left(1 + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{s_x^2}\right)}\right)$$

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

```
newData = data.frame(salt = 14)
newData2 = data.frame(salt = c(13, 14, 15))
# Predictie
predict(saltBP_model, newdata = newData)
145.3729
# Predictie pentru valoarea raspunsului mediu
predict(saltBP_model, newdata = newData, interval = "confidence")
                lwr
       fit
                        upr
1 145.3729 142.4298 148.316
predict(saltBP_model, newdata = newData2, interval = "confidence")
1 144.1760 141.5389 146.8132
2 145.3729 142.4298 148.3160
3 146.5698 143.3150 149.8246
# Predictie asupra observatiilor viitoare
predict(saltBP_model, newdata = newData, interval = "prediction")
       fit
                lwr
1 145.3729 138.9764 151.7695
predict(saltBP_model, newdata = newData2, interval = "prediction")
       fit
                lwr
                         upr
1 144.1760 137.9144 150.4377
2 145.3729 138.9764 151.7695
3 146.5698 140.0240 153.1156
```

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

```
g = seq(1,15,0.5)
p = predict(saltBP_model, data.frame(salt = g), se = T, interval = "confidence")
matplot(g, p\$fit, type = "l", lty = c(1,2,2),
        lwd = c(2,1,1),
        col = c("grey30", "grey50", "grey50"),
        xlab = "nivelul de sare",
        ylab = "tensiunea arteriala",
        bty = "n")
rug(saltBP$salt)
points(saltBP$salt, saltBP$BP, col = "brown3", pch = 16)
abline(v = mean(saltBP$salt), lty = 3, col = "grey65")
# Scheffe's bounds
M = sqrt(2*qf(1-alpha, 2, n-2))
s_x = (n-1)*var(saltBP$salt)
lw_scheffe = b0 + b1*g - M*sigma_hat*sqrt(1/n+(g-mean(saltBP$salt))^2/s_xx)
up_scheffe = b0 + b1*g + M*sigma_hat*sqrt(1/n+(g-mean(saltBP$salt))^2/s_xx)
lines(g, lw_scheffe, lty = 4, col = "brown4")
lines(g, up_scheffe, lty = 4, col = "brown4")
# Bonferroni bounds
# x0 = c(7, 8, 13, 14)
x0 = 1 + 14*runif(6)
m = length(x0)
t_bonf = qt(1-alpha/(2*m), n-2)
lw_bonf = b0 + b1*x0 - t_bonf*sigma_hat*sqrt(1/n+(x0-mean(saltBP$salt))^2/s_xx)
up_bonf = b0 + b1*x0 + t_bonf*sigma_hat*sqrt(1/n+(x0-mean(saltBP$salt))^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",
                             paste0(m, " intervale Bonferroni (95%)")),
       lwd = c(2, 1, 1, 1),
       col = c("grey30", "grey50", "brown4", "orange"),
       lty = c(1, 2, 4, 5),
       bty = "n")
```



1.1.6 Diagnostic

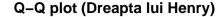
În această secțiune vom vedea dacă setul nostru de date verifică ipotezele modelului de regresie liniară.

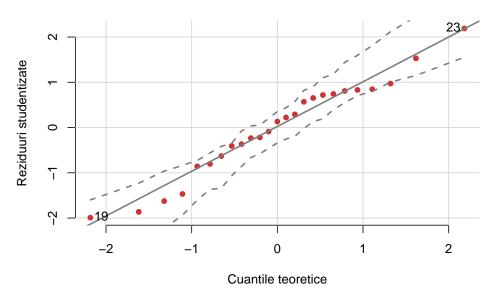
a) Independența

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] 19 23

Putem folosi și testul Shapiro-Wilk:

```
shapiro.test(residuals(saltBP_model))

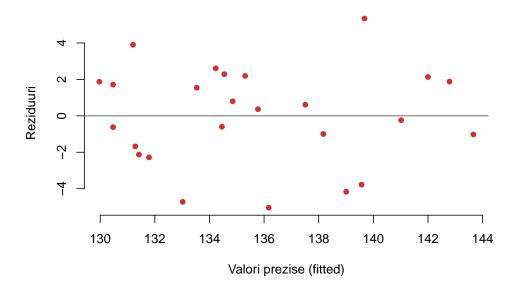
Shapiro-Wilk normality test

data: residuals(saltBP_model)
W = 0.96871, p-value = 0.6125
```

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 cauză 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).

2 Regresie liniară multiplă

Modelul de regresie liniară multiplă reprezintă o generalizare a modelului de regresie simplă. Dacă în regresia liniară simplă se folosea o singură variabilă predictor X ca să explice variabila răspuns Y, în modelul de regresie liniară multiplă se folosesc mai multe variabile predictor X_1, \ldots, X_k pentru a explica răspunsul Y:

$$\mathbb{E}[Y|X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k$$

sau altfel scris

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \ldots + \beta_k X_k + \varepsilon.$$

Date fiind observațiile actuale, cu alte cuvinte dat fiind un eșantion $(X_{11}, \ldots, X_{1k}, Y_1), \ldots, (X_{n1}, \ldots, X_{nk}, Y_n)$ al lui (X_1, \ldots, X_k, Y) , unde X_{ij} reprezintă a i-a observație a predictorului X_j , modelul se poate scrie

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n$$

a cărui formă compactă (matriceală) este

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

• X este matricea de design

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & \cdots & X_{1k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & \cdots & X_{nk} \end{pmatrix}_{n \times (k+1)}$$

• Y este vectorul răspuns, β este vectorul coeficienților iar ε este vectorul eroare

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}_{n \times 1}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}_{(k+1) \times 1}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}_{n \times 1}.$$



Să observăm că pentru k=1 modelul se reduce la regresia liniară simplă. În acest caz:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_{n1} \end{pmatrix}_{n \times 2} \quad \text{si} \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}_{2 \times 1}$$

Suma abaterilor pătratice reziduale pentru modelul de regresie liniară multiplă este

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_{i1} - \dots - \beta_k X_{ik})^2 = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

ceea ce conduce la sistemul de ecuatii normale

$$\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{Y}$$

a cărui soluție, dat fiind că $\mathbf{X}^\intercal\mathbf{X}$ este inversabilă, este

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y}$$

Odată ce avem estimatorul $\hat{\beta}$, putem defini:

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

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_{i1} + \dots + \hat{\beta}_k X_{ik}, \quad i = 1, \dots, n$$

și sub formă matriceală

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y} = \mathbf{H}\mathbf{Y}$$

unde $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}$ se numește *matricea căciulă* (*hat matrix*) și reprezintă proiecția ortogonală a lui \mathbf{Y} în spațiul generat de \mathbf{X} .

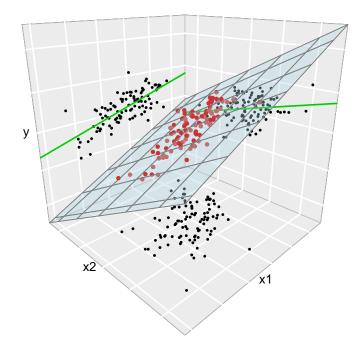
• reziduurile estimate (estimated residuals) $\hat{\varepsilon}_1, \ldots, \hat{\varepsilon}_n$, unde

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

și sub formă matriceală

$$\hat{oldsymbol{arepsilon}} = oldsymbol{Y} - \hat{oldsymbol{Y}} = (oldsymbol{I} - oldsymbol{H})oldsymbol{Y}$$

În figura de mai jos ilustrăm planul de regresie (albastru) și relația cu regresiile liniare simple (liniile verzi). Punctele roșii reprezintă un eșantion pentru (X_1, X_2, Y) iar punctele negre sunt subeșantioane pentru (X_1, X_2) (la bază), (X_1, Y) (stânga) și (X_2, Y) (dreapta).



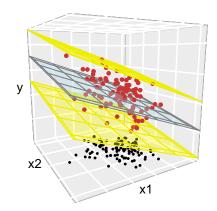
Ipotezele modelului sunt:

- i. Linearitatea: $\mathbb{E}[Y|X_1 = x_1, ..., X_k = x_k] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + ... + \beta_k x_k$
- ii. Homoscedasticitatea: $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$, cu σ^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

$$Y|(X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k) \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k, \sigma^2)$$

În figura de mai jos afișam planul de regresie. Spațiul dintre cele două plane galbene arată unde se află 95% din observații (după modelul ales).



Estimatorul pentru σ^2 este

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

2.1 Aplicație

Această aplicație este bazată pe articolul [Johnson and Raven, 1973].



Considerăm setul de date galapagos care conține informații despre numărul de specii de broaște țestoase din diferite insule din arhipelagul Galapagos. Setul conține date din 30 de insule despre numărul de specii de țestoase (Species), numărul de specii endemice (Endemics), suprafața insulei (Area), înălțimea maximă a insulei ('Elevation), distanța la cea mai apropiată insulă (Nearest), distanța față de insula Snata Cruz (Scruz) și suprafața insulei adiacente (Adjacent). Vrem să investigăm relația liniară dintre numărul de specii și celelalte variabile.

Începem prin a citi datele

```
# gala = read.csv("data/galapagos.csv", row.names = 1)
data("gala") # este nevoie de libraria faraway
head(gala)
             Species Endemics Area Elevation Nearest Scruz Adjacent
Baltra
                  58
                            23 25.09
                                           346
                                                    0.6
                                                          0.6
                                                                  1.84
Bartolome
                  31
                            21 1.24
                                           109
                                                    0.6
                                                         26.3
                                                                572.33
                   3
                                           114
                                                        58.7
Caldwell
                             3
                               0.21
                                                    2.8
                                                                  0.78
Champion
                  25
                             9
                               0.10
                                            46
                                                    1.9
                                                         47.4
                                                                  0.18
                   2
                                            77
Coamano
                                0.05
                                                          1.9
                                                                903.82
                             1
                                                    1.9
Daphne.Major
                  18
                            11 0.34
                                           119
                                                    8.0
                                                          8.0
                                                                  1.84
```

Considerăm modelul de regresie liniară multiplă cu 5 predictori:

```
gala_model = lm(Species ~ Area + Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent, data=gala)
gala_model_summary = summary(gala_model)
gala_model_summary
Call:
lm(formula = Species ~ Area + Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent,
   data = gala)
Residuals:
    Min
                            3Q
           1Q
                 Median
                                   Max
-111.679 -34.898 -7.862 33.460 182.584
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 7.068221 19.154198 0.369 0.715351
         Area
Elevation 0.319465 0.053663 5.953 3.82e-06 ***
         0.009144 1.054136 0.009 0.993151
Nearest
          Scruz
Adjacent -0.074805 0.017700 -4.226 0.000297 ***
Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' 1
Residual standard error: 60.98 on 24 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7658, Adjusted R-squared: 0.7171
F-statistic: 15.7 on 5 and 24 DF, p-value: 6.838e-07
```

2.1.1 Estimarea parametrilor

Pentru început extragem matricea de design X

```
X = model.matrix( ~ Area + Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent,
   data = gala)
head(X)
            (Intercept) Area Elevation Nearest Scruz Adjacent
Baltra
                                346 0.6 0.6
                     1 25.09
                                                     1.84
Bartolome
                     1 1.24
                                 109
                                         0.6 26.3
                                                    572.33
Caldwell
                    1 0.21
                                114
                                         2.8 58.7
                                                      0.78
                                 46
Champion
                     1 0.10
                                         1.9 47.4
                                                      0.18
                                  77
Coamano
                     1 0.05
                                         1.9
                                              1.9
                                                    903.82
                     1 0.34
                                  119
                                         8.0 8.0
                                                      1.84
Daphne.Major
```

și răspunsul y

```
y = gala$Species
```

Vrem să găsim $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{Y}$

```
# determinam (\mathbf{X})^\intercal\mathbf{X})^{-1}

xtxi = solve(t(X) %*% X) # t() - este transpusa
```

```
# %*% - produsul matriceal
# solve() - calculeaza pseudoinversa

bHat = xtxi %*% t(X) %*% y

bHat

[,1]

(Intercept) 7.068220709

Area -0.023938338

Elevation 0.319464761

Nearest 0.009143961

Scruz -0.240524230

Adjacent -0.074804832
```

sau alternativ folosind ecuațiile normalw

```
solve(crossprod(X,X), crossprod(X,y)) # crossprod calculeaza X^Ty

[,1]
(Intercept) 7.068220709
Area -0.023938338
Elevation 0.319464761
Nearest 0.009143961
Scruz -0.240524230
Adjacent -0.074804832
```

Estimatorul pentru σ^2 este dat de

```
sHat = sqrt(deviance(gala_model)/df.residual(gala_model))
sHat
[1] 60.97519
```

sau încă de

```
gala_model_summary$sigma
[1] 60.97519
```

Dacă vrem să determinăm erorile standard ale coeficienților, i.e. $\hat{SE}(\hat{\beta}_i)$, să observăm pentru început că acestea sunt date de următoarea formulă

$$\hat{SE}(\hat{\beta}_{i-1}) = \hat{\sigma} \sqrt{(\mathbf{X}^{\intercal} \mathbf{X})_{ii}^{-1}}$$

unde $(\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{X})_{ii}^{-1}$ reprezintă elementul *i* de pe diagonala matricii $(\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{X})^{-1}$. Avem

sau folosind modelul sumarizat

2.1.2 Inferență asupra parametrilor

Având mai mulți predictori pentru o variabilă răspuns, ne întrebăm dacă avem nevoie de toți. Fie Θ spațiul parametrilor pentru un model mai mare și Θ_0 spațiul parametrilor pentru un model mai mic $(\Theta_0 \subset \Theta)$. Dacă nu avem o diferență prea mare între concordanța celor două modele atunci îl preferăm pe cel mai simplu. Testul bazat pe raportul de verosimilități $(H_0: \theta \in \Theta_0 \text{ vs } H_1: \theta \in \Theta)$ conduce la respingerea ipotezei nule în cazul în care raportul

$$\frac{RSS_{\Theta_0} - RSS_{\Theta}}{RSS_{\Theta}}$$

este suficient de mare. Dacă spațiul parametrilor Θ are dimensiunea p (la noi k+1) iar spațiul parametrilor modelului redus Θ_0 are dimensiunea q atunci

$$F = \frac{\frac{RSS_{\Theta_0} - RSS_{\Theta}}{(p-q)}}{\frac{RSS_{\Theta}}{n-p}} = \frac{\frac{RSS_{\Theta_0} - RSS_{\Theta}}{(df_{\Theta_0} - df_{\Theta})}}{\frac{RSS_{\Theta}}{df_{\Theta}}} \sim F_{p-q,n-p}.$$

unde $df_{\Theta_0} = n - q$ iar $df_{\Theta} = n - p$ (gradele de libertate sunt în general numărul de observații minus numărul de parametrii ai modelului).

a) Test asupra tuturor predictorilor

Să presupunem că vrem să testăm ipoteza nulă

$$H_0: \beta_1 = \cdots = \beta_k = 0$$

cu alte cuvinte vrem să răspundem la întrebarea dacă vreuna din variabilele explicative este folositoare în prezicerea răspunsului. În această situație modelul (complet Θ) este $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ și are k+1 parametrii (k+1 coeficienți β_i) iar modelul redus (Θ_0) este $\mathbf{y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\varepsilon}$ și are 1 parametru (β_0). Prin urmare avem statistica F

$$F = \frac{\frac{RSS_{\Theta_0} - RSS_{\Theta}}{(k+1-1)}}{\frac{RSS_{\Theta}}{n - (k+1)}} = \frac{\frac{SS_T - RSS}{k}}{\frac{RSS}{n - (k+1)}} = \frac{\frac{SS_{reg}}{k}}{\frac{RSS}{n - (k+1)}} \sim F_{k,n - (k+1)}$$

unde RSS este suma abaterilor pătratice reziduale, $SS_T = (y - \bar{y})^{\intercal}(y - \bar{y})$ este suma abaterilor pătratice totale iar $SS_{reg} = SS_T - RSS$ este suma abaterilor de regresie, ceea ce conduce la tabelul ANOVA

	Df	SS	MS	F	p-value
- 6	$k \\ n - (k+1)$	SS_{reg} RSS	$\frac{SS_{reg}}{\frac{k}{RSS}}$ $\frac{RSS}{n-(k+1)}$	$F = \frac{SS_{reg}/k}{RSS/(n-(k+1))}$	p
Total	n-1	SS_T	n (n 1)		

Chiar dacă ipoteza nulă a fost respinsă asta nu înseamnă că modelul dat de alternativă este cel mai bun (nu știm dacă toți predictorii sunt necesari în model sau doar o parte dintre ei).

Pentru setul nostru de date să considerăm modelul nul (cel ce corespunde lui Θ_0)

Tabelul ANOVA este dat de

```
anova(gala_model, gala_null_model)
Analysis of Variance Table
```

```
Model 1: Species ~ Area + Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent

Model 2: Species ~ 1

Res.Df RSS Df Sum of Sq F Pr(>F)

1 24 89231

2 29 381081 -5 -291850 15.699 6.838e-07 ***

---

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

Observăm că ipoteza nulă este respinsă în acest caz în favoarea alternativei (p valoarea este aproximativ 6.8×10^{-7}).

Putem calcula această p-valoare și fără a apela la ajutorul funcției anova:

```
# pentru modelul redus
RSS0 = deviance(gala_null_model)
df0 = df.residual(gala_null_model)

# pentru modelul intreg
RSS = deviance(gala_model)
df = df.residual(gala_model)

# statistica F

Fstat = ((RSS0 - RSS)/(df0 - df))/(RSS/df)

1-pf(Fstat, df0-df, df)
[1] 6.837893e-07
```

b) Test asupra unui predictor

Să presupunem acum că vrem să testăm dacă putem exclude din model un anumit predictor i (fixat). Prin urmare vrem să testăm ipoteza nulă

$$H_0: \beta_i = 0$$

Considerăm modelul întreg Θ în care avem toți predictorii și modelul redus Θ_0 în care avem toți predictorii mai puțin predictorul i (în cazul problemei noastre o să testăm să vedem dacă putem exclude sau nu variabila explicativă Area):

```
gala_Area_model = lm(Species ~ Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent,
    data = gala)

anova(gala_model, gala_Area_model)
Analysis of Variance Table

Model 1: Species ~ Area + Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent
Model 2: Species ~ Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent
    Res.Df RSS Df Sum of Sq F Pr(>F)
1     24 89231
2     25 93469 -1   -4237.7 1.1398 0.2963
```

Observăm că nu putem respinge ipoteza nulă (p valoarea > 0.05).

O abordare alternativă constă în folosirea statisticii de test

$$t_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{SE}(\hat{\beta}_j)} \sim_{H_0} t_{n-k-1}$$

care verifică relația $t_i^2 = F$. Putem vedea statistica student în output-ul funcției summary:

```
gala_model_summary$coefficients

Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)

(Intercept) 7.068220709 19.15419782 0.369016796 7.153508e-01

Area -0.023938338 0.02242235 -1.067610554 2.963180e-01

Elevation 0.319464761 0.05366280 5.953187968 3.823409e-06

Nearest 0.009143961 1.05413595 0.008674366 9.931506e-01

Scruz -0.240524230 0.21540225 -1.116628222 2.752082e-01

Adjacent -0.074804832 0.01770019 -4.226216850 2.970655e-04
```

c) Test pentru o pereche de predictori

Să presupunem că vrem să testăm dacă suprafața insulei curente sau a insulei adiacente au vreo relație relativ la variabila răspuns. Prin urmare vrem să testăm ipoteza nulă (să ținem cont că trebuie să specificăm care sunt toți predictorii!)

$$H_0: \beta_i = \beta_j = 0 \quad (\beta_{Area} = \beta_{Adjacent} = 0)$$

Putem testa această ipoteză folosind procedura descrisă anterior:

```
gala_Area_Adjacent_model = lm(Species ~ Elevation + Nearest + Scruz,
    data = gala)

anova(gala_Area_Adjacent_model, gala_model)
Analysis of Variance Table

Model 1: Species ~ Elevation + Nearest + Scruz
Model 2: Species ~ Area + Elevation + Nearest + Scruz + Adjacent
    Res.Df    RSS Df Sum of Sq    F Pr(>F)
1     26 158292
2     24 89231 2 69060 9.2874 0.00103 **
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Observăm că ipoteza nulă este respinsă deoarece p-valoarea este mică (prin urmare excluderea celor doi predictori nu este justificată).

2.1.3 Intervale de încredere pentru parametrii

Cum repartitia lui $\hat{\beta}$ este:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim \mathcal{N}_{k+1} \left(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \right)$$

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

$$\frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\hat{SE}(\hat{\beta}_j)} \sim t_{n-(k+1)}$$

iar un interval de încredere de nivel $1-\alpha$ pentru parametrul β_i este

$$IC = \left(\hat{\beta}_j \pm \hat{SE}(\hat{\beta}_j)t_{n-2;1-\alpha/2}\right)$$

Putem construi intervale de încredere pentru parametrii folosind funcția confint:

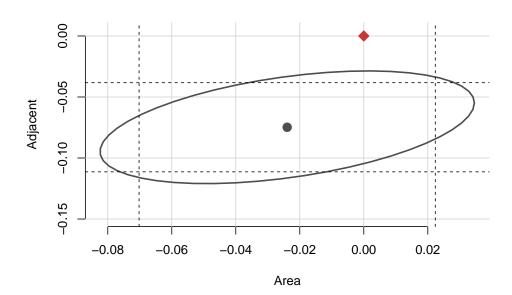
```
confint(gala_model)
                  2.5 %
                              97.5 %
(Intercept) -32.4641006 46.60054205
             -0.0702158
                         0.02233912
Area
                         0.43021935
Elevation
              0.2087102
Nearest
             -2.1664857
                         2.18477363
             -0.6850926
                         0.20404416
Scruz
Adjacent
             -0.1113362 -0.03827344
```

Dacă vrem să construim o regiune de încredere pentru mai mult de un parametru atunci putem să folosim relația:

$$(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})^\intercal \boldsymbol{X}^\intercal \boldsymbol{X} (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}) \leq (k+1) \hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 F_{k+1,n-(k+1)}^{1-\alpha}$$

care reprezintă o regiune de încredere pentru β .

De exemplu vrem să construim o regiune de încredere pentru perechea ($\beta_{Area}, \beta_{Adjacent}$):



Cum punctul (0,0) nu aparține regiunii elipsoidale atunci putem respinge ipoteza nulă $H_0: \beta_{Area} = \beta_{Adjacent} = 0.$

Referințe

Michael P. Johnson and Peter H. Raven. Species number and endemism: The galápagos archipelago revisited. *Science*, 179(4076):893–895, 1973. ISSN 0036-8075. doi: 10.1126/science.179.4076.893. URL http://science.sciencemag.org/content/179/4076/893. (Citat la pagina 20.)