Curs Biostatistica 2017 - Laborator 7 & 8

Regresie

Contents

| 1 | Regresie liniară simplă | | | | |
|---|---------------------------|----|--|--|--|
| | 1.1 Introducere | | | | |
| | 1.2 Exercițiul 1 | 3 | | | |
| 2 | Regresie liniară multiplă | 16 | | | |
| 1 | Regresie liniară simplă | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |

1.1 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, 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 asu aleatoare)
- Modelul de regresie presupune că Y este continuă datorită normalității erorilor. În orice caz, X poate fi o variabilă discretă!

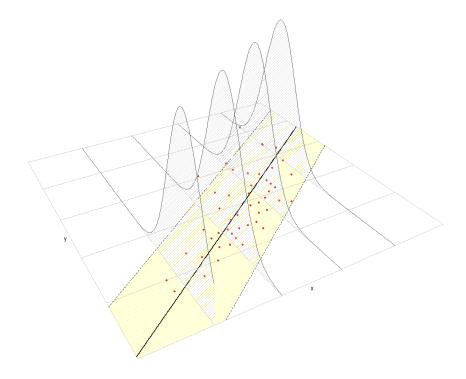


Figure 1: Regresia liniara simpla

Dat fiind un eșantion $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$ 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

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

unde

- $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$ 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

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

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

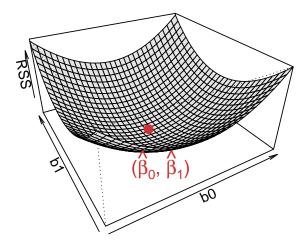


Figure 2: Graficul functiei RSS pentru modelul y = -0.5 + 1.5x + e.

Estimatorul pentru σ^2 este

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

1.2 Exercițiul 1

În acest exercițiu vrem 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

```
summary(saltBP)
```

```
##
         BP
                        salt
                                      saltLevel
          :128.3
                   Min. : 1.130
##
   Min.
                                    Min.
                                          :0.0
   1st Qu.:131.8
                   1st Qu.: 2.650
                                     1st Qu.:0.0
  Median :135.7
                   Median : 5.210
                                    Median:0.0
```

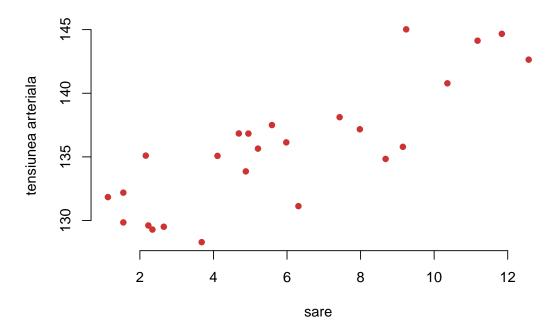


Figure 3: Diagrama de imprastiere

```
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
```

1.2.1 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 .

• estimatorii parametrilor β_0 și β_1

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

## 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 1m:
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$coefficients
## (Intercept)
                       salt
  128.616397
                   1.196894
Dreapta de regresie este:
plot(saltBP$salt, saltBP$BP,
     xlab = "nivelul de sare",
     ylab = "tensiunea arteriala",
     col = "brown3",
     pch = 16,
     bty="n",
     main = paste("y = ", format(b0, digits = 4), " + ", format(b1, digits = 4), " x"))
abline(a = b0, b = b1, col = "grey", lwd = 2)
points(mean(saltBP$salt), mean(saltBP$BP), pch = 16, col = "dark green", cex = 1.2)
text(mean(saltBP$salt), mean(saltBP$BP)-1.3, col = "dark green", cex = 1.2,
     labels = expression(paste("(", bar(x), ",", bar(y),")")))
  • estimatorul lui \sigma (\hat{\sigma})
n = length(saltBP$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 1m
sqrt(deviance(saltBP_model)/df.residual(saltBP_model))
## [1] 2.745374
sau încă
saltBP_model_summary = summary(saltBP_model)
# names(saltBP_model_summary)
saltBP_model_summary$sigma
```

[1] 2.745374

1.2.2 Intervale de încredere pentru parametrii

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

$$y = 128.6 + 1.197 x$$

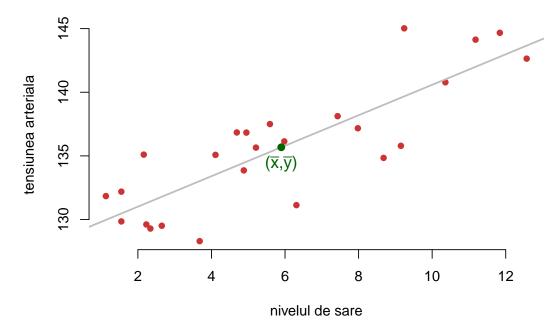


Figure 4: Dreapta de regresie

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

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

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

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 $beta_0$ și $beta_1$ sunt

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

```
alpha = 0.05
# trebuie avut grija ca functia var si sd calculeaza impartind la (n-1) si nu la n !!!
se b0 = \sqrt{(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 :
confint(saltBP_model)
##
                     2.5 %
                               97.5 %
## (Intercept) 126.3369606 130.895834
## salt
                 0.8617951
                             1.531993
Putem construi și o regiune de încredere pentru perechea (\beta_0, \beta_1):
plot(ellipse(saltBP_model, c(1,2)), type = "l", col = "grey30",
     xlab = expression(beta[0]),
     ylab = expression(beta[1]),
     bty = "n")
points(coef(saltBP_model)[1], coef(saltBP_model)[2], pch = 18, col = "brown3")
abline(v = confint(saltBP_model)[1,], lty = 2)
abline(h = confint(saltBP_model)[2,], lty = 2)
```

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:

- $SS_T = \sum_{i=1}^n (Y_i \bar{Y})^2$, 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

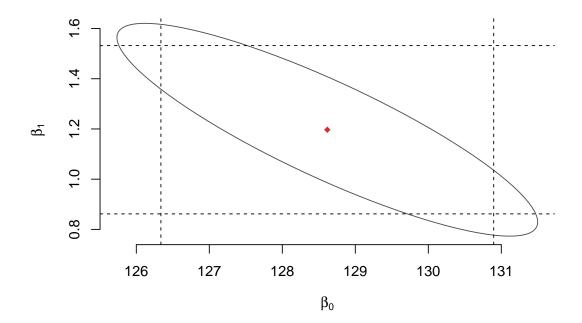


Figure 5: Regiune de incredere

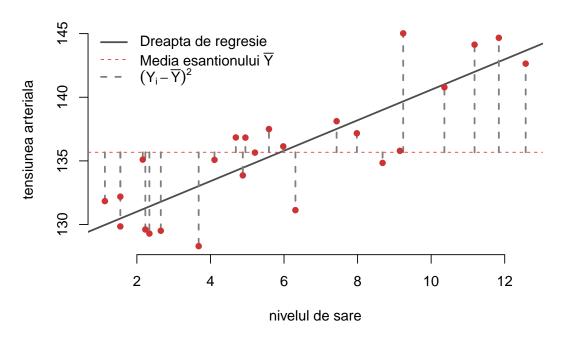
| | Df | SS | MS | F | <i>p</i> -value |
|------------------------|------------|------------------|--|--------------------------------|-----------------|
| Predictor Residuuri | $1 \\ n-2$ | SS_{reg} RSS | $\frac{SS_{reg}}{1}$ $\frac{RSS}{n-2}$ | $\frac{SS_{reg}/1}{RSS/(n-2)}$ | p |

Descompunerea ANOVA pentru problema noastră poate fi ilustrată astfel:

• 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 8= "brown3")
```

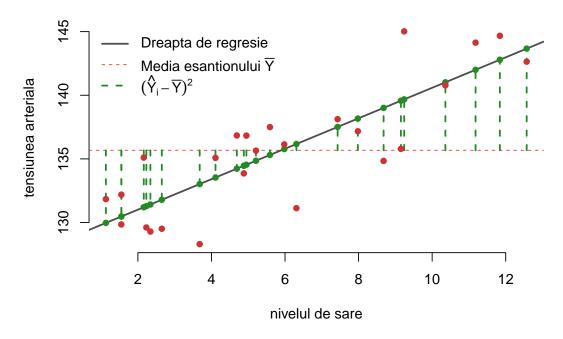
SST = 584.83



• suma abaterilor pătratice de regresie

```
plot(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, type = "n",
     main = paste("SSreg =", round(sum((saltBP_model$fitted.values - mean(saltBP$BP))^2), 2)),
     col.main = "forestgreen",
     xlab = "nivelul de sare",
     ylab = "tensiunea arteriala",
     btv = "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$salt, y1 = saltBP_model$fitted.values,
         col = "forestgreen", lwd = 2, lty = 2)
points(saltBP$salt, saltBP_model$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("grey30", "brown2", "forestgreen"),
      lty = c(1, 2, 2),
       bty = "n")
points(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, col = "brown3")
```

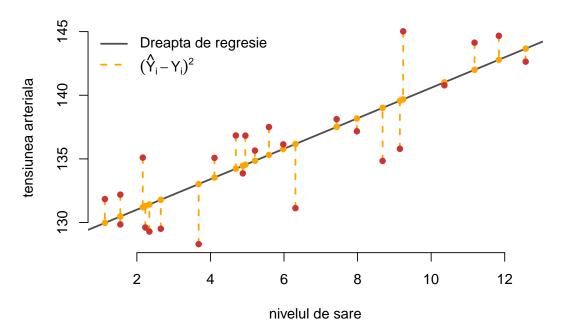
SSreg = 411.48



• suma abaterilor pătratice reziduale

```
plot(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, type = "n",
     main = paste("RSS =", round(sum((saltBP$BP - saltBP_model$fitted.values)^2), 2)),
     col.main = "orange",
     xlab = "nivelul de sare",
     ylab = "tensiunea arteriala",
     btv = "n")
abline(saltBP_model$coefficients, col = "grey30", lwd = 2)
segments(x0 = saltBP$salt, y0 = saltBP$BP, x1 = saltBP$salt, y1 = saltBP_model$fitted.values,
         col = "orange", lwd = 2, lty = 2)
points(saltBP$salt, saltBP_model$fitted.values, pch = 16, col = "orange")
legend("topleft", legend = expression("Dreapta de regresie", (hat(Y)[i] - Y[i])^2),
       1wd = c(2, 2),
       col = c("grey30", "orange"),
       1ty = c(1, 2),
       bty = "n")
points(saltBP$salt, saltBP$BP, pch = 16, col = "brown3")
```

RSS = 173.35



Tabelul ANOVA se obține prin

tabel ANOVA

1.2.4 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:

```
summary(saltBP_model)
```

Call:

```
## lm(formula = BP ~ salt, data = saltBP)
##
##
  Residuals:
##
      Min
                1Q Median
                                3Q
                                      Max
##
   -5.0388 -1.6755 0.3662
                           1.8824
                                   5.3443
##
##
  Coefficients:
##
               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
               128.616
                             1.102 116.723 < 2e-16 ***
##
   (Intercept)
##
                  1.197
                             0.162
                                     7.389 1.63e-07 ***
##
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 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.

1.2.5 Predicții

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 conditionat $Y|X=x_0$).

Un interval de încredere pentru răspunsul viitor mediu este:

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

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

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

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)

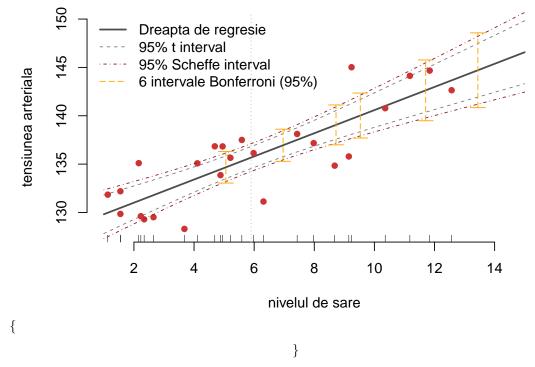
## 1
## 145.3729

# Predictie pentru valoarea raspunsului mediu
predict(saltBP_model, newdata = newData, interval = "confidence")

## fit lwr upr
## 1 145.3729 142.4298 148.316
```

```
predict(saltBP_model, newdata = newData2, interval = "confidence")
                    fit
                                      lwr
                                                        upr
## 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
                                                        upr
## 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
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 xx = (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(\frac{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, x1 = r0+0.25, y1 = lw_bonf, y1 = r0+0.25, y2 = r0+0.25, y3 
segments(x0 = x0-0.25, y0 = up\_bonf, x1 = x0+0.25, y1 = up\_bonf, col = "orange", lty = 1)
```

\begin{figure}



 $\label{eq:caption} $$\operatorname{Nivelul}$ de sare prezis impreuna cu intervalul de incredere de nivel 95\% pentru raspunsul mediu} $$\operatorname{defigure}$$

1.2.6 Diagnostic

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

• Independența

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

• Normalitatea

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

```
library(car)
```

##

Q-Q plot (Dreapta lui Henry)

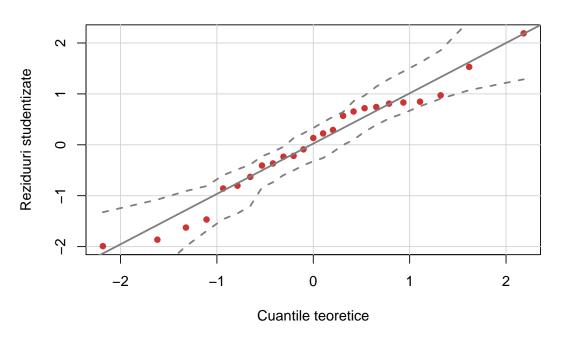


Figure 6: Q-Q plot

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
```

• 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 Fitted

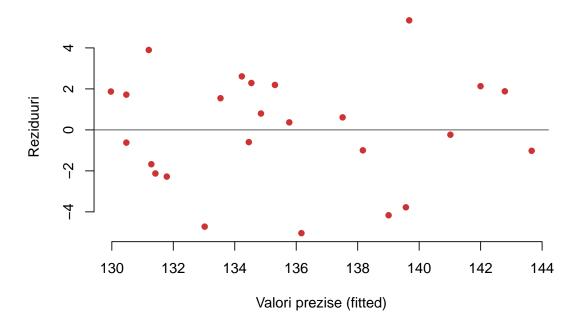


Figure 7: Reziduuri vs Valori prezise (Fitted)

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