Laborator 6

Elemente de regresie liniară multiplă

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

1 Introducere

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 $X_1, \dots, X_k$ pentru a explica răspunsul Y:

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

sau altfel scris

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

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

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

a cărui formă compactă (matriceală) este

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

- $\mathbf{X}$ este *matricea de design*

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

- $\mathbf{Y}$ este *vectorul răspuns*, $\boldsymbol{\beta}$ este *vectorul coeficienților* iar $\boldsymbol{\varepsilon}$ este *vectorul eroare*

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

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

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

Suma abaterilor pătratice reziduale pentru modelul de regresie liniară multiplă este

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

ceea ce conduce la *sistemul de ecuații 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

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

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

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

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

și sub formă matriceală

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

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

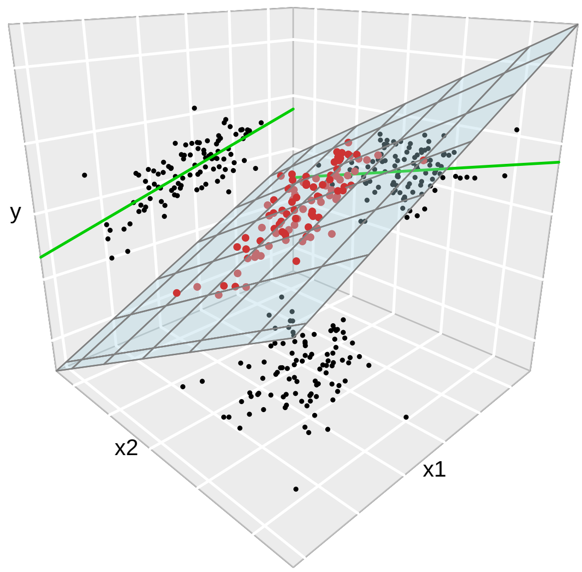
- *reziduurile estimate* (*estimated residuals*) $\hat{\varepsilon}_1, \ldots, \hat{\varepsilon}_n$, unde

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

și sub formă matriceală

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{Y} - \hat{\boldsymbol{Y}} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{H})\boldsymbol{Y}$$

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).



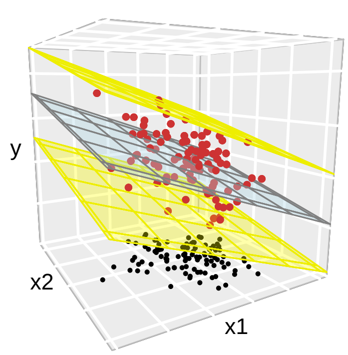
Ipotezele modelului sunt:

i. **Linearitatea**: $\mathbb{E}[Y|X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k$
ii. **Homoscedasticitatea**: $\mathbb{V}\text{ar}(\varepsilon_i) = \sigma^2$, 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

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

2 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
Caldwell           3        3  0.21       114     2.8  58.7     0.78
Champion          25        9  0.10        46     1.9  47.4     0.18
Coamano            2        1  0.05        77     1.9   1.9   903.82
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       1Q   Median       3Q      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        -0.023938   0.022422  -1.068 0.296318
Elevation    0.319465   0.053663   5.953 3.82e-06 ***
Nearest      0.009144   1.054136   0.009 0.993151
Scruz       -0.240524   0.215402  -1.117 0.275208
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 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                 1 25.09       346     0.6   0.6     1.84
Bartolome              1  1.24       109     0.6  26.3   572.33
Caldwell               1  0.21       114     2.8  58.7     0.78
Champion               1  0.10        46     1.9  47.4     0.18
Coamano                1  0.05        77     1.9   1.9   903.82
Daphne.Major           1  0.34       119     8.0   8.0     1.84
```

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. $\hat{\mathrm{SE}}(\hat{\beta}_i)$, să observăm pentru început că acestea sunt date de următoarea formulă

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

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

```
seBHat = sHat*sqrt(diag(xtxi))
seBHat
(Intercept)        Area   Elevation     Nearest       Scruz    Adjacent
19.15419782  0.02242235  0.05366280  1.05413595  0.21540225  0.01770019
```

sau folosind modelul sumarizat

```
gala_model_summary$coefficients[, 2]
(Intercept)        Area   Elevation     Nearest       Scruz    Adjacent
19.15419782  0.02242235  0.05366280  1.05413595  0.21540225  0.01770019
```

2.2 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 ($H_0 : \theta \in \Theta_0$ 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 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ și are $k+1$ parametrii ($k+1$ coeficienți β_i) iar modelul redus (Θ_0) este $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\varepsilon}$ 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, $SS_T = (\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{y}})^\intercal(\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{y}})$ 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
Regresie	k	SS_{reg}	$\frac{SS_{reg}}{k}$	$F = \frac{SS_{reg}/k}{RSS/(n-(k+1))}$	p
Residuuri	$n-(k+1)$	RSS	$\frac{RSS}{n-(k+1)}$		
Total	$n-1$	SS_T			

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)

```
gala_null_model = lm(Species ~ 1, data = gala)
```

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 '**' 0.01 '*' 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

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

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 '**' 0.01 '*' 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).

2.3 Intervale de încredere pentru parametrii

Cum repartiția lui $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 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

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

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

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

Putem construi intervale de încredere pentru parametrii folosind funcția `confint`:

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

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

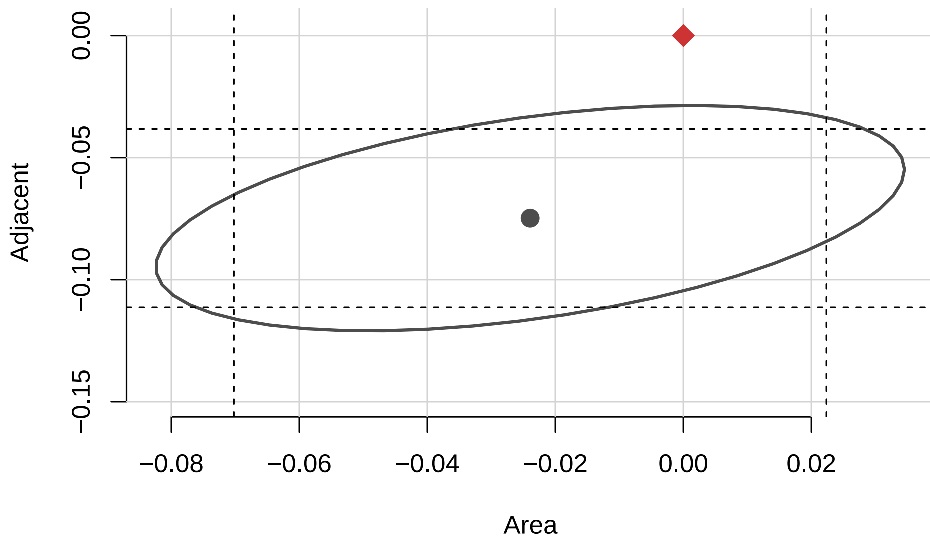
$$(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})^\intercal \boldsymbol{X}^\intercal \boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}) \leq (k+1)\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 F^{1-\alpha}_{k+1,n-(k+1)}$$

care reprezintă o regiune de încredere pentru $\boldsymbol{\beta}$.

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

```
par(bty = "n")
confidenceEllipse(gala_model, which.coef = c(2,6),
                  xlab = "Area",
                  ylab = "Adjacent",
                  col = "grey30",
                  ylim = c(-0.15,0.005))
```

```
points(0, 0, pch = 18, col = "brown3",
       cex = 2)
abline(v = confint(gala_model)[2,], lty = 2)
abline(h = confint(gala_model)[6,], lty = 2)
```



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 4.)