# TDAB01 Sannolikhetslära och Statistik

Jose M. Peña
IDA, Linköpings Universitet

Föreläsning 12

# Översikt

- **Enkel regression, minsta kvadratmetoden, och $R^2$**
- **Konfidensintervall och hypotestest för intercept och lutning**
- **Konfidensintervall för prediktion**
- **Prediktionsintervall för individuell responsvariabel**
- Bonus: Bayesian Linear Regression

# Enkel regression, minsta kvadratmetoden, och $R^2$

- Regression: Prediktera $E[Y|X = x]$ där $Y$ är en slumpvariabel (responsvariabel eller beroende variabel) och $X = x$ är en observation (förklarandevariabel eller oberoende variabel).
- Obs. att vi vill prediktera en populations parameter.
- Linjär regression: Antag $Y|X = x \sim \mathcal{N}(\mu(x), \sigma^2)$ och $E[Y|X = x] = \mu(x) = \beta_0 + \beta_1 x$ där
  - $\beta_0$ är intercepten, och
  - $\beta_1$ är lutningen.
- Minsta kvadratmetoden eller maximum likelihood metoden för att estimera $\beta_0$ och $\beta_1$:
  - $b_0 = \hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$, och
  - $b_1 = \hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$.
- $SS_{TOTAL} = \sum_i (y_i - \bar{y})^2$ = den **totala** variationen av $Y$ i strickprovet.
- $SS_{REG} = \sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2$ = den variationen **förklarad** av modellen.
- $SS_{ERR} = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2$ = den variationen **inte** förklarad av modellen $= SS_{TOTAL} - SS_{REG}$.
- $R^2 = \frac{SS_{REG}}{SS_{TOTAL}}$ = **andelen** av den totala variationen förklarad av modellen.
- Obs. $0 \leq R^2 \leq 1$. Dessutom, $R^2 = r^2$ = sampling korrelationskoefficienten mellan $X$ och $Y$.

# Konfidensintervall och hypotestest för intercept och lutning

- **Trick**: $\sum_i (x_i - \bar{x}) = \sum_i x_i - n\bar{x} = 0$ och då

$$S_{xy} = \sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_i (x_i - \bar{x}) y_i - \bar{y} \sum_i (x_i - \bar{x}) = \sum_i (x_i - \bar{x}) y_i$$

- $b_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x}) y_i}{S_{xx}}$ och då $b_1$ är en linjär funktion av $y_i$ och då **normal** fördelad.
- $E[b_1] = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x}) E[y_i]}{S_{xx}} = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(\beta_0 + \beta_1 x_i)}{S_{xx}} = \frac{\beta_1 \sum_i (x_i - \bar{x}) x_i}{S_{xx}} = \beta_1$ och då $b_1$ är en **väntevärdesriktig** estimator av $\beta_1$.
- $var[b_1] = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})^2 var[y_i]}{S_{xx}^2} = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$.
- Nu kan vi bygga konfidensintervall och hypotestest för lutningen baserade på $t$-fördelningen, eftersom $\sigma^2$ brukar vara okänd.
  - $(1 - \alpha)100\%$ tvåsidigt konfidensintervall:

$$b_1 \pm t_{\alpha/2} \frac{s}{\sqrt{S_{xx}}}$$

    där $t$-fördelningen har $n - 2$ frihetsgrader, och $s^2 = SS_{ERR}/(n - 2)$. För tekniskt varför $n - 2$ istället för $n - 1$. Se sida 371 i Baron.
  - Hypotestest $H_0 : \beta_1 = B$ vs $H_A : \beta_1 \neq B$:

$$t = \frac{b_1 - B}{s/\sqrt{S_{xx}}}$$

    som har en $t$-fördelningen har $n - 2$ frihetsgrader. Ta $B = 0$ för att pröva om det finns en linjär relation mellan $X$ och $Y$.

# Konfidensintervall och hypotestest för intercept och lutning

- $b_0 = \bar{y} - b_1\bar{x} = \frac{\sum_i y_i}{n} - \frac{\sum_i (x_i - \bar{x}) y_i \bar{x}}{S_{xx}}$ och då $b_0$ är en linjär funktion av $y_i$ och då **normal** fördelad.
- $E[b_0] = \frac{\sum_i E[y_i]}{n} - E[b_1]\bar{x} = \frac{\sum_i (\beta_0 + \beta_1 x_i)}{n} - \beta_1\bar{x} = \beta_0 + \beta_1\bar{x} - \beta_1\bar{x} = \beta_0$ och då $b_0$ är en **väntevärdesriktig** estimator av $\beta_0$.

# Konfidensintervall för prediktion

- $\mu_* = \mu(x_*) = E[Y|X = x_*] = \beta_0 + \beta_1 x_*$ estimeras av $\hat{y}_* = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_* = \bar{y} - b_1\bar{x} + b_1 x_* = \bar{y} + b_1(x_* - \bar{x}) = \frac{\sum_i y_i}{n} + \frac{\sum_i (x_i - \bar{x}) y_i (x_* - \bar{x})}{S_{xx}} = \sum_i \left( \frac{1}{n} + \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(x_* - \bar{x})}{S_{xx}} \right) y_i$ och då $\hat{y}_*$ är en linjär funktion av $y_i$ och då **normal** fördelad.
- Obs. att vi predikterar en **populations parameter**.
- $E[\hat{y}_*] = E[b_0] + E[b_1] x_* = \beta_0 + \beta_1 x_* = \mu_*$ och då $\hat{y}_*$ är en **väntevärdesriktig** estimator av $\mu_*$.
- $var[\hat{y}_*] = \sum_i \left( \frac{1}{n} + \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(x_* - \bar{x})}{S_{xx}} \right)^2 var(y_i) = \sigma^2 \left( \frac{1}{n} + \frac{(x_* - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right)$.
- $(1 - \alpha)100\%$ tvåsidigt konfidensintervall:

$$\hat{y}_* \pm t_{\alpha/2} s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_* - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

där $t$-fördelningen har $n - 2$ frihetsgrader, och $s^2 = SS_{ERR}/(n - 2)$.

# Prediktionsintervall för individuell responsvariabel

- Ett konfidensintervall för $\hat{y}_*$ representerar osäkerheten om **populationens väntevärde** vid $X = x_*$. Men hur ser osäkerheten för ett faktiskt $y$-värde ut om $X = x_*$ ?
- Obs. att vi **inte** längre predikterar en populations parameter utan en **slumpvariabel**, dvs vi predikterar inte väntevärdet för stoppsträckan när jag kör 50 km/t, utan stoppsträckan när jag kör 50 km/t, dvs utfallet av en körning istället för genomsnittet av många körningar.
- 95%-igt **prediktionsintervall** för $y$-värdet är ett intervall $[a, b]$ sådant att

$$\boldsymbol{P}(a \leq y \leq b | X = x_*) = 0.95$$

där $a$, $b$ och $y$ är slumpvariabler, dvs $y$ också !

- **Prediktera** $Y = \hat{y}_*$. Obs. att $y - \hat{y}_*$ är normal fördelad, eftersom $y$ och $\hat{y}_*$ är normal fördelade. Dessutom,

$$E[y - \hat{y}_*] = 0 \text{ och } sd(y - \hat{y}_*) = \sqrt{var(y) + var(\hat{y}_*)} = \sigma\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_* - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

Då, $\frac{y - \hat{y}_* - E[y - \hat{y}_*]}{sd(y - \hat{y}_*)}$ är $t$-fördelad. Då,

$$\hat{y}_* \pm t_{\alpha/2} s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_* - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

där $t$-fördelningen har $n - 2$ frihetsgrader, och $s^2 = SS_{ERR}/(n - 2)$.

# Prediktionsintervall för individuell responsvariabel

- $(1-\alpha)100\%$ konfidensintervall:

$$\hat{y}_* \pm t_{\alpha/2} s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_* - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

- $(1-\alpha)100\%$ prediktionsintervall:

$$\hat{y}_* \pm t_{\alpha/2} s \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_* - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

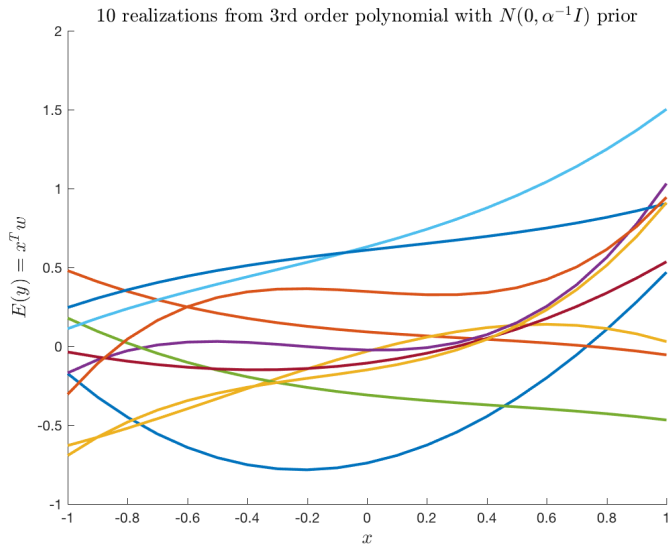
- Prediktionsintervallet är bredare än konfidensintervallet, dvs prediktera en individuell responsvariabel är svårare än prediktera populationens väntevärde.
- Konfidensintervallet convergerar mot 0 när $n$ ökar, eftersom $S_{xx}$ ökar också. Prediktionsintervallet convergerar inte mot 0.
- Prediktionsintervallet är smalare om $x_*$ ligger nära $\bar{x}$, dvs lättare att prediktera under "normala" omständigheter.

# Bonus: Bayesian Linear Regression

- Training data: $\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i) | i = 1, \ldots, n\} = (X, \boldsymbol{y})$.
- Deterministic function: $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{w}$.
- Additive noisy observations: $y = f(\boldsymbol{x}) + \epsilon$.
- Gaussian noise: $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_n^2)$.
- Likelihood function: $p(\boldsymbol{y}|X, \boldsymbol{w}) = \mathcal{N}(X^T \boldsymbol{w}, \sigma_n^2 I) \propto \exp\left\{\frac{1}{2\sigma_n^2} ||\boldsymbol{y} - X^T \boldsymbol{w}||^2\right\}$.
- To obtain $\boldsymbol{w}^{ML}$,
  - take the derivative of the log lik function wrt $\boldsymbol{w}$, and
  - set it to zero, and
  - solve to obtain $\boldsymbol{w}^{ML} = (XX^T)^{-1} X\boldsymbol{y}$.
- Minimizing the least squared error (i.e., $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{w})^2$) gives the same result. This justifies the use of LSE.

# Bonus: Bayesian Linear Regression

- Prior distribution: $\boldsymbol{w} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_p)$, e.g. ridge regression $\Sigma_p = \alpha^{-1} I$.




- Posterior distribution:

$$\log p(\boldsymbol{w}|X, \boldsymbol{y}) \propto \log p(\boldsymbol{y}|X, \boldsymbol{w}) + \log p(\boldsymbol{w}) \propto \frac{1}{2\sigma_n^2} ||\boldsymbol{y} - X^T \boldsymbol{w}||^2 - \frac{1}{2} \boldsymbol{w}^T \Sigma_p^{-1} \boldsymbol{w}.$$

- So, $\boldsymbol{w}^{MAP}$ can be seen as a penalized/regularized ML estimate.
- Specifically, $p(\boldsymbol{w}|X, \boldsymbol{y}) = \mathcal{N}(\bar{\boldsymbol{w}} = \frac{1}{\sigma_n^2} A^{-1} X \boldsymbol{y}, A^{-1})$ where $A = \sigma_n^{-2} X X^T + \Sigma_p^{-1}$, and thus $\boldsymbol{w}^{MAP} = \bar{\boldsymbol{w}}$.
- A full Bayesian approach does not use $\boldsymbol{w}^{MAP}$ but the predictive distribution:

$$p(f_*|\boldsymbol{x}_*, X, \boldsymbol{y}) = \int p(f_*|\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{w}) p(\boldsymbol{w}|X, \boldsymbol{y}) d\boldsymbol{w} = \mathcal{N}(\frac{1}{\sigma_n^2} \boldsymbol{x}_* A^{-1} X \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}_*^T A^{-1} \boldsymbol{x}_*).$$

# Översikt

- **Enkel regression, minsta kvadratmetoden, och $R^2$**
- **Konfidensintervall och hypotestest för intercept och lutning**
- **Konfidensintervall för prediktion**
- **Prediktionsintervall för individuell responsvariabel**
- Bonus: Bayesian Linear Regression