Kursus 02402/02323 Introducerende Statistik

Forelæsning 8: Simpel lineær regression

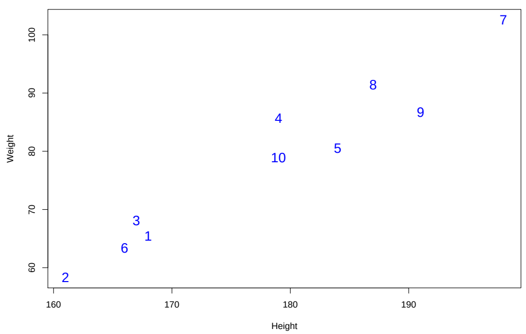
Klaus K. Andersen og Per Bruun Brockhoff

DTU Compute, Statistik og Dataanalyse
Danmarks Tekniske Universitet
2800 Lyngby – Danmark

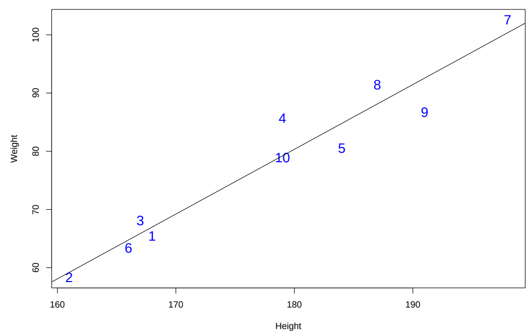
e-mail: klaus@cancer.dk

Oversigt

Heights (x_i)	168	161	167	179	184	166	198	187	191	179
Weights (y_i)	65.5	58.3	68.1	85.7	80.5	63.4	102.6	91.4	86.7	78.9



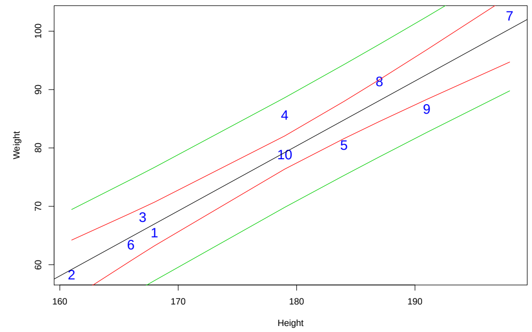
Heights (x_i)	168	161	167	179	184	166	198	187	191	179
Weights (y_i)	65.5	58.3	68.1	85.7	80.5	63.4	102.6	91.4	86.7	78.9



Heights (x_i)	168	161	167	179	184	166	198	187	191	179
Weights (y_i)	65.5	58.3	68.1	85.7	80.5	63.4	102.6	91.4	86.7	78.9

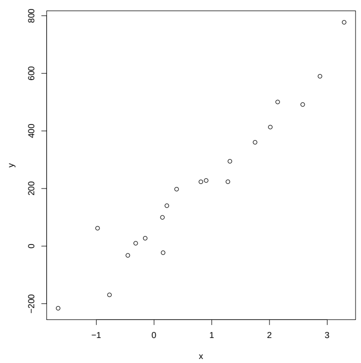
```
summary(lm(y ~ x))

##
## Call:
## lm(formula = y ~ x)
##
## Residuals:
##     Min      1Q Median      3Q     Max
## -5.876 -1.451 -0.608  2.234  6.477
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -119.958     18.897   -6.35  0.00022 ***
## x              1.113      0.106   10.50  5.9e-06 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.88 on 8 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.932, Adjusted R-squared:  0.924
## F-statistic:  110 on 1 and 8 DF,  p-value: 5.87e-06
```


Heights (x_i)	168	161	167	179	184	166	198	187	191	179
Weights (y_i)	65.5	58.3	68.1	85.7	80.5	63.4	102.6	91.4	86.7	78.9



Et scatter plot af noget data

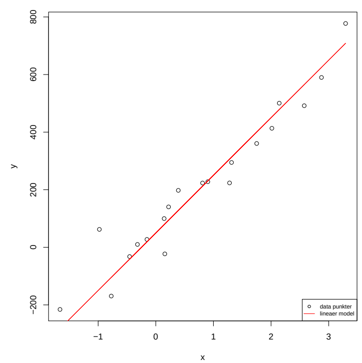
- Vi har n par datapunkter (x_i, y_i)



Opstil en lineær model

- Opstil en lineær model

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i$$



men den der mangler noget til at beskrive den *tilfældige variation*!

Opstil en lineær regressionsmodel

- Opstil den *lineære regressionsmodel*

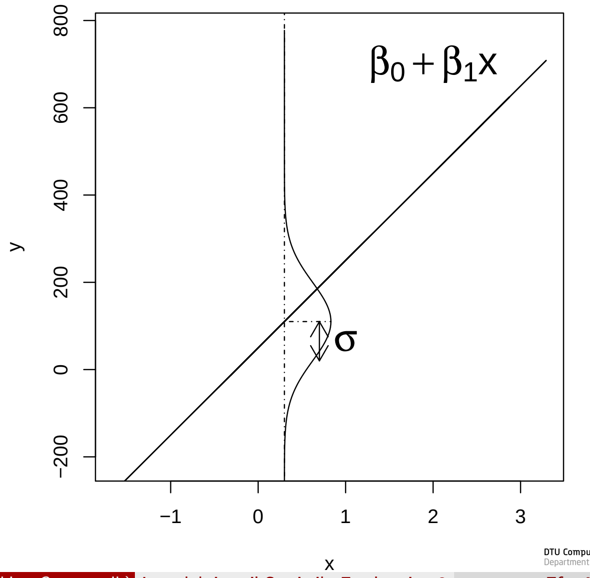
$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

- Y_i er den *afhængige variabel* (dependent variable). En stokastisk variabel.
- x_i er en *forklarende variabel* (explanatory variable)
- ε_i er afvigelsen (error). En stokastisk variabel.

og vi antager

ε_i er independent and identically distributed (i.i.d.) og $N(0, \sigma^2)$

Model-illustration



Mindste kvadraters metode

- Hvad kan vi gøre for at estimere parametrene β_0 og β_1?

  God ide: Minimer variansen σ^2 på afvigelsen. Det er på næsten alle måder det bedste valg i dette setup.

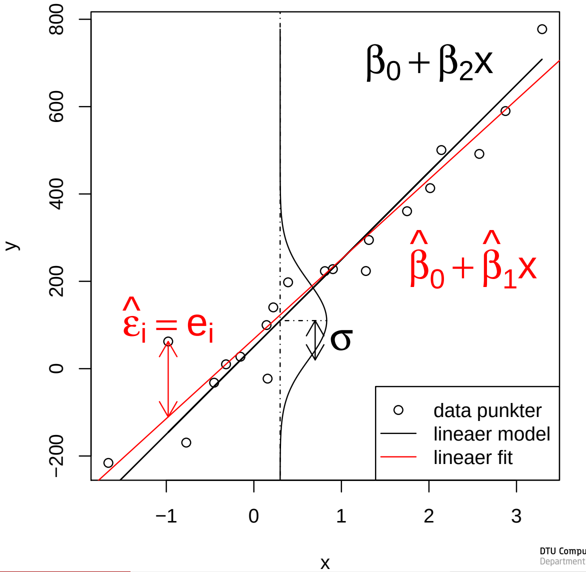
- But how!?

  Minimer summen af de kvadrerede afvigelser (Residual Sum of Squares (RSS))

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

$\hat{\beta}_0$ og $\hat{\beta}_1$ minimerer RSS

Illustration af model, data og fit



Least squares estimator

Theorem 5.4 (her for estimatorer som i eNoten)

The least squares estimators of β_0 and β_1 are given by

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})(x_i - \bar{x})}{S_{xx}}$$
$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

where $S_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$.

Least squares estimater

Theorem 5.4 (her for estimater)

The least squares estimatates of β_0 and β_1 are given by

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{S_{xx}}$$
$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

where $S_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$.

Tænk ikke længere over det for nu!

R eksempel

```
## Simuler en lineær model med normalfordelt afvigelse og estimer parametrene

## FØRST LAV DATA:
## Generer n værdier af input x som uniform fordelt
x <- runif(n=20, min=-2, max=4)

## Simuler lineær regressionsmodel
beta0=50; beta1=200; sigma=90
y <- beta0 + beta1 * x + rnorm(n=length(x), mean=0, sd=sigma)

## HERFRA ligesom virkeligheden, vi har dataen i x og y:
## Et scatter plot af x og y
plot(x, y)

## Udregn least squares estimaterne, brug Theorem 5.4
(beta1hat <- sum( (y-mean(y))*(x-mean(x)) ) / sum( (x-mean(x))^2 ))
(beta0hat <- mean(y) - beta1hat*mean(x))

## Brug lm() til at udregne estimaterne
lm(y ~ x)

## Plot den estimerede linie
abline(lm(y ~ x), col="red")
```


Parameter estimaterne er stokastiske variabler

Hvis vi tog en ny stikprøve ville estimaterne $\hat{\beta}_0$ og $\hat{\beta}_1$ have samme udfald?

Nej, de er stokastiske variabler. Tog vi en ny stikprøve så ville vi have en anden realisation.

Hvordan er parameter estimaterne i en lineær regressionsmodel fordelt (givet normalfordelte afvigelser)?

Prøv lige at simulere for at se på det...

- Hvordan er parameter estimaterne i en lineær regressionsmodel fordelt (givet normalfordelte afvigelser)?

  De er normalfordelte (for $n < 30$ brug t-fordeling) og deres varians kan estimeres:

Theorem 5.7 (første del)

$$V[\hat{\beta}_0] = \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\bar{x}^2\sigma^2}{S_{xx}}$$
$$V[\hat{\beta}_1] = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$$
$$Cov[\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1] = -\frac{\bar{x}\sigma^2}{S_{xx}}$$

- Kovariansen $Cov[\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1]$ (covariance) gør vi ikke mere ud af her.

Estimater af standard afvigelserne på $\hat{\beta}_0$ og $\hat{\beta}_1$

Theorem 5.7 (anden del)

Where σ^2 is usually replaced by its estimate ($\hat{\sigma}^2$). The central estimator for σ^2 is

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

When the estimate of σ^2 is used the variances also become estimates and we'll refer to them as $\hat{\sigma}^2_{\beta_0}$ and $\hat{\sigma}^2_{\beta_1}$.

Estimat af standard afvigelserne for $\hat{\beta}_0$ og $\hat{\beta}_1$ (ligningerne (5-73))

$$\hat{\sigma}_{\beta_0} = \hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}; \quad \hat{\sigma}_{\beta_1} = \hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$$

Hypotesetests for parameter estimaterne

- Vi kan altså udføre hypotesetests for parameter estimater i en lineær regressionsmodel:

$$H_{0,i}: \quad \beta_i = \beta_{0,i}$$
$$H_{1,i}: \quad \beta_i \neq \beta_{1,i}$$

- Vi bruger de t-fordelte statistikker:

Theorem 5.11

Under the null-hypothesis ($\beta_0 = \beta_{0,0}$ and $\beta_1 = \beta_{0,1}$) the statistics

$$T_{\beta_0} = \frac{\hat{\beta}_0 - \beta_{0,0}}{\hat{\sigma}_{\beta_0}}; \quad T_{\beta_1} = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_{0,1}}{\hat{\sigma}_{\beta_1}},$$

are t-distributed with $n-2$ degrees of freedom, and inference should be based on this distribution.

- Se Eksempel 5.12 for eksempel på hypotesetest.
- Test om parametrene er signifikant forskellige fra 0

$$H_{0,i}: \quad \beta_i = 0$$
$$H_{1,i}: \quad \beta_i \neq 0$$

- Se resultatet i R

```
## Hypotesetests om signifikante parametre

## Generer x
x <- runif(n=20, min=-2, max=4)
## Simuler Y
beta0=50; beta1=200; sigma=90
y <- beta0 + beta1 * x + rnorm(n=length(x), mean=0, sd=sigma)

## Brug lm() til at udregne estimaterne
fit <- lm(y ~ x)

## Se summary, deri står hvad vi har brug for
summary(fit)
```

Konfidensintervaller for parametrene

Method 5.14

$(1-\alpha)$ confidence intervals for β_0 and β_1 are given by

$$\hat{\beta}_0 \pm t_{1-\alpha/2}\,\hat{\sigma}_{\beta_0}$$
$$\hat{\beta}_1 \pm t_{1-\alpha/2}\,\hat{\sigma}_{\beta_1}$$

where $t_{1-\alpha/2}$ is the $(1-\alpha/2)$-quantile of a t-distribution with $n-2$ degrees of freedom.

- husk at $\hat{\sigma}_{\beta_0}$ og $\hat{\sigma}_{\beta_1}$ findes ved ligningerne (5-74)
- i R kan $\hat{\sigma}_{\beta_0}$ og $\hat{\sigma}_{\beta_1}$ aflæses ved "Std. Error"ved "summary(fit)"


```r
## Lav konfidensintervaller for parametrene

## Antal gentagelser
nRepeat <- 100

## Fangede vi den rigtige parameter
TrueValInCI <- logical(nRepeat)

## Gentag simuleringen og estimeringen nRepeat gange
for(i in 1:nRepeat){
  ## Generer x
  x <- runif(n=20, min=-2, max=4)
  ## Simuler y
  beta0=50; beta1=200; sigma=90
  y <- beta0 + beta1 * x + rnorm(n=length(x), mean=0, sd=sigma)

  ## Brug lm() til at udregne estimaterne
  fit <- lm(y ~ x)

  ## Heldigvis kan R beregne konfidensintervallet (level=1-alpha)
  (ci <- confint(fit, "(Intercept)", level=0.95))

  ## Var den rigtige parameterværdi "fanget" af intervallet?
  (TrueValInCI[i] <-  ci[1] < beta0  &  beta0 < ci[2])
}

## Hvor ofte blev den rigtige værdi "fanget"?
sum(TrueValInCI) / nRepeat
```


Method 5.17: Konfidensinterval for $\beta_0 + \beta_1 x_0$

- Konfidensinterval for $\beta_0 + \beta_1 x_0$ svarer til et konfidensinterval for linien i punktet x_0
- Beregnes med

$$(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0) \pm t_{\alpha/2} \cdot \hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0-\bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

- Konfidensintervallet vil i $100(1-\alpha)\%$ af gangene indeholde den rigtige linie, altså $\beta_0 + \beta_1 x_0$

Method 5.17: Prædiktionsinterval for $\beta_0 + \beta_1 x_0 + \varepsilon_0$

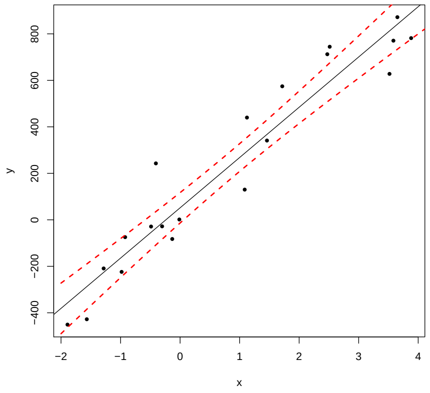
- Prædiktionsintervallet (prediction interval) for Y_0 beregnes med en værdi x_0
- Dette gøres *før* Y_0 observeres med

$$(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0) \pm t_{\alpha/2} \cdot \hat{\sigma}\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0-\bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

- Prædiktionsintervallet vil $100(1-\alpha)\%$ af gangene indeholde den observerede y_0
- Et prædiktionsinterval bliver altså større end et konfidensinterval for fastholdt α

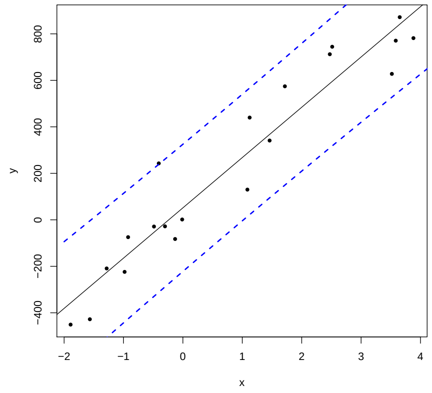
Eksempel med konfidensinterval for linien

```
## Eksempel med konfidensinterval for linien

## Lav en sekvens af x værdier
xval <- seq(from=-2, to=6, length.out=100)

## Brug predict funktionen
CI <- predict(fit, newdata=data.frame(x=xval),
interval="confidence",
level=.95)

## Se lige hvad der kom
head(CI)

## Plot data, model og intervaller
plot(x, y, pch=20)
abline(fit)
lines(xval, CI[, "lwr"], lty=2, col="red", lwd=2)
lines(xval, CI[, "upr"], lty=2, col="red", lwd=2)
```



Eksempel med prædiktionsinterval

```
## Eksempel med prædiktionsinterval

## Lav en sekvens a x værdier
xval <- seq(from=-2, to=6, length.out=100)

## Beregn interval for hvert x
PI <- predict(fit, newdata=data.frame(x=xval),
interval="prediction",
level=.95)

## Se lige hvad der kom tilbage
head(PI)

## Plot data, model og intervaller
plot(x, y, pch=20)
abline(fit)
lines(xval, PI[, "lwr"], lty=2, col="blue", lwd=2)
lines(xval, PI[, "upr"], lty=2, col="blue", lwd=2)
```



Hvad bliver mere skrevet ud af summary?

```
summary(fit)

##
## Call:
## lm(formula = y ~ x)
##
## Residuals:
##     Min      1Q Median      3Q     Max
## -184.7   -96.4  -20.3    86.6   279.1
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)     51.5       31.1    1.66     0.12
## x              216.3       15.2   14.22  3.1e-11 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 126 on 18 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.918, Adjusted R-squared:  0.914
## F-statistic:  202 on 1 and 18 DF,  p-value: 3.14e-11
```


summary(lm(y∼x)) wrap up

- `Residuals:      Min       1Q    Median       3Q       Max:`
  Residualernes: Minimum, 1. kvartil, Median, 3. kvartil, Maximum
- `Coefficients:`
  `Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) "stjerner"`
  Koefficienternes:
  Estimat $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ t_{obs} p-værdi
  - Testen er $H_{0,i}: \beta_i = 0$ vs. $H_{1,i}: \beta_i \neq 0$
  - Stjernerne er sat efter p-værdien
- `Residual standard error: XXX on XXX degrees of freedom`
  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ udskrevet er $\hat{\sigma}$ og ν frihedsgrader (brug til hypotesetesten)
- `Multiple R-squared:  XXX`
  Forklaret varians r^2
- Resten bruger vi ikke i det her kursus

Forklaret varians og korrelation

- Forklaret varians af en model er r^2, i summary "Multiple R-squared"
- Beregnes med

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$$

hvor $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$

- Andel af den totale varians der er forklaret med modellen

Forklaret varians og korrelation

- Korrelationen ρ er et mål for *lineær sammenhæng* mellem to stokastiske variable
- Estimeret (i.e. empirisk) korrelation

$$\hat{\rho} = r = \sqrt{r^2}\, sgn(\hat{\beta}_1)$$

hvor $sgn(\hat{\beta}_1)$ er: -1 for $\hat{\beta}_1 \leq 0$ og 1 for $\hat{\beta}_1 > 0$

- Altså:
  - Positiv korrelation ved positiv hældning
  - Negativ korrelation ved negativ hældning

Test for signifikant korrelation

- Test for signifikant korrelation (lineær sammenhæng) mellem to variable

$$H_0 : \rho = 0$$
$$H_1 : \rho \neq 0$$

er ækvivalent med

$$H_0 : \beta_1 = 0$$
$$H_1 : \beta_1 \neq 0$$

hvor $\hat{\beta}_1$ er estimatet af hældningen i simpel lineær regressionsmodel


```
## Korrelation

## Generer x
x <- runif(n=20, min=-2, max=4)
## Simuler y
beta0=50; beta1=200; sigma=90
y <- beta0 + beta1 * x + rnorm(n=length(x), mean=0, sd=sigma)

## Scatter plot
plot(x,y)

## Brug lm() til at udregne estimaterne
fit <- lm(y ~ x)

## Den rigtige linie
abline(beta0, beta1)
## Plot fittet
abline(fit, col="red")

## Se summary, deri står hvad vi har brug for
summary(fit)

## Korrelation mellem x og y
cor(x,y)

## Kvadreret er den "Multiple R-squared" fra summary(fit)
cor(x,y)^2
```

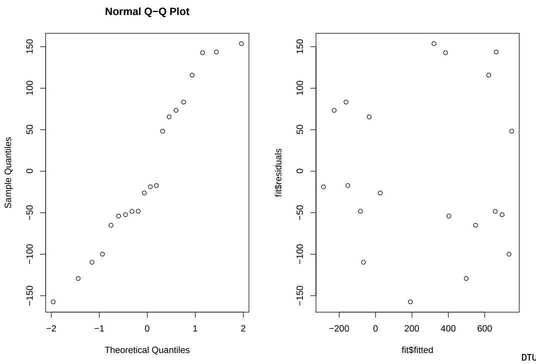
Residual Analysis

Method 5.26

- Check normality assumption with qq-plot.
- Check (non)systematic behavior by plotting the residuals e_i as a function of fitted values $\hat{y}_i$

Residual Analysis in R

```
fit <- lm(y ~ x)
par(mfrow = c(1, 2))
qqnorm(fit$residuals)
plot(fit$fitted, fit$residuals)
```



Outline