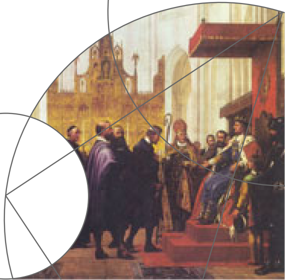
Statistisk Dataanalyse 1: Introduktion til lineær regression og ensidet variansanalyse

Anders Tolver
Institut for Matematiske Fag



Dagens program

Formiddag (10:00-11:45):

- Ensidet variansanalyse
- Korrelation og lineær regression

Vi vender tilbage til lineær regression og ensidet variansanalyse mange gange de kommende uger.

Idag: primært introduktion/motivation

I eftermiddag (ca. kl. 16:00) uploades video som berører:

- Evt. hængepartier fra formiddagens forelæsning
- Lidt mere om R Markdown
- Lidt om at arbejde med datasæt i R

Ensidet variansanalyse

Eksempel 3.2: Nedbrydning af organisk materiale

Data

- Fem typer antibiotika og en kontrolbehandling.
- 36 kvier inddelt i seks grupper. Foder tilsat antibiotikum.
- Gødning gravet ned i poser og mængden af organisk materiale målt efter 8 uger.
- For spiramycin: Kun fire brugbare målinger.

Eksempel 3.2: Nedbrydning af organisk materiale

Data

- Fem typer antibiotika og en kontrolbehandling.
- 36 kvier inddelt i seks grupper. Foder tilsat antibiotikum.
- Gødning gravet ned i poser og mængden af organisk materiale målt efter 8 uger.
- For spiramycin: Kun fire brugbare målinger.

Formål

- Påvirker antibiotika nedbrydningen af organisk materiale?
- Hvis kontrolmålingerne ligger lavere end de andre, tyder det på at antibiotika hæmmer nedbrydningen.

Data

Data er tilgængelige i datasættet antibio i isdals-pakken.

```
library(isdals)
data(antibio)
head(antibio, n=7)

##        type  org
## 1 Ivermect 3.03
## 2 Ivermect 2.81
## 3 Ivermect 3.06
## 4 Ivermect 3.11
## 5 Ivermect 2.94
## 6 Ivermect 3.06
## 7  Alfacyp 3.00
```

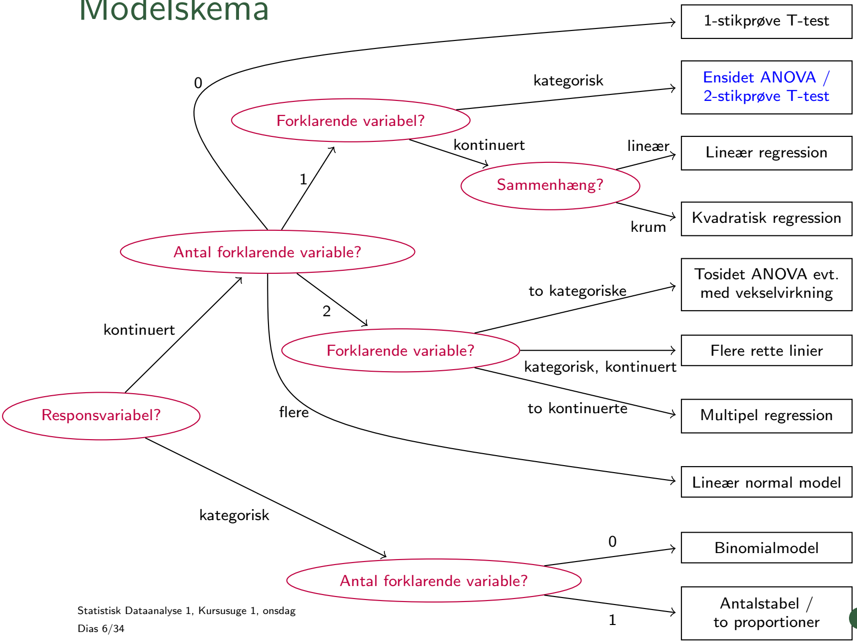
Data

Data er tilgængelige i datasættet `antibio` i `isdals`-pakken.

```
library(isdals)
data(antibio)
head(antibio, n=7)

##       type  org
## 1 Ivermect 3.03
## 2 Ivermect 2.81
## 3 Ivermect 3.06
## 4 Ivermect 3.11
## 5 Ivermect 2.94
## 6 Ivermect 3.06
## 7  Alfacyp 3.00
```

To variable: `type` og `org`. Datatyper? Responsvariabel? Forklarende variabel?

Modelskema


Responsvariabel?
kontinuert
Antal forklarende variable?
0
1-stikprøve T-test
1
Forklarende variabel?
kategorisk
Ensidet ANOVA / 2-stikprøve T-test
kontinuert
Sammenhæng?
lineær
Lineær regression
krum
Kvadratisk regression
2
Forklarende variable?
to kategoriske
Tosidet ANOVA evt. med vekselvirkning
kategorisk, kontinuert
Flere rette linier
to kontinuerte
Multipel regression
flere
Lineær normal model
kategorisk
Antal forklarende variable?
0
Binomialmodel
1
Antalstabel / to proportioner

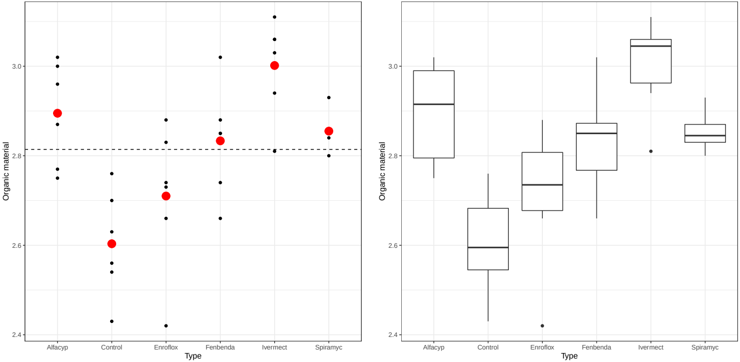
Hvorfor hedder det ensidet variansanalyse?

- **Ensidet:** Fordi der kun er en enkelt forklarende variabel
- **Variansanalyse:** Fordi forskelle mellem grupper påvises ved at sammenligne forskellige kilder til variation

  Variansanalyse = Analysis of variance = ANOVA.

I behøver ikke læse detaljerne i bogen nu. Vi vender tilbage senere...

Hvordan ser data ud?



- Hvad kan vi se?
- Kan vi konkludere at der er forskel på grupperne?

Between-group og within-group variation

Alle observationer er ikke ens! Men hvorfor ikke?

- Fordi der (potentielt) er forskel på behandlingerne $\rightarrow$ **between-group variation**
- Fordi der er biologisk variation, ikke-ens respons selv hvis gødningen behandles ens $\rightarrow$ **within-group variation**

Between-group og within-group variation

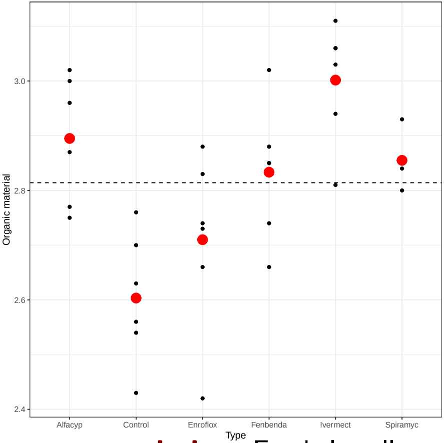
Alle observationer er ikke ens! Men hvorfor ikke?

- Fordi der (potentielt) er forskel på behandlingerne $\rightarrow$ **between-group variation**
- Fordi der er biologisk variation, ikke-ens respons selv hvis gødningen behandles ens $\rightarrow$ **within-group variation**

Hvis between-group variation er stor ift. within-group variation, er det tegn på at der er forskel på grupperne.

Der er formler i bogen, for $\mathrm{SS}_{\text{between}}$ og $\mathrm{SS}_{\text{within}}$ i bogen, men det er vigtigere at forstå den grafiske betydning.

Between-group og within-group variation



- **Between-group variation:** Forskel mellem de forskellige grupper. Gruppegennemsnit vs totalgennemsnit.
- **Within-group variation:** Forskel mellem obs. fra samme gruppe. Punkter vs gruppegennemsnit

Gruppegennemsnit og -spredninger

Gruppegennemsnit (og -spredninger) er vigtige:

Behandling	n_j	$\bar{y}_j$	s_j
Control	6	2.603	0.119
α-cyperm.	6	2.895	0.117
Enrofloxacin	6	2.710	0.162
Fenbendaz.	6	2.833	0.124
Ivermectin	6	3.002	0.109
Spiramycin	4	2.855	0.054

Gruppegennemsnit og -spredninger

Gruppegennemsnit (og -spredninger) er vigtige:

Behandling	n_j	$\bar{y}_j$	s_j
Control	6	2.603	0.119
α-cyperm.	6	2.895	0.117
Enrofloxacin	6	2.710	0.162
Fenbendaz.	6	2.833	0.124
Ivermectin	6	3.002	0.109
Spiramycin	4	2.855	0.054

Gennemsnittene kan beregnes i R på følgende måde:

```
data(antibio)
lm(org ~ type-1, data=antibio)
```

Hvad mon der sker hvis vi ikke skriver −1? Se opgave HS.4!

Usikkerhed

Gennemsnittene er **estimater for populationsgennemsnit**, dvs. gennemsnit af responsen hvis vi testede behandlingerne på alle kvier i verden.

Usikkerhed

Gennemsnittene er **estimater for populationsgennemsnit**, dvs. gennemsnit af responsen hvis vi testede behandlingerne på alle kvier i verden.

Har endnu intet sagt om usikkerheden på gennemsnittene:

- Hvor meget kan vi stole på estimaterne?
- Hvor meget anderledes kunne estimaterne blive hvis vi kiggede på andre kvier fra samme population?
- Er der forskel på behandlingerne?

Coming up: Standard errors, konfidensintervaller, hypotesetest, prædiktionsintervaller, modelkontrol.

Korrelationskoefficient (linear association)

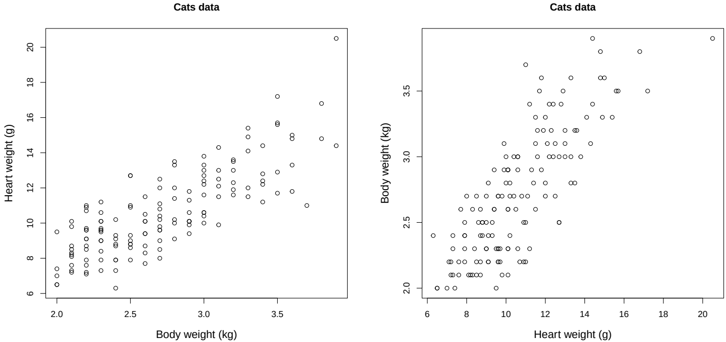
Sammenhæng (association)

Ofte indsamles data bestående af **par (x, y) af kvantitative, kontinuerte variable** med henblik på at undersøge om der er sammenhæng ml. x og y.

Hvad mener vi med **sammenhæng** (eng: association)?

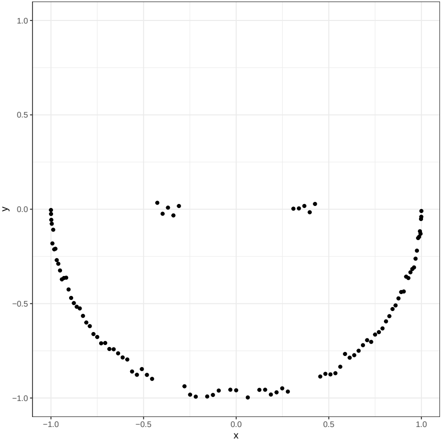
- Intuitivt/visuelt $\rightarrow$ se på scatterplot
- Mål for sammenhæng $\rightarrow$ **korrelationskoefficient**
- Hvordan kan vi udnytte sammenhæng $\rightarrow$ prædiktion

Kropsvægt og hjertevægt for 144 katte



Overvej: Hvorfor tænker vi straks, at der ses en klar sammenhæng ml. kropsvægt og hjertevægt?

Er der en sammenhæng?



Overvej: Prøv at argumentere både for og imod at der er en sammenhæng ml. x og y?

Korrelationskoefficienten

Korrelationskoefficienten måler graden af **lineær sammenhæng** mellem x og y:

$$\hat{\rho} = \frac{\frac{1}{n}\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\mathrm{sd}_x \cdot \mathrm{sd}_y}$$

(Kan tænke på $\hat{\rho}$ som hældningen i en lineær regression hvor man bruger standardiserede versioner af x og y.)

Korrelationskoefficienten

Korrelationskoefficienten måler graden af **lineær sammenhæng** mellem x og y:

$$\hat{\rho} = \frac{\frac{1}{n}\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\mathrm{sd}_x \cdot \mathrm{sd}_y}$$

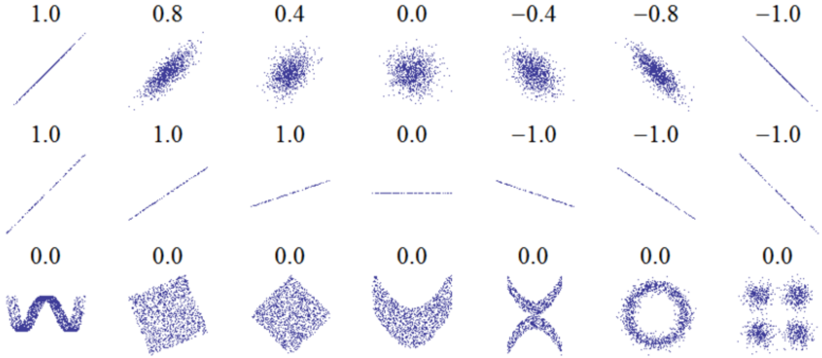
(Kan tænke på $\hat{\rho}$ som hældningen i en lineær regression hvor man bruger standardiserede versioner af x og y.)

Korrelationskoefficienten er

- altid mellem -1 og $+1$
- 0 hvis der ikke er nogen (lineær) information om y i x, eller omvendt
- ± 1 hvis observationerne ligger perfekt på en linje med positiv/negativ hældning

Intuition: Måler om punkter over gennemsnit for x har en lige så stor tendens til at ligge over/under gennemsnit for y?

Korrelationskoefficienten: eksempler



Sammenhæng, korrelation eller effekt?

Sammenhæng: kendskab til x forbedrer muligheder for at udtale os om y (eller omvendt!).

Korrelation (=lineær association) *væsentlig* forskellig fra 0: vi kan bruge lineær funktion til at udtale os om y på baggrund af x (eller omvendt!)

Ved **lineær regression** forsøger man at beskrive y ud fra x ved en lineær funktion

$$a + b \cdot x.$$

Kræver valg af **respons** y og **forklarende variabel** x.

Mere skal til for at konkludere at x har **(kausal) effekt** på y.

Lineær regression

Eksempel: Kattes krops- og hjertevægt

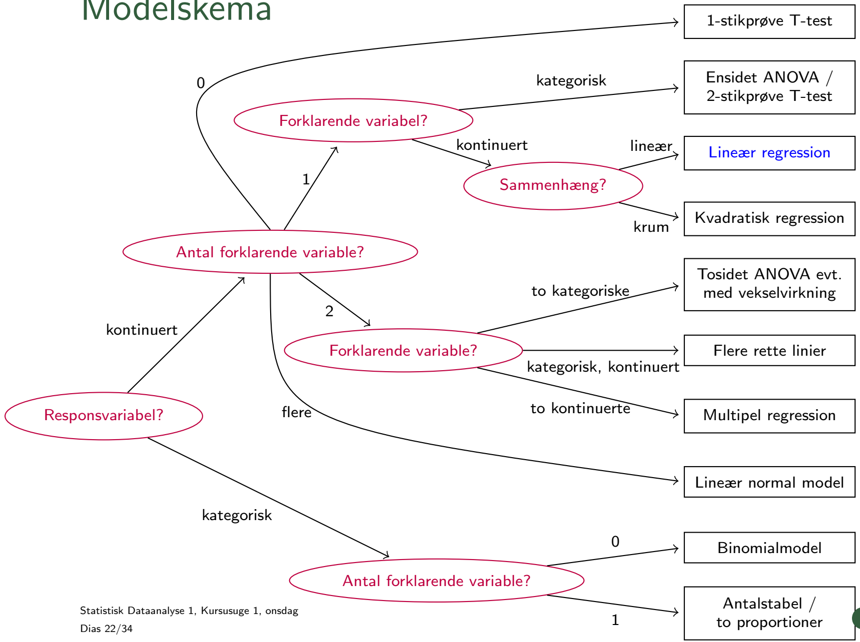
Data: Kropsvægt i kg, vægt af hjerte i gram for 144 katte. Glem alt om kattenes køn i dag.

Ønsker at **prædiktere** (forudsige) hjertevægt udfra kropsvægt: Brug

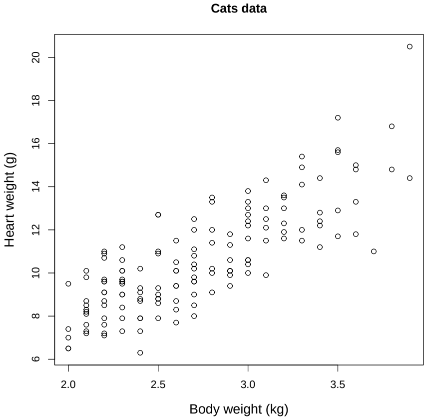
- **Hwt** som **responsvariabel**
- **Bwt** som **forklarende variabel**

Overvej: Hvorfor virker det mest naturligt med x som forklarende (også kaldet **uafhængig**) variabel?

Modelskema


Responsvariabel?
kontinuert
kategorisk
Antal forklarende variable?
0
1
2
flere
1-stikprøve T-test
Forklarende variabel?
kategorisk
kontinuert
Ensidet ANOVA / 2-stikprøve T-test
Sammenhæng?
lineær
krum
Lineær regression
Kvadratisk regression
Forklarende variable?
to kategoriske
kategorisk, kontinuert
to kontinuerte
Tosidet ANOVA evt. med vekselvirkning
Flere rette linier
Multipel regression
Lineær normal model
Antal forklarende variable?
0
1
Binomialmodel
Antalstabel / to proportioner

Giver lineær regression overhovedet mening her?



Det ser faktisk ud til at punkterne varierer omkring en ret linie, så lineær regression giver mening.

Lineær regression

Ligning for ret linie med skæring (intercept) α og hældning (slope) β:

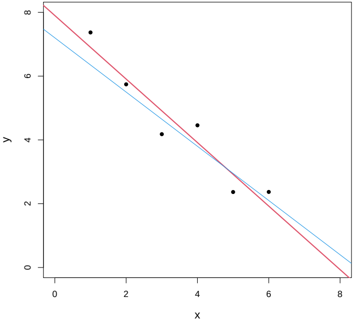
$$y = \alpha + \beta \cdot x$$

Vores opgave er at finde den rette linie der "'passer bedst"' med data.

Altså: Find de værdier af α og β der passer bedst.

Legetøjsdata

Dette er nogle andre data! To gode forslag til rette linier, men hvilken linie er bedst?

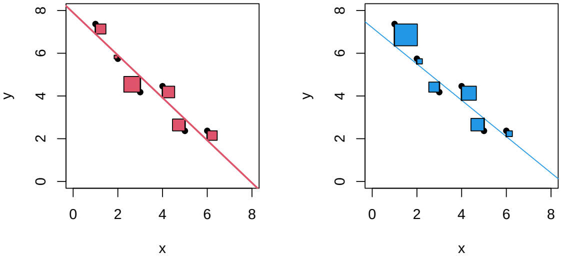


Bliver nødt til at have en objektiv metode: **Mindste kvadraters metode (least squares)**

Mindste kvadraters metode (least squares)

For alle rette linier i hele verden:

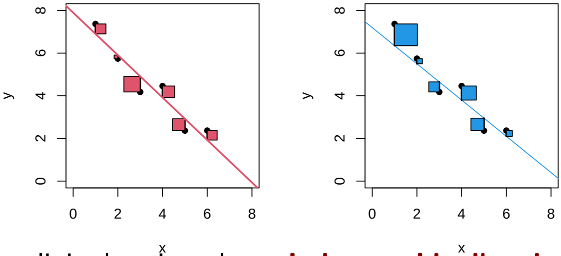
- Lodret afstand mellem punkter og linie, $r_i = y_i - \alpha - \beta x_i$
- Kvadrér disse afstande, r_i^2, og beregn $r_1^2 + \cdots + r_n^2$



Mindste kvadraters metode (least squares)

For alle rette linier i hele verden:

- Lodret afstand mellem punkter og linie, $r_i = y_i - \alpha - \beta x_i$
- Kvadrér disse afstande, r_i^2, og beregn $r_1^2 + \cdots + r_n^2$



Find den linie der giver den **mindste residualkvadratsum.**

Formlerne

Det viser sig at den bedste rette linie er givet ved følgende formler:

$$\begin{aligned}\hat{\beta} &= \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \\ \hat{\alpha} &= \bar{y} - \hat{\beta} \cdot \bar{x}\end{aligned}$$

hvor $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ og $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$ er gennemsnittene.

Formlerne

Det viser sig at den bedste rette linie er givet ved følgende formler:

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta} \cdot \bar{x}$$

hvor $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ og $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$ er gennemsnittene.

Bemærk:

- Fortegnet på $\hat{\beta}$
- Regressionslinien går gennem $(\bar{x}, \bar{y})$

I praksis skal vi ikke bruge formlerne — det lader vi R klare!

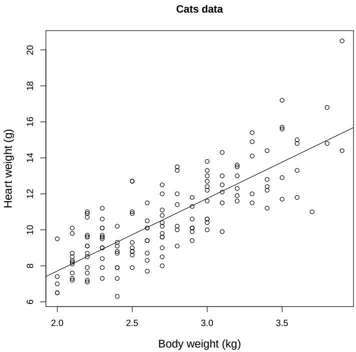
R

```
library(MASS)
data(cats)
plot(Hwt ~ Bwt, data=cats)
lm(Hwt ~ Bwt, data=cats)

##
## Call:
## lm(formula = Hwt ~ Bwt, data = cats)
##
## Coefficients:
## (Intercept)          Bwt
##     -0.3567       4.0341

abline(-0.3567, 4.0341)
```

Eksempel: Kattes krops- og hjertevægt

Regressionslinien — den bedste rette linie — for kattene:

$$\text{Hwt} = -0.3567 + 4.0341 \cdot \text{Bwt}$$



Fortolkning af parametrene?

Fortolkning!

Mindste kvadraters metode giver estimeret regressionslinie:

$$y = \hat{\alpha} + \hat{\beta} \cdot x$$

Fortolkning!

Mindste kvadraters metode giver estimeret regressionslinie:

$$y = \hat{\alpha} + \hat{\beta} \cdot x$$

Fortolkning:

- Model/linjen fortæller, hvad vi vil forvente for et givet x:

$$\hat{y} = \hat{\alpha} + \hat{\beta} \cdot x$$

- $\hat{\beta}$: For to enheder med en forskel i x-værdi på Δx, vil vi forvente en forskel på $\Delta y = \hat{\beta} \cdot \Delta x$.
- $\hat{\alpha}$: den forventede y-værdi for $x = 0$ (hvis det giver mening).

Advarsel: pas på med at

- ekstrapolere til ekstreme x-værdier: $\hat{\alpha} + \hat{\cdot}\beta 10$
- udtale dig om den forventede ændring i hjertevægt, hvis vi feder alle katte op til de har taget 1 kg på

Usikkerhed

Har endnu intet sagt om usikkerheden på estimaterne!

- Hvor meget kan vi stole på estimaterne?
- Hvor meget anderledes kunne estimaterne blive hvis vi kiggede på andre katte fra samme population?
- Er der overhovedet en sammenhæng?

Coming up: Standard errors, konfidensintervaller, hypotesetest, prædiktionsintervaller, modelkontrol.

Brug af lineær regression

Hvornår kan vi bruge lineær regression?

- Begge variable skal være **kvantitative**
- Der skal være et **"'naturligt"' valg af hhv. respons og forklarende variabel** (hvad er x hhv. y?)
- Der skal være **tilnærmelsesvis lineær sammenhæng**.
- Et par antagelser mere som vi vender tilbage til...
- Pas på hvis der er ekstremt store/små værdier af x eller y. Kan trække meget i linien.

Brug af lineær regression

Hvornår kan vi bruge lineær regression?

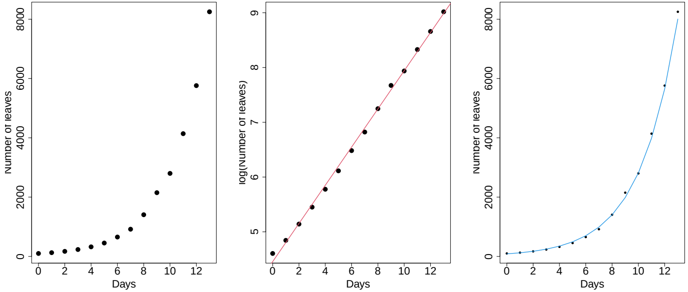
- Begge variable skal være **kvantitative**
- Der skal være et **"'naturligt"' valg af hhv. respons og forklarende variabel** (hvad er x hhv. y?)
- Der skal være **tilnærmelsesvis lineær sammenhæng**.
- Et par antagelser mere som vi vender tilbage til...
- Pas på hvis der er ekstremt store/små værdier af x eller y. Kan trække meget i linien.

Det er **forbudt at fortolke regressionslinien (langt) udenfor observationsintervallet** (ekstrapolation).

Hvad hvis sammenhængen ikke er lineær?

Sommetider kan man transformere sig til lineær sammenhæng.

Eksempel 2.4: Hvis (x, y) sammenhængen er eksponentiel, så er $(x, \log(y))$-sammenhængen lineær.



Opsummering – til eget brug

- Hvornår er det rimeligt at benytte lineær regression?
- Hvad er fortolkningen af parametrene i en lineær regression?
- Hvad er princippet i at bestemme den bedste rette linie?
- Hvad måler korrelationskoefficienten?
- Hvad er formålet i en ensidet variansanalyse?
- Hvilke typer variation er der når vi har data fra flere grupper?
- Kan vi konkludere om der er forskel på grupperne på baggrund af plots og/eller tabel med gruppegennemsnit?