# Linear Regression Analysis (2): More Than One Covariate

信賴區間-用迴歸方式知道一群人的平均體重預測區間-

杜裕康

國立台灣大學公共衛生學院流行病學與預防醫學研究所

# Transformation in Vector Geometry for Linear Models

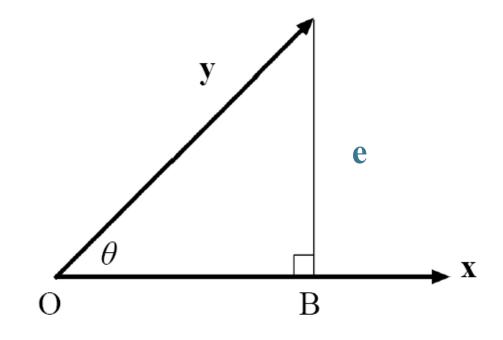
- 隨機變數 x 和 y 經轉換後,可以用 n 維歐幾里得空間中的兩個向量 x 和 y 來表示.
- 向量的長度是其標準差 (standard deviation)

$$X_i^{new} = \frac{[X_i^{old} - \bar{X}]}{\sqrt{n-1}}$$

#### **Basics of vector geometry**

- 經由剛才的轉換後, y對 x 的 迴歸,可以想像成 y 對 x 在 向量空間中的垂直投影
- 而x的迴歸係數, $b_x$ ,是y在x上投影 $\overline{OB}$ 的長度和x的長度的比例(ratio)

• 
$$b_x = \frac{\|\overrightarrow{oB}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{\|\mathbf{y}\|\cos\theta}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{\|\mathbf{y}\|\cos\theta}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|\cos(\theta)}{\|\mathbf{x}\|^2} = \frac{\cos(x,y)}{Var(x)} = \frac{\mathbf{y}^T\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|^2}$$



OB is the orthogonal projection of y on x

• 當使用迴歸分析時, Y的變異亦可像在作 ANOVA 時, 分解成兩部分:

$$\Sigma(Y_i - \overline{Y})^2 = \Sigma(Y_i - \widehat{Y}_i)^2 + \Sigma(\widehat{Y}_i - \overline{Y})^2$$

 $\hat{Y}_i$ :  $Y_i$  的迴歸分析估計值;  $\bar{Y}$ :  $Y_i$  的算術平均值

• 反應變數 Y 的總變異用  $\Sigma(Y_i - \bar{Y})^2$  來表示,稱為 total sum of squares (SST) ,定義為:

$$SST = \sum (Y_i - \overline{Y})^2$$

• 第一部分代表觀測值和估計值的差異,也就是Y的變異程度裏不能被迴歸分析解釋的部分。它的平方和稱為 error sum of squares (SSE):

$$SSE = \sum (Y_i - \widehat{Y}_i)^2$$

• SST和 SSE 的差別稱為 regression sum of squares (SSR), 就是估計值和平均值的差異的平方和:

$$SSR = SST - SSE = \sum (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$$

• 所以: *SST* = *SSE* + *SSR* 

- SST的分解也伴隨了自由度(degrees of freedom)的分配
- SST 總共有 n-1 個自由度,而 SSR 在簡單線性迴歸裏有 1 個自由度,所以 SSE 有 n-2 個自由度。
- 所以大多數的統計軟體也會把迴歸分析的結果用接下來的 ANOVA 表格呈現:

The error mean square,

$$MSE = \frac{SSE}{n-2}$$

Source of Variation	SS	df	MS	F Statistic	p Value
Regression Error		$\frac{1}{n-2}$	MSR = SSR/1 $MSE = SSE/(n-2)$	F = MSR/MSE	p
Total	SST	n-1			

$$F = t^2$$
 with  $(1, n-2)$  degrees of freedom

## R-squared R平方後一定比原R小

• R<sup>2</sup> (判定係數)is the percentage of variance in y explained by x:

$$R^{2} = 1 - \left[ \frac{\sum (Y_{i} - (a + bX_{i}))^{2}}{\sum (Y_{i} - \overline{Y})^{2}} \right] = 1 - \left[ \frac{\sum (Y_{i} - \widehat{Y})^{2}}{\sum (Y_{i} - \overline{Y})^{2}} \right] = \frac{SSR}{SST}$$

- So R<sup>2</sup> is between 0 and 1
- Adjusted R<sup>2</sup> takes into account the number of explanatory variables in the model:

$$R_{adj}^{2} = 1 - \left[ \frac{\sum (Y_{i} - (a + bX_{i}))^{2} / (n - k - 1)}{\sum (Y_{i} - \bar{Y})^{2} / (n - 1)} \right]$$

#### Estimation of Parameters 算截距下的標準誤

• The standard errors for the estimated  $a(\hat{a})$ :

$$se(\hat{a}) = s_{y|x} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{X}^2}{\sum (X_i - \bar{X})^2}}$$

• The se for the estimated  $b(\hat{b})$ :

$$se(\hat{b}) = \frac{S_{y|x}}{\sqrt{\sum(X_i - \bar{X})^2}}$$
若上面數值不變,下方平方和(數值)越大,斜率就越精準

$$S_{y|x} = \sqrt{\frac{SSE}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum(Y_i - (a+bX_i))^2}{n-2}}$$

#### **Estimation of Parameters**

• 對迴歸係數 b 作統計檢定:

$$t = \frac{\hat{b}}{se_{\hat{b}}}$$
用T檢定

服從 t-distribution with n-2 degrees of freedom

虛無假設:b=0

雙尾檢定

對立假設: $b \neq 0$ 

95% confidence interval:

95% CI = b - 1.96\*se to b + 1.96\*se, when  $n \to \infty$ 

## Y的信賴區間

- 當 $X \gg x$ ,Y的期望值 $\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x$
- 而我們可以計算Y的期望值 $\hat{y}$ 的信賴區間
- ŷ的標準誤(standard error)為:

X,不是固定的,要帶入不同的身高

$$se(\hat{y}) = S_{y|x} \sqrt{\left[\frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{X})^2}{\sum (X_i - \bar{X})^2}\right]}$$

因為信賴區間受 x 的影響,所以不是固定的 距離 X 值的信賴區間越大 中間大,兩邊呈嗽叭狀

## Y的預測區間看資料的分佈

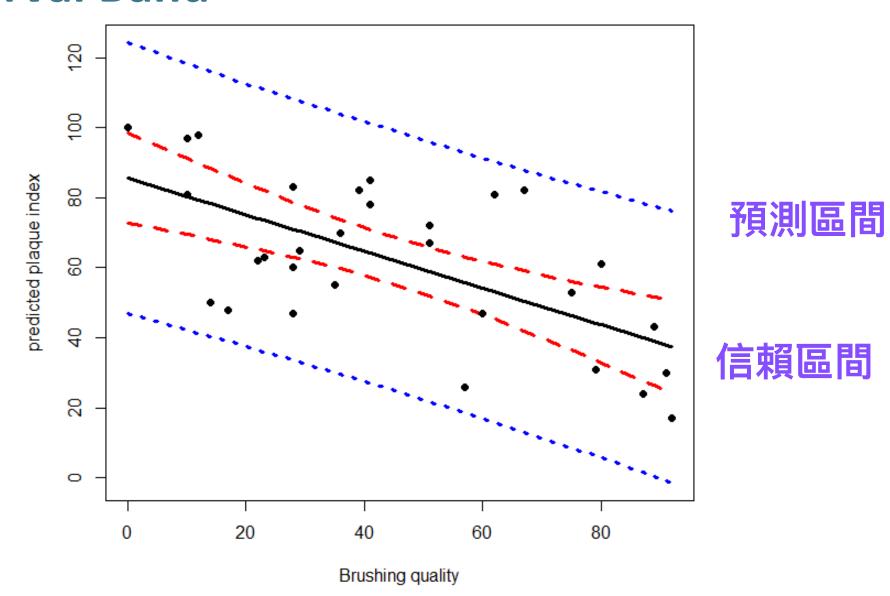
• 假設我們從母群體中抽出一個 $X \ge x$ 的個体體,它的Y值的預測值為 $\tilde{y}$ :

$$\tilde{y} = \hat{a} + \hat{b}x$$

- 而 $\tilde{y}$ 的標準誤(standard error)為:

$$se(\tilde{y}) = S_{y|x} \sqrt{\left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{X})^2}{\sum (X_i - \bar{X})^2}\right]}$$

# **Confidence Interval and Prediction Interval Band**



#### **Presentation**

- 呈現迴歸分析的結果時,應報告截距項和迴歸係 數的值和它們的信賴區間
- 報告它們的 p 值(記得截距項和迴歸係數的虛無假設為何?)
- 通常我們在意的是迴歸係數,也就是斜率
- R<sup>2</sup> (判定係數)是指依變項 Y 的變異程度能被解釋變項 X 解釋的百分比。

R平方越大,越能解釋變項X的百分比

## Multiple Regression (複迴歸)

簡單迴歸和複迴歸之間的最大差別,是在複迴歸裏,有超過一個以上的解釋變數,

$$Y = a + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_p X_p + e$$

而我們希望用較多的解釋變數來說明或預測 Y,
 以增加模型的解釋能力,例如 R<sup>2</sup>

#### **OLS Multiple Regression**

• For  $Y = a + \sum b_j X_j + e$ , OLS regression tries to minimize the error sum of squares:

$$\sum \left(Y_i - \left(a + \sum b_j X_{ij}\right)\right)^2$$

• To obtain  $b_j$ , we need a little bit of linear algebra

$$y = Xb$$

$$X^{T}y = X^{T}Xb$$

$$(X^{T}X)^{-1}X^{T}y = b$$

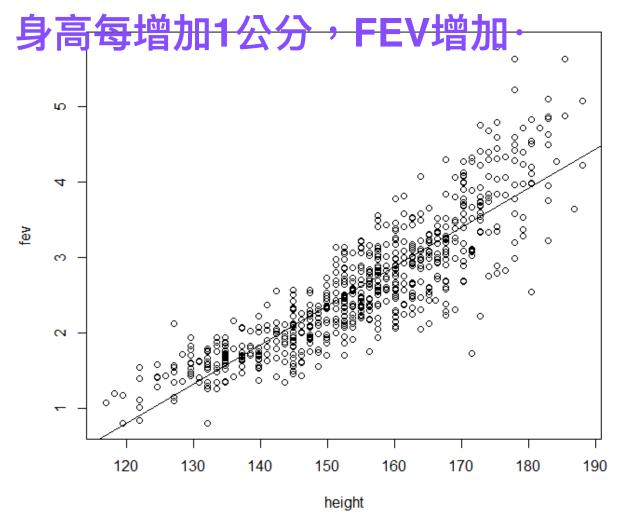
用舉証的方式證明

## Example: 654個 3 到 18 歲的兒童和青少年身高 (height)和最大呼氣量的關係:

fev	height
1.708	144.78
1.724	171.45
1.72	138.43
1.558	134.62
1.895	144.78
2.336	154.94
1.919	147.32
1.415	142.24
1.987	148.59
1.942	152.4

**FEV: Forced Expiratory Volume** 

fev = -5.43 + 0.05 height + e

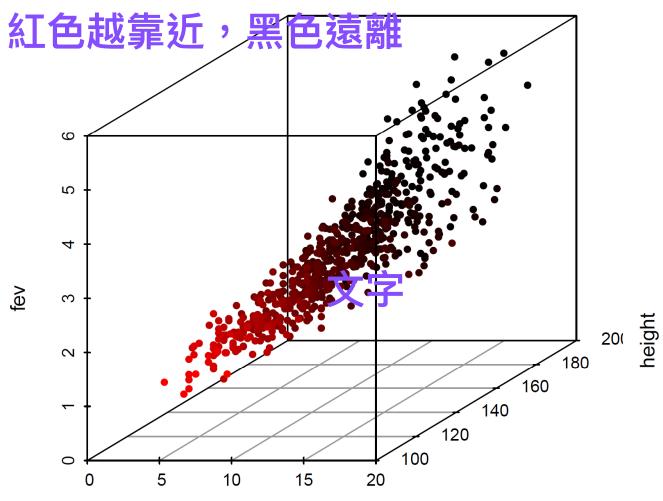


• 現在我們想知道年齡(age) 、身高(height)和最大呼氣量(fev)的關係:

$$fev = b_0 + b_1 height + b_2 age + e$$

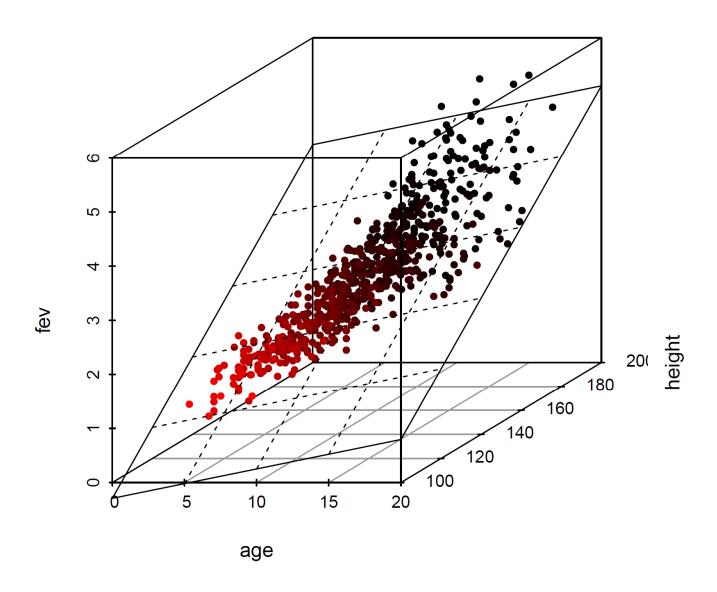
fev	height	age
1.708	144.78	9
1.724	171.45	8
1.72	138.43	7
1.558	134.62	9
1.895	144.78	9
2.336	154.94	8
1.919	年齡戦大	,FEV越大
1.415	142.24	6
1.987	148.59	8
1.942	152.4	9
1.602	134.62	6
1.735	137.16	8
2.193	148.59	8
2.118	153.67	8
2.258	147.32	8

#### fev = age + height

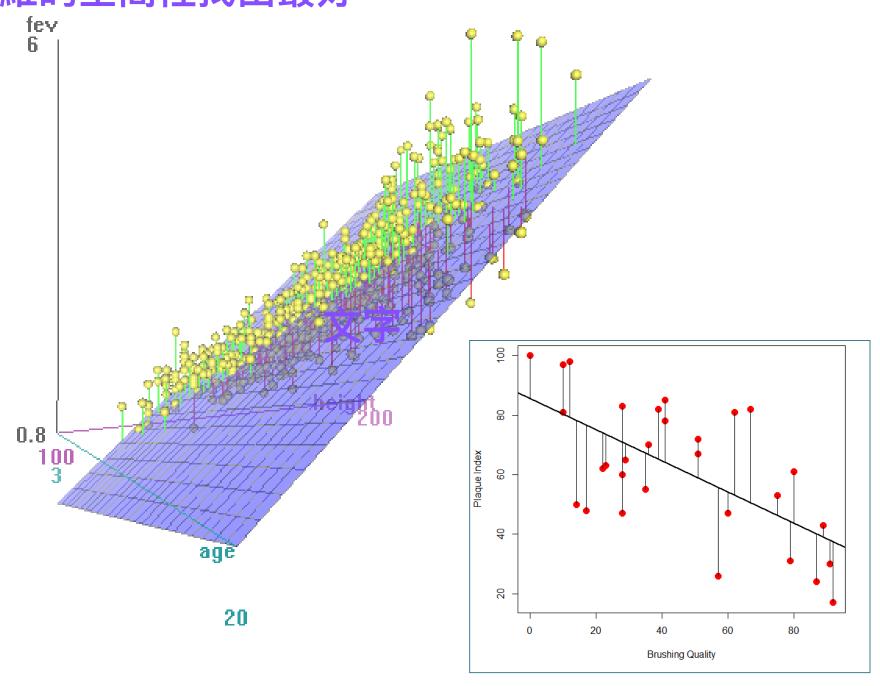


年龄越大,FEV越太

#### fev = age + height



### 點到平面的距離之總和 在四維的空間裡找出最好



#### R command

#### 當一個人年齡 / 身高為0時其FEV為-4.61

> lm1<-lm(fev~height+age,data=fev)</pre> > summary(lm1) ca如果身高都相同,我比你多一歲身高多0.043公分,其FEV會增加 lm(formula = fev ~ height + age, data = fev) Residuals: Min 1Q Median 3Q Max -1.50533 - 0.25657 - 0.01184 0.24575 2.01914Coefficients: Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) -4.610466 0.224271 -20.558 < 2e-16 \*\*\* height 0.043194 0.001857 23.263 < 2e-16 \*\*\* age 0.054281 0.009106 5.961 4.11e-09 \*\*\* Signif. codes: 0 \\*\*\*' 0.001 \\*\*' 0.01 \\*' 0.05 \.' 0.1 \' 1 Residual standard error: 0.4197 on 651 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.7664, Adjusted R-squared: 0.7657 F-statistic: 1068 on 2 and 651 DF, p-value: < 2.2e-16

• 還記得 SST (total sum of squares) 定義為:

$$SST = \sum (Y_i - \overline{Y})^2$$

• 而 *SSR* (regression sum of squares) · 也就是 Y 的變異裏可以被迴歸分析解釋的部分:

$$SSR = \sum (\widehat{Y}_i - \overline{Y})^2$$

• 而SSE (error sum of squares), 是Y的變異裏不能 被迴歸分析解釋的部分,也就是觀測值和估計值 之間的差別:

$$SSE = \sum (Y_i - \widehat{Y}_i)^2$$

- 之前提到過:*SST* = *SSE* + *SSR*
- SST 的分解也伴隨了自由度(degrees of freedom) 的分配
- SST 總共有 n-1 個自由度,而 SSR 在複迴歸裏有 k 個自由度(k 是解釋變數的數目),所以 SSE 有 n-k-1 個自由度。
- 統計軟體也會把複迴歸分析的結果用接下來的 ANOVA 表格呈現:

Source of Variation	SS	df	MS	F Statistic	p Value
Regression Error			MSR = SSR/k $MSE = SSE/(n - k - 1)$	F = MSR/MSE	p
Total	SST	n - 1			

• R<sup>2</sup> (判定係數) is the percentage of variance in y explained by x:

$$R^2 = \frac{SSR}{SST}$$

• So R<sup>2</sup> is between 0 and 1

#### 迴歸一樣可以用ANOVA來解釋

#### Analysis of Variance Table

```
Response: fev

Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)

height 1 369.99 369.99 2100.380 < 2.2e-16 ***

age 1 6.26 6.26 35.532 4.112e-09 ***

Residuals 651 114.67 0.18
```

在調整年龄(其他變數)之後,每增加1歲FEV增加

$$R^2 = \frac{369.99 + 6.26}{369.99 + 6.26 + 114.67} = 0.7664 = 76.64\%$$

#### Interpretation

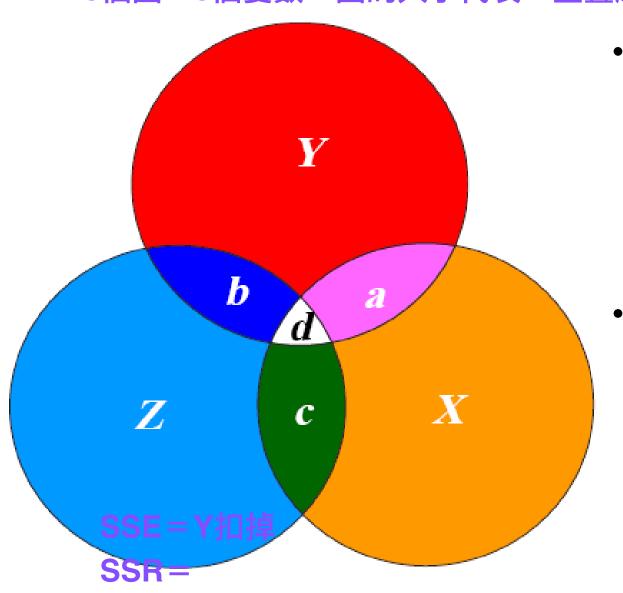
$$fev = -4.61 + 0.043height + 0.054age + e$$
  
 $\widehat{fev} = -4.61 + 0.043height + 0.054age$ 

- 當調整年齡之後,身高每增加1公分,最大呼氣量增加0.043公升
- 當調整身高之後,年齡每增加1歲,最大呼氣量增加0.054公升
- 截距項 -4.61 要怎麼解釋?



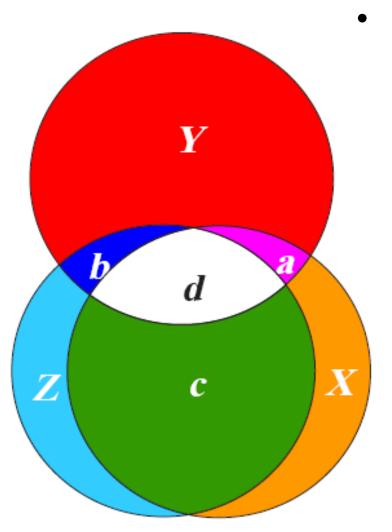
#### **Venn Diagram**

3個圈=3個變數,圈的大小代表,重疊越大,其關係越緊密



- 當Y對X和Z做迴歸
  分析時,X的迴歸係數
  取決於X對Y的獨立解
  釋,也就是考慮了其它
  變數對Y的影響之後,
  X對Y的獨立影響。
- 以左圖為例:a和d是Y可以被X解釋的部分,但是只有a是X對Y的獨立影響

#### **Venn Diagram**



所以當 x 和 Z 對 y 的解釋重複的部份很大的時候,x 對 y 的獨立解釋的部份,有可能變得很小。也是加入Z之後對x的迴歸係數造成很大的改變。

單看XYZ其貢獻不大,但一起看就很大

# Standardized Regression Coefficient (標準化迴歸係數)

- 當所有的變數都被中心化(centered)和縮放(scaled) 成變異數成為 1 的時候, 所得到的迴歸係數。
- 有些人喜歡用標準化迴歸係數來詮釋依變項和解 釋變項之間關係的強度
- · 當只有一個解釋變項時,標準化迴歸係數就等於相關係數,所以它的範圍在-1 和1 之間。



# Standardized Regression Coefficient (標準化迴歸係數)

- 當有超過一個以上的解釋變項時,標準化迴歸係數就不會等於相關係數,所以它的範圍不會在-1和1之間。
- 要得到標準化迴歸係數(通常用希臘字母beta) , 可在做迴歸分析時利用 R 的 scale 函數

會把系數標準化

```
> lm2<-lm(scale(fev)~scale(height)+scale(age),data=fev)
> summary(lm2)
Call:
lm(formula = scale(fev) ~ scale(height) + scale(age), data =
fev)
Residuals:
    Min 10 Median 30 Max
-1.73613 -0.29591 -0.01366 0.28343 2.32872
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.986e-16 1.893e-02 0.000
scale(height) 7.217e-01 3.102e-02 23.263 < 2e-16 ***
scale(age) 1.849e-01 3.102e-02 5.961 4.11e-09 ***
Signif. codes: 0 \***' 0.001 \**' 0.01 \*' 0.05 \.' 0.1 \' 1
Residual standard error: 0.4841 on 651 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7664, Adjusted R-squared: 0.7657
F-statistic: 1068 on 2 and 651 DF, p-value: < 2.2e-16
```

# Standardized Regression Coefficient (標準化迴歸係數)

- 身高和年齡的標準化迴歸係數分別是 0.722 和 0.185
- 截距項為 0
- 標準化不影響 significance testing, model R<sup>2</sup>, etc.

# Categorical Explanatory Variables (類別解釋變項)

- 像是性別和種族之類的變項屬於類別解釋變項
- 在進行迴歸分析時,我們利用虛擬變項(dummy variables)來代表類別解釋變項
- 例如:

Subjects	Women	Men
1	1	0
2	0	1
3	0	1
4	1	0

## Categorical Explanatory Variables (類別解釋變項) <sub>有K個類別</sub>,我們需要K-1個虛擬變項

• For k categories, we need k-1 dummies

fev	height	age	gender
1.708	144.78	9	0
1.724	171.45	8	0
1.72	138.43	7	0
1.558	134.62	9	1
1.895	144.78	9	1
2.336	154.94	8	0
1.919	147.32	6	0
1.415	142.24	6	0
1.987	148.59	8	0
1.942	152.4	9	0
1.602	134.62	6	0
1.735	137.16	8	1
2.193	148.59	8	0
2.118	153.67	8	1
2.258	147.32	8	1

# 類別解釋變項

- 假設現在我們想知道性別(gender)和最大呼氣量 (fev)的關係,其中男生設為1,女生設為0
- 模型可以寫成:  $fev = b_0 + b_1 gender + e$ 所有女性的FEV為2.45

```
> lm1<-lm(fev~gender, data=fev)
GENder, 男女差0.36
```

P值夠小-》有意義

#### Coefficients:

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 2.45117 0.04759 51.505 < 2e-16 ***
     gender
Signif. codes: 0 \***' 0.001 \**' 0.01 \*' 0.05 \.' 0.1 \' 1
```

```
Residual standard error: 0.8487 on 652 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.04344, Adjusted R-squared: 0.04197
F-statistic: 29.61 on 1 and 652 DF, p-value: 7.496e-08
```

# 類別解釋變項

- 截距項  $b_0 = 2.45$  代表女生最大呼氣量的平均值
- *gender* 的迴歸係數  $b_0 = 0.36$  代表所有男生最大呼氣量的平均值和女生最大呼氣量的平均值**的差 異**,這個差異達到統計上顯著,因為 p = 0.000000075

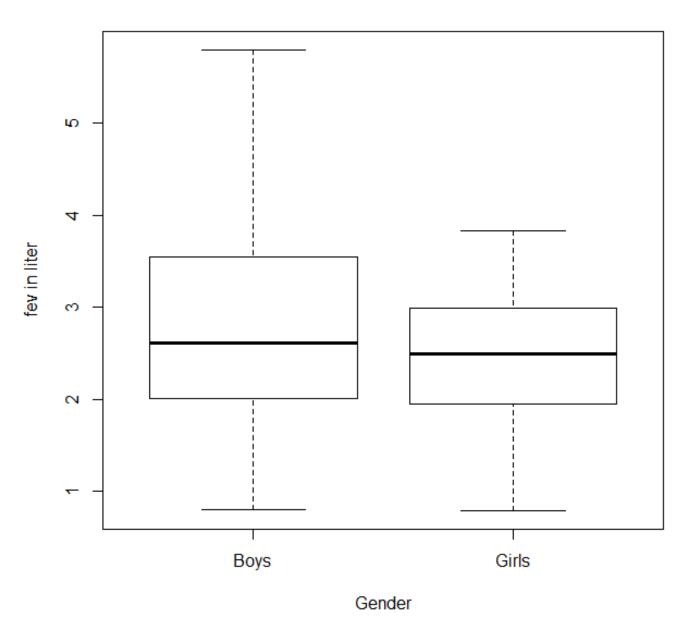
$$t = \frac{0.361}{0.066} = \boxed{5.441}$$

#### Coefficients:

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 2.45117 0.04759 51 505 < 2e-16 ***
gender 0.36128 0.06640 5.441 7.5e-08 ***
```

# **Boxplot**





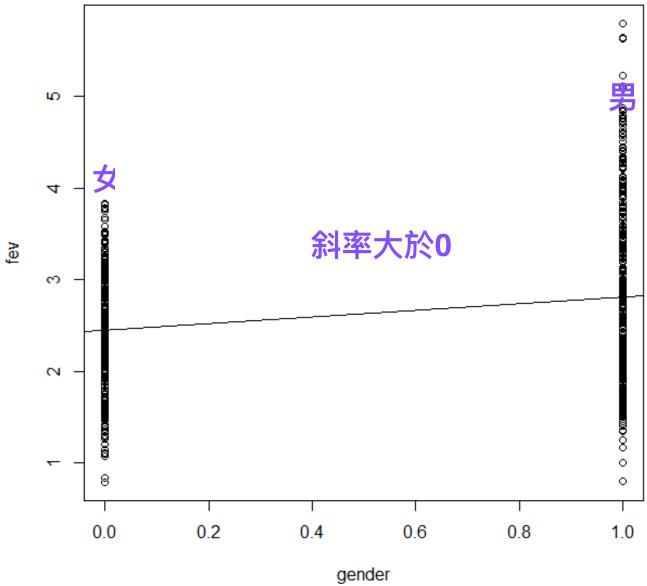
# t-test 和迴歸分析的關係

- 我們也可以用兩獨立樣本的 t 檢定來比較男生和 女生最大呼氣量平均值的差異,得到相同的結果
- > t.test(fev~gender, var.equal=T, data=fev)

```
Two Sample t-test
```

# t-test 和迴歸分析的關係

plot(fev~gender,data=fev, main="FEV")
abline(lm1)



- 假設現在我們把年齡分成三組:
  - -<6 "Preschool"</pre>
  - -7-12 "Primary"
  - ->12 "Secondary"
- · 然後看年齡組(agegp)和最大呼氣量(fev)的關係,

	fev	height	age	gender	smoking	g sex	agegp
1	1.708	144.780	9	0	0	Girls	Primary
2	1.724	171.450	8	0	0	Girls	Primary
3	1.720	138.430	7	0	0	Girls	Primary
4	1.558	134.620	9	1	0	Boys	Primary
5	1.895	144.780	9	1	0	Boys	Primary
6	2.336	154.940	8	0	0	Girls	Primary
7	1.919	147.320	6	0	0	Girls	Preschool
8	1.415	142.240	6	0	0	Girls	Preschool
9	1.987	148.590	8	0	0	Girls	Primary
10	1.942	152.400	9	0	0	Girls	Primary

# 虛擬變項

在進行迴歸分析時,我們利用虛擬變項(dummy variables)來代表 agegp

Subjects	age	agegp	agegp1	agegp2	agegp3
1	6	Preschool	1	0	0
2	7	Primary	0	1	0
3	12	Primary	0	1	0
4	14	Secondary	0	0	1
5	18	Secondary	0	0	1

- 在進行迴歸分析時,我們利用兩個虛擬變項 (dummy variables) 來代表年齡類別解釋變項
- 模型可以寫成:

```
fev = b_0 + b_1 agegp_2 + b_2 agegp_3 + e # R code: lm2 < -lm(fev \sim agegp, data = fev) summary(lm2)
```



#### Coefficients:

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)

(Intercept) 1.56274 0.07692 20.32 <2e-16 ***

agegpPrimary 1.00679 0.08302 12.13 <2e-16 ***

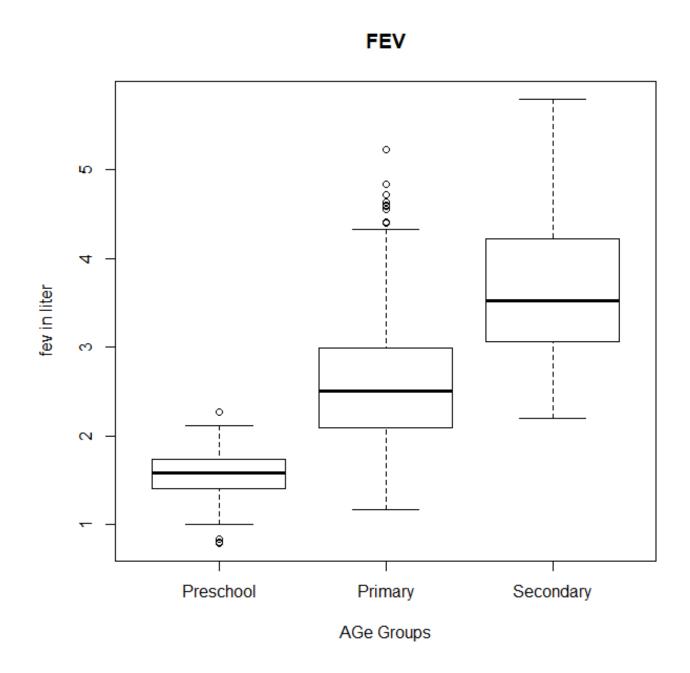
agegpSecondary 2.03669 0.09879 20.62 <2e-16 ***

---

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 0.6706 on 651 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.4037, Adjusted R-squared: 0.4019 F-statistic: 220.4 on 2 and 651 DF, p-value: < 2.2e-16
```

K-1所估計是差異,不是平均值



t-test 和 ANOVA 都算是 General Linear Model

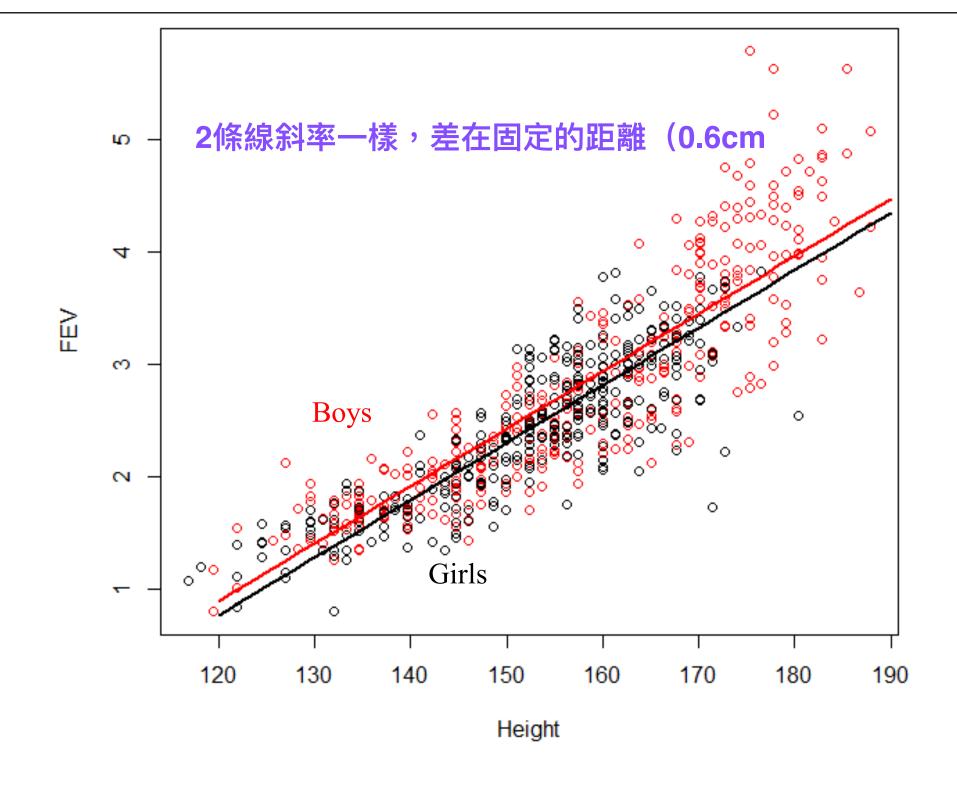
### 一個類別和一個連續解釋變項 共變因素分析

• 假設現在我們想知道身高(height)、性別(gender)和最大呼氣量(fev)的關係,其中男生設為1,女生設為0:

### Coefficients:

$$fev = -5.39 + 0.051 height + 0.125 gender + e$$

當身高為0時,只要是男生身高就比女生多0.6公分



這等於我們有兩個迴歸方程式,一個是針對男生,另 一個針對女生:

### 男生:

$$\widehat{fev} = -5.39 + 0.051 height + 0.125$$

女生:

$$\widehat{fev} = -5.39 + 0.051 height$$

兩者的差別是一個常數 0.125, 反映在兩條直線的截距不同。也就是說平均而言, 男生的最大呼氣量比同身高女生大 0.125 公升。

# 複迴歸

現在我們把身高、年齡、和性別都放到迴歸分析 模型裏:

$$fev = b_0 + b_1 height + b_2 age + b_3 gender$$

結果如下:

#### Coefficients:

Residual standard error: 0.4126 on 650 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.7746, Adjusted R-squared: 0.7736

# 複迴歸

$$fev = -4.45 + 0.04 height + 0.06 age + 0.16 gender$$

所以一個 15 歲、身高 170 公分的男孩,根據上面的模型,他的 fev 預測值為:

$$3.41 = -4.45 + 0.04 * 170 + 0.06 * 15 + 0.16$$

• 而一個 15 歲、身高 170 公分的女孩,根據上面的模型,她的 fev 預測值為:

$$3.25 = -4.45 + 0.04 * 170 + 0.06 * 15$$

# Assumptions for Multiple Linear Regression

- 解釋變數和反應變數之間的關係是直線的(linear)
  - 可以檢查殘差值對解釋變數的散佈圖 (scatterplot)
- 殘差值在解釋變數的任何一值之下都是服從常態 分佈
  - 可以檢查殘差值對解釋變數的散佈圖或殘差值 的 Q-Q plot

# Assumptions for Multiple Linear Regression

- 殘差值在解釋變數的任何一值之下的變異數 (variance)都是相同的。這叫做變異數恆定假設 ("constant variance" or "homoscedasticity")
  - 可以檢查殘差值對解釋變數或適配值(fitted values)的散佈圖
- 殘差值是各別獨立的

# **Height vs Residuals**

