Linear regresjon (enkel og multippel)

ISTx1003 Statistisk læring og Data Science

Stefanie Muff, Institutt for matematiske fag

November 1 og 5, 2021

Plan for i dag og fredag 12:15-13:00

- Læringsmål og plan for prosjektmodulen ISTx1003.
- De tre temaene i modulen:
  - regresjon
  - klassifikasjon og
  - klyngeananlyse
- Pensum og læringsressurser
- Prosjektoppgaven og Blackboard-informasjon
- Tema: Enkel og multippel lineær regresjon

Hvem er vi?

- **Studentene**: BIDATA og BDIGSEC, omtrent 250 studenter totalt.
- **Faglig ansvarlig** for innholdet i modulen er Stefanie Muff (stefanie.muff@ntnu.no).
- I **veilederteamet** (for prosjektet) inngår i tillegg
  - Trondheim: studentassistentene Simen, Simon og Philip, og øvingslærer Martin O. Berild
  - Gjøvik: Charles Curry ...
  - Ålesund: Siebe B. van Albada, ...

Hva er statistisk læring og data science?

- *Statistisk læring* inneholder stort sett alle metoder som hjelper oss å lære av data.
- *Data science* er et konsept for å forene statistikk, dataanalyse, informatikk og tilhørende metoder for å "forstå og analysere relle fenomener med data.

Læringsmål (av modulen)

Etter du har gjennomført denne modulen skal du kunne:

- forstå når du kan bruke regresjon, klassifikasjon og klyngeananlyse til å løse et ingeniørproblem
- kunne gjennomføre multippel lineær regresjon på et datasett
- bruke logistisk regresjon og nærmeste nabo for å utføre en klassifikasjonsoppgave
- bruke hierarkisk og k-means klyngeanalyse på et datasett, forstå begrepet avstandsmål
- og kunne kommunisere resultatene fra regresjon/klassifikasjon/klyngeanalyse til medstudenter og ingeniører
- bli en kritisk leser av resultater fra statistikk/maskinlæring/statistisk læring/data science/kunstig intelligens når disse rapporteres i media, og forstå om resultatene er realistiske ut fra informasjonen som gis
- kunne besvare prosjektoppgaven på en god måte!

Pensum og læringsressurser

Pensum er definert som "svarene på det du blir spurt om på prosjektoppgaven" og de kan du finne ved å bruke læringsressursene.

Alle ressurser er tilgjengelig her:

https://wiki.math.ntnu.no/istx1003/2021h/start

Tema Regresjon:

- **Kompendium**: Regresjon (pdf og html, by Mette Langaas)
- **Korte videoer**: (by Mette Langaas)
  - Multippel lineær regresjon: introduksjon (14:07 min)
  - Multippel lineær regresjon: analyse av et datasett (15:20 min)
- Denne forelesningen
- **Disse slides** med notater

Prosjektoppgaven

- Vi ser hvor informasjonen ligger på Blackboard og hvordan melde seg på gruppe.
- Vi ser på prosjektoppgaven på https://s.ntnu.no/isthub.
- Karakteren teller 30% til den endelige karakteren.
- Vi bruker prosentvurderingsmetoden: Konverterer poengene i en % (heltall, avrundet) og så bruker vi følgende skala:

Karakterskala for prosentvurderingsmetoden

A: 89–100 poeng

B: 77–88 poeng

C: 65–76 poeng

D: 53–64 poeng

E: 41–52 poeng

F: 0–40 poeng

Veileding til prosjektoppgaven

Trondheim: 11., 18. og 25. November, 12:15-14:00 i Sentralbygg S3.

Ålesund:

Gjøvik:

Læringsmål for regresjon

- Du kan lage en modell for å forstå sammenhengen mellom en respons og én eller flere forklaringsvariabler.
- Du kan lage en modell for å predikere en respons fra en eller flere forklaringsvariabler.

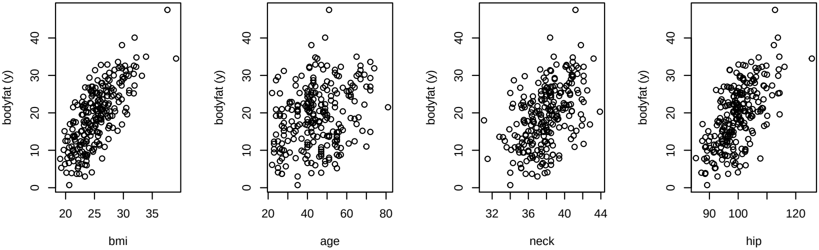
Regresjon – motiverende eksempel

(Veiledet læring - vi kjenner responsen)

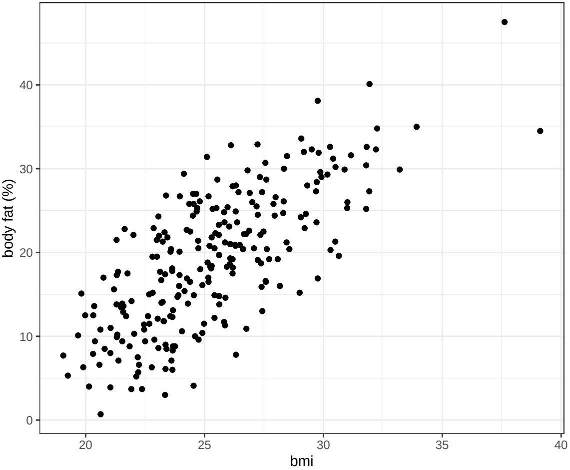
- Kropssfett er en viktig indikator for overvekt, men vanskelig å måle.

Spørsmål: Hvilke faktorer tillater præsis estimering av kroppsfettet?

Vi undersøker 243 mannlige deltakere. Kroppsfett (%), BMI og andre forklaringsvariabler ble målet. Kryssplott:



For en model for funker god for prediksjon trenger vi *multippel linear regresjon*. Men vi begynner med *enkel linear regresjon* (bare en forklaringsvariabel):



Enkel linear regresjon

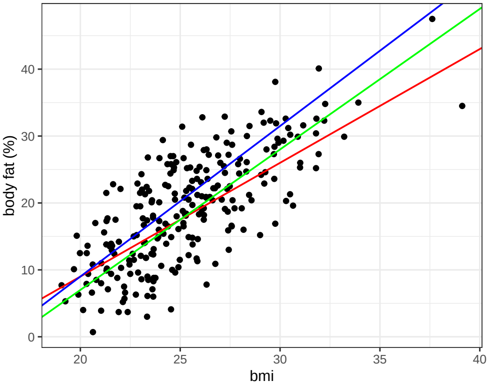
- En kontinuerlig respons variabel Y
- Bare *en forklaringsvariabel* x_1
- Relasjon mellom Y og x_1 er antatt å være *linear*.

Hvis den lineare relasjonen mellom Y og x er perfekt, så gjelder

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i}$$

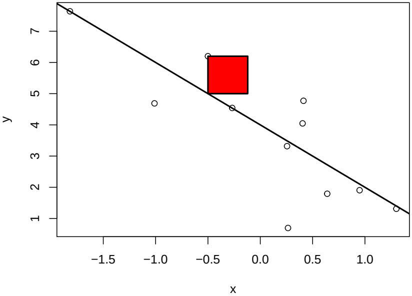
for alle i. Men..

Hvilken linje er best?



Enkel linear regresjon

a) Kan vi tilpasse den “rette” linjen til dataene?



- $\widehat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_{1i}$.
- $\widehat{e}_i = \widehat{y}_i - y$
- $\widehat{\beta}_0$ og $\widehat{\beta}_1$ velges slik at

$$SSE = \sum_i \widehat{e}_i^2$$

minimeres.

b) Kan vi tolke linja? Hvor sikkert er jeg på $\hat{\beta}_1$ og linja? Vi trenger antakelser, KI og hypothesetest.

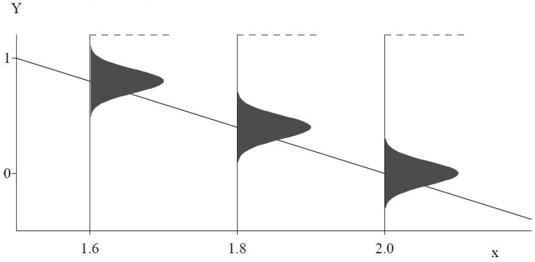
c) Fremtidige presisjoner av predikert y (kroppsfett)?

Linear regresjon – antakelser

$$Y_i = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 x_{i1}}_{\hat{y}_i} + e_i$$

med

$$e_i \sim \mathsf{N}(0, \sigma^2) \ .$$



Do-it-yourself “by hand”

Her kan du finne de beste parametrene selv:

Bruk denne lenken:

https://gallery.shinyapps.io/simple_regression/

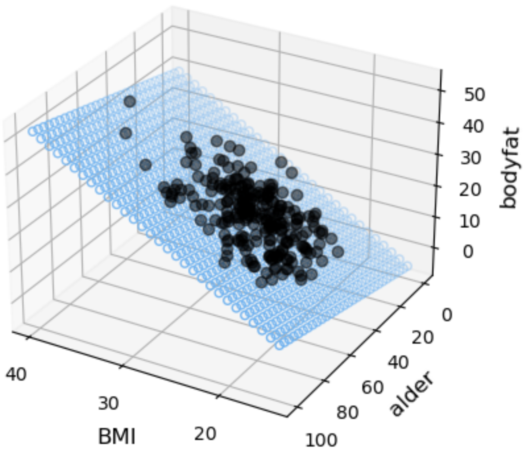
Multippel linear regresjon

Nesten det samme some enkel linear regresjon, vi bare summerer flere forklaringsvariabler:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + ... + \beta_p x_{pi} + e_i \ , \quad e_i \sim \mathsf{N}(0, \sigma^2) \ .$$

For eksempel:

$$\text{bodyfat}_i = \beta_0 + \beta_1 \text{bmi}_i + \beta_2 \text{age}_i + e_i \ .$$



bodyfat
0
10
20
30
40
50
alder
0
20
40
60
80
100
BMI
40
30
20

Regresjonsanalyse i fem steg

Steg 1: Bli kjent med dataene ved å se på oppsummeringsmål og ulike typer plott

Steg 2: Spesifiser en matematisk modell

Steg 3: Tilpass modellen

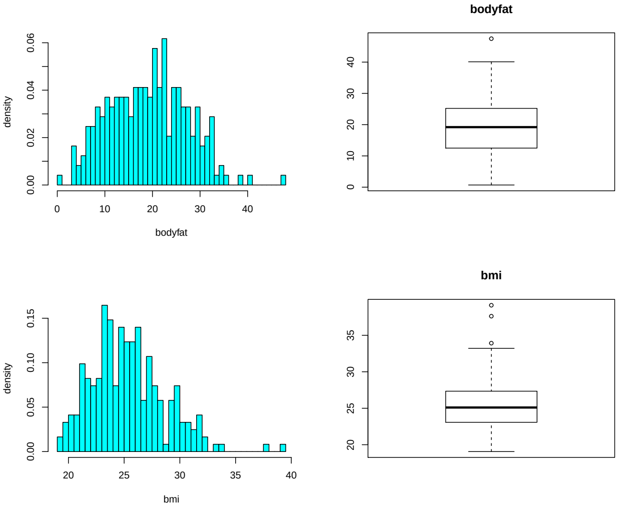
Steg 4: Presenter resultater fra den tilpassede modellen

Steg 5: Evaluer om modellen passer til dataene

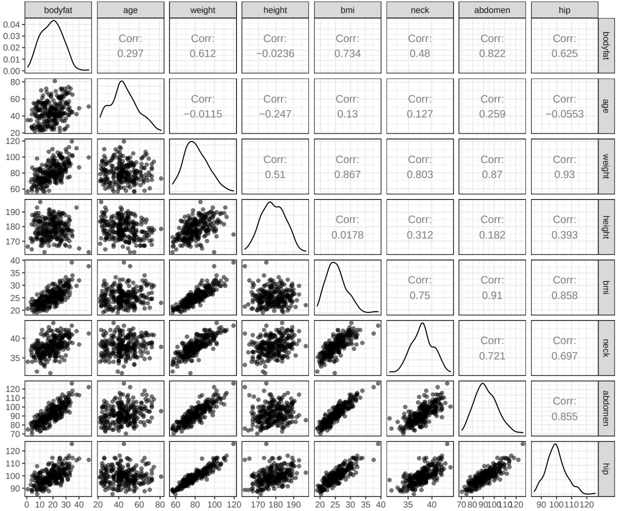
Vi skal ikke snakke så mye om hvordan finne en god modell, men om hvordan sammenligne to modeller (med justert R^2) .

Steg 1: Bli kjent med dataene

Vi kan for eksempel se på histogram og boxplot:



Ellers en *parplot* med kryssplotter for alle forklaringsvariable(r) $(x_1, \dots, x_p)$ og respons y:



```
##     bodyfat           age            weight          height     
##  Min.   : 0.70   Min.   :22.00   Min.   : 56.75   Min.   :162.6  
##  1st Qu.:12.50   1st Qu.:35.50   1st Qu.: 72.30   1st Qu.:173.7  
##  Median :19.20   Median :43.00   Median : 80.02   Median :177.8  
##  Mean   :19.11   Mean   :44.83   Mean   : 80.91   Mean   :178.5  
##  3rd Qu.:25.20   3rd Qu.:54.00   3rd Qu.: 89.32   3rd Qu.:183.5  
##  Max.   :47.50   Max.   :81.00   Max.   :119.29   Max.   :196.8  
##       bmi             neck          abdomen            hip        
##  Min.   :19.06   Min.   :31.10   Min.   : 70.40   Min.   : 85.30  
##  1st Qu.:23.07   1st Qu.:36.40   1st Qu.: 84.90   1st Qu.: 95.55  
##  Median :25.10   Median :38.00   Median : 91.00   Median : 99.30  
##  Mean   :25.34   Mean   :37.96   Mean   : 92.38   Mean   : 99.69  
##  3rd Qu.:27.34   3rd Qu.:39.40   3rd Qu.: 99.15   3rd Qu.:103.15  
##  Max.   :39.12   Max.   :43.90   Max.   :126.20   Max.   :125.60  
```

I Python får du en oppsummering av datasettet (`df`) med `df.describe()`.

Steg 2: Spesifiser modell

Nå må vi spesifisere en modell med å velge hvilke forklaringsvariabler vi vil bruke

$$y \sim x_1 + x_2 + x_3 \ .$$

I Python er det

```
formel='y ~ x1 + x2 + x3'.
```

Eksempel 1:

$$\text{bodyfat} \sim \text{bmi}$$

hvis den matematiske modellen er

$$\text{bodyfat}_i = \beta_0 + \beta_1 \text{BMI}_i + e_i \ ,$$

Python: `formel='bodyfat ~ bmi'`.

Eksempel 2:

$$\text{bodyfat} \sim \text{bmi} + \text{age}$$

hvis den matematiske modellen er

$$\text{bodyfat}_i = \beta_0 + \beta_1 \text{BMI}_i + \beta_2 \text{age}_i + e_i \ .$$

Python: `formel='bodyfat ~ bmi + age'`.

Steg 3: Tilpass modellen

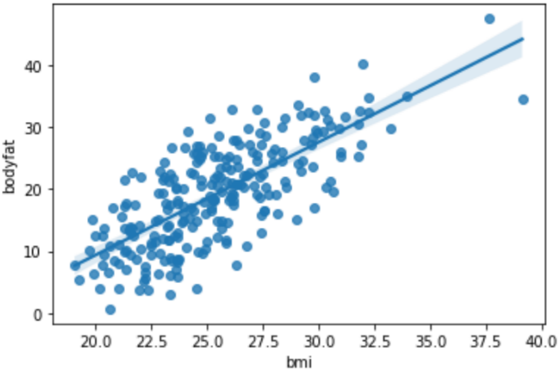
"Tilpasse" betyr:

- Vi estimerer β_0, β_1, ... , og vi får estimater $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$,...
- I tillegg estimerer vi også σ^2.

Steg 4: Resultat og tolkning av estimatene

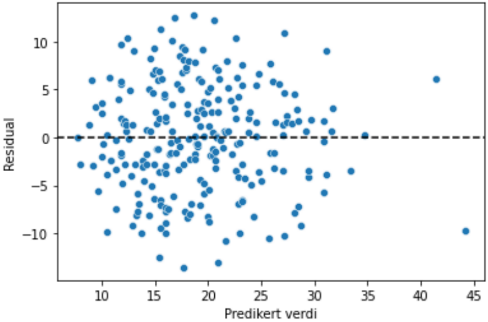
```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                bodyfat   R-squared:                       0.539
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.537
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     281.8
Date:                Wed, 08 Sep 2021   Prob (F-statistic):           2.06e-42
Time:                        18:58:47   Log-Likelihood:                -761.28
No. Observations:                 243   AIC:                             1527.
Df Residuals:                     241   BIC:                             1534.
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept    -26.9844      2.769     -9.746      0.000     -32.439     -21.530
bmi            1.8188      0.108     16.788      0.000       1.605       2.032
==============================================================================
Omnibus:                        5.031   Durbin-Watson:                   2.311
Prob(Omnibus):                  0.081   Jarque-Bera (JB):                3.079
Skew:                          -0.033   Prob(JB):                        0.215
Kurtosis:                       2.452   Cond. No.                         198.
==============================================================================
```

- Tilpasset regressjonslinie og 95% konfidensintervall for regressjonslinia (forventningsverdien $\mathrm{E}(Y)$).
- 95% prediksjonsintervall for nye observasjoner (kroppsfett for nye personer; handtegnet)



Steg 5: Passer modellen?

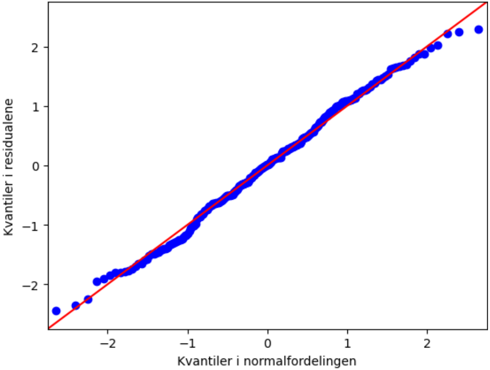
Tukey-Anscome (TA) diagram:



Her vil man

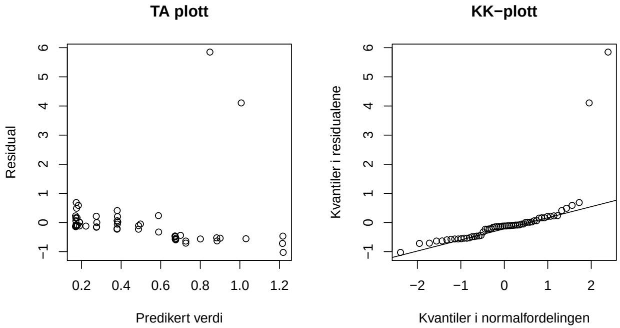
- Ikke noe struktur
- Sentrering rundt 0 verdi

Kvantil-kvantil plot:



Her vil man at observasjoner ligger mer og mindre på linja.

Hvordan ser det ut når en modell *ikke* passer?



Multippel linear regresjon

Gjenta samme analyse med to kovariabler
(`formel='bodyfat ~ bmi + age'`):

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                bodyfat   R-squared:                       0.580
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.577
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     165.9
Date:                Wed, 08 Sep 2021   Prob (F-statistic):           5.67e-46
Time:                        19:55:28   Log-Likelihood:                -749.88
No. Observations:                 243   AIC:                             1506.
Df Residuals:                     240   BIC:                             1516.
Df Model:                           2
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept    -31.2545      2.790    -11.203      0.000     -36.750     -25.759
bmi            1.7526      0.104     16.773      0.000       1.547       1.958
age            0.1327      0.027      4.857      0.000       0.079       0.186
==============================================================================
```

Med fem kovariabler:

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                bodyfat   R-squared:                       0.726
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.720
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     125.3
Date:                Thu, 09 Sep 2021   Prob (F-statistic):           1.73e-64
Time:                        09:16:49   Log-Likelihood:                -698.26
No. Observations:                 243   AIC:                             1409.
Df Residuals:                     237   BIC:                             1429.
Df Model:                           5
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept    -35.2802      6.073     -5.809      0.000     -47.245     -23.316
bmi            0.3881      0.224      1.730      0.085      -0.054       0.830
age            0.0038      0.027      0.141      0.888      -0.050       0.058
weight        -0.1141      0.029     -3.883      0.000      -0.172      -0.056
neck          -0.4581      0.216     -2.123      0.035      -0.883      -0.033
abdomen        0.8888      0.085     10.486      0.000       0.722       1.056
==============================================================================
Omnibus:                        5.492   Durbin-Watson:                   2.345
Prob(Omnibus):                  0.064   Jarque-Bera (JB):                3.310
Skew:                           0.056   Prob(JB):                        0.191
Kurtosis:                       2.439   Cond. No.                     4.64e+03
==============================================================================
```

Hva betyr alt dette?

- `coef`: $\hat{\beta}_j$
- `std err`: $\widehat{\mathrm{SE}}(\hat{\beta}_j)$
- `t`: $\frac{\hat{\beta}_j - 0}{\widehat{\mathrm{SE}}(\hat{\beta}_j)}$
- `P>|t|`: p-verdi (obs! $p = 0.000$ er *ikke* mulig, det betyr egentlig $p < 0.001$)

Hva betyr alt dette?

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
Intercept	-35.2802	6.073	-5.809	0.000	-47.245	-23.316
bmi	0.3881	0.224	1.730	0.085	-0.054	0.830
age	0.0038	0.027	0.141	0.888	-0.050	0.058
weight	-0.1141	0.029	-3.883	0.000	-0.172	-0.056
neck	-0.4581	0.216	-2.123	0.035	-0.883	-0.033
abdomen	0.8888	0.085	10.486	0.000	0.722	1.056

Prediksjon:

$\hat{y} =$

Prediker bodyfat for en ny person med
`bmi=25`, `age=50`, `weight=75`, `neck=40`, `abdomen=95`:

$\hat{y} =$

$= 21.88$

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
Intercept	-35.2802	6.073	-5.809	0.000	-47.245	-23.316
bmi	0.3881	0.224	1.730	0.085	-0.054	0.830
age	0.0038	0.027	0.141	0.888	-0.050	0.058
weight	-0.1141	0.029	-3.883	0.000	-0.172	-0.056
neck	-0.4581	0.216	-2.123	0.035	-0.883	-0.033
abdomen	0.8888	0.085	10.486	0.000	0.722	1.056

- Hva betyr $\hat{\beta}_0$?
- Hva betyr $\hat{\beta}_{abdomen} = 0.89$?

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
Intercept	-35.2802	6.073	-5.809	0.000	-47.245	-23.316
bmi	0.3881	0.224	1.730	0.085	-0.054	0.830
age	0.0038	0.027	0.141	0.888	-0.050	0.058
weight	-0.1141	0.029	-3.883	0.000	-0.172	-0.056
neck	-0.4581	0.216	-2.123	0.035	-0.883	-0.033
abdomen	0.8888	0.085	10.486	0.000	0.722	1.056

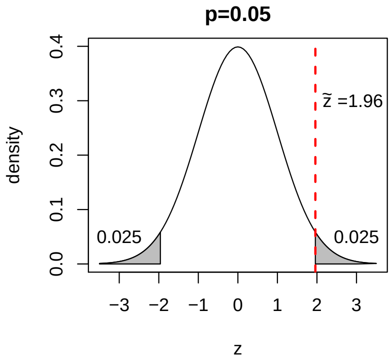
- 95% konfidensintervall: Intervall vi har stor tro at den inneholder den sanne β_j.
- $[\hat{\beta}_j \pm \underbrace{t_{\alpha/2,df}}_{\approx 1.96} \cdot \mathrm{SE}(\hat{\beta}_j)]$

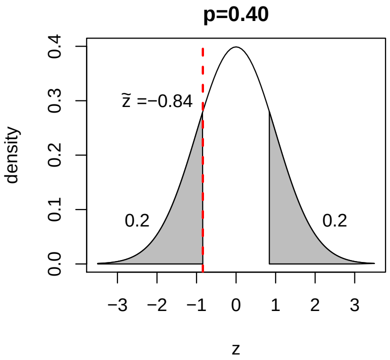
	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
Intercept	-35.2802	6.073	-5.809	0.000	-47.245	-23.316
bmi	0.3881	0.224	1.730	0.085	-0.054	0.830
age	0.0038	0.027	0.141	0.888	-0.050	0.058
weight	-0.1141	0.029	-3.883	0.000	-0.172	-0.056
neck	-0.4581	0.216	-2.123	0.035	-0.883	-0.033
abdomen	0.8888	0.085	10.486	0.000	0.722	1.056

- p-verdier og hypotesetester

Recap: Formell definisjon av p-verdien

p**-verdien** er sannsynligheten for det vi *har* observert eller noe mer ekstremt, dersom H_0 er sant.





R^2 og justert R^2

Dep. Variable:	bodyfat	R-squared:	0.726
Model:	OLS	Adj. R-squared:	0.720
Method:	Least Squares	F-statistic:	125.3
Date:	Thu, 09 Sep 2021	Prob (F-statistic):	1.73e-64
Time:	09:16:49	Log-Likelihood:	-698.26
No. Observations:	243	AIC:	1409.
Df Residuals:	237	BIC:	1429.
Df Model:	5		
Covariance Type:	nonrobust		

$$R^2 = \frac{\text{TSS} - \text{SSE}}{\text{TSS}} = 1 - \frac{\text{SSE}}{\text{TSS}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2},$$

med

$$\text{TSS} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

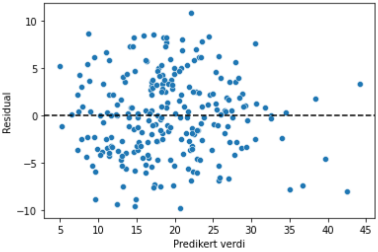
som måler den totale variabiliteten i $(y_1, \dots, y_n)$.

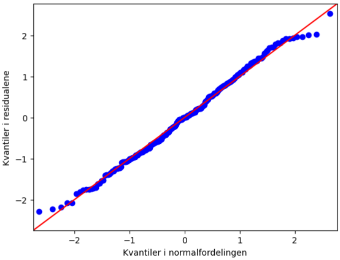
Problemet med R^2: Verdien blir alltid større når flere variabler er lagt til.

For modellvalg bruker vi derfor en justert versjon:

$$R^2_{adj} = 1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-m-1}$$

TA og kvantil-kvantil plot





Binære forklaringsvariabler

Den enkleste modellen er

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + e_i \ .$$

Hva betyr det når x_{1i} er enten 0 eller 1 (binær)?

$$\begin{array}{ll} \beta_0 + e_i & \text{hvis } x_{1i} = 0 \\ \beta_0 + \beta_1 + e_i & \text{hvis } x_{1i} = 1 \end{array}$$

Eksempel: Studie om kvikksølv (Hg)

Modell:

$$\log(Hg_{urin})_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot x_{1i} + \beta_2 \cdot x_{2i} + \beta_3 \cdot x_{3i} + e_i \ ,$$

Med

- $\log(Hg_{urin})$: log konsentrasjon av Hg i urin.
- x_1 binær variabel som er 1 hvis person røyker, ellers 0.
- x_2 antall amalgam fillinger i tennene
- x_3 antall fiskemåltider per måned.

Interpretasjon av regresjon med binær variabel

	coef	std err	t	P>|t|	[0.025	0.975]
Intercept	-2.1136	0.100	-21.101	0.000	-2.311	-1.916
smoking	0.3317	0.257	1.292	0.198	-0.175	0.839
amalgam_quant	0.1799	0.039	4.566	0.000	0.102	0.258
fisk_quant	0.0678	0.017	4.088	0.000	0.035	0.101

Modell for røyker:

Modell for ikke-røyker:

Kategoriske forklaringsvariabler

- Vi gjør ting enda mer fleksibel (eller komplisert!) når vi også tillater kategoriske forklaringsvariabler.
- Eksempel med 3 kategorier: Bil dataset med y=bensinforbruk og forklaringsvariabler `vekt` og `origin`$\in$ {American,European,Japanese}.

```
formel='mpg ~  vekt + origin'
```

- Ide: dummy-variabel koding – kalles *one-hot koding* i maskinlæring.
  - $x_{2i} = 0$ og $x_{3i} = 0$ hvis `origin` er "American"
  - $x_{2i} = 1$ og $x_{3i} = 0$ hvis `origin` er "European"
  - $x_{2i} = 0$ og $x_{3i} = 1$ hvis `origin` er "Japanese"

Modellen: $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{3i} + e_i$

```
==============================================================================
Dep. Variable:                    mpg   R-squared:                       0.702
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.700
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     304.7
Date:                Mon, 13 Sep 2021   Prob (F-statistic):          1.28e-101
Time:                        14:42:02   Log-Likelihood:                -1123.9
No. Observations:                 392   AIC:                             2256.
Df Residuals:                     388   BIC:                             2272.
Df Model:                           3
Covariance Type:            nonrobust
=======================================================================================
                          coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
---------------------------------------------------------------------------------------
Intercept              43.7322      1.113     39.277      0.000      41.543      45.921
origin[T.European]      0.9709      0.659      1.474      0.141      -0.324       2.266
origin[T.Japanese]      2.3271      0.665      3.501      0.001       1.020       3.634
weight                 -0.0070      0.000    -21.956      0.000      -0.008      -0.006
==============================================================================
```

Så hva er modellene for de tre opprinnelsene (`origin`) av bilene?

Oppsummering linear regresjon