02323 Introduktion til statistik

Uge 9: Multipel lineær regression

Nicolai Siim Larsen
DTU Compute
Danmarks Tekniske Universitet
2800 Kgs. Lyngby

Dagsorden

1. Opsummering
2. Multipel lineær regression
3. Modeludvælgelse (Model selection)
4. Modelkontrol (Analyse af residualerne)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode

Dagsorden

Statistiske modeller

Gennemsnittet

$$Y_i = \mu + \varepsilon_i.$$

Simpel lineær regression

$$Y_i = \mu_i + \varepsilon_i,$$

$$\mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_i.$$

Multipel lineær regression

$$Y_i = \mu_i + \varepsilon_i,$$

$$\mu_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{i,j}.$$

Fejlene er uafhængige og følger en $N(0, \sigma^2)$-fordeling.

Terminologi

Fejl: Forskel mellem en observation og en sand populationsværdi

$$\varepsilon = Y - \mu.$$

Residual: Forskel mellem en observation og en prædikteret (fittet) værdi

$$e = Y - \hat{Y}.$$

I en simpel lineær regression har man f.eks.

$$\mu = \beta_0 + \beta_1 x,$$

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x.$$

Vi bruger residualerne til at estimere fejlene.

Estimation

Modelparametrene kan estimeres med mindste kvadraters metode
(I disse modeller er LS (Least squares) og ML (Maximum likelihood) estimatorerne de samme)

Estimatorerne $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ findes som løsningen til et minimeringsproblem. De vælges således, at kvadraterne af residualerne minimeres:

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \operatorname{argmin} \mathrm{RSS}(a,b),$$

hvor RSS (Residual Sum of Squares) er defineret som:

$$\mathrm{RSS}(a,b) = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - [a + bx_i])^2.$$

Eksempel - Indledning

Baggrund

En bilfabrikant lover, at en bestemt model kan køre mindst 20 km per liter diesel ved bykørsel.

Indsamling af data

Man ønsker at undersøge, hvorvidt påstanden er korrekt, hvorfor man har kørt 25 ture af varierende længde. Efter hver tur har man målt rutens længde og brændstofforbruget.

Model

Man opstiller en lineær regressionsmodel under de sædvanlige antagelser:

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

Eksempel - Indledning

Baggrund

En bilfabrikant lover, at en bestemt model kan køre mindst 20 km per liter diesel ved bykørsel.

Indsamling af data

Man ønsker at undersøge, hvorvidt påstanden er korrekt, hvorfor man har kørt 25 ture af varierende længde. Efter hver tur har man målt rutens længde og brændstofforbruget.

Model

Man opstiller en lineær regressionsmodel under de sædvanlige antagelser:

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

Spørgsmål

Hvad repræsenterer de forskellige variable?
Er forudsætningerne opfyldt?
Hvilken nulhypotese ønsker man at undersøge?

Eksempel - Hypotesetest

Vi ønsker at teste nulhypotesen

$$H_0: \ \beta_1 = 0.05$$

mod en tosidet modhypotese på et 5% signifikansniveau.

Hvilke tal skal vi bruge til testen?

Hvad bliver den observerede teststørrelse?

Hvilken fordeling skal teststørrelsen sammenlignes mod?

Eksempel - Hypotesetest

Vi ønsker at teste nulhypotesen

$$H_0: \ \beta_1 = 0.05$$

mod en tosidet modhypotese på et 5% signifikansniveau.

Hvilke tal skal vi bruge til testen?

$$\hat{\beta}_1 = 0.0527, \quad \hat{\sigma}_{\beta_1} = 0.0015.$$

Hvad bliver den observerede teststørrelse?

Hvilken fordeling skal teststørrelsen sammenlignes mod?

Eksempel - Hypotesetest

Vi ønsker at teste nulhypotesen

$$H_0: \ \beta_1 = 0.05$$

mod en tosidet modhypotese på et 5% signifikansniveau.

Hvilke tal skal vi bruge til testen?

$$\hat{\beta}_1 = 0.0527, \quad \hat{\sigma}_{\beta_1} = 0.0015.$$

Hvad bliver den observerede teststørrelse?

$$T_{\beta_1} = \frac{0.0527 - 0.05}{0.0015} = \frac{0.0027}{0.0015} = \frac{27}{15} = 1.8.$$

Hvilken fordeling skal teststørrelsen sammenlignes mod?

Eksempel - Hypotesetest

Vi ønsker at teste nulhypotesen

$$H_0:\ \beta_1 = 0.05$$

mod en tosidet modhypotese på et 5% signifikansniveau.

Hvilke tal skal vi bruge til testen?

$$\hat{\beta}_1 = 0.0527, \quad \hat{\sigma}_{\beta_1} = 0.0015.$$

Hvad bliver den observerede teststørrelse?

$$T_{\beta_1} = \frac{0.0527 - 0.05}{0.0015} = \frac{0.0027}{0.0015} = \frac{27}{15} = 1.8.$$

Hvilken fordeling skal teststørrelsen sammenlignes mod?

En t-fordeling med 23 frihedsgrader.

Eksempel: Ozonkoncentration

Vi har et sæt af sammenhængende målinger af: logaritmen af ozonkoncentration (log(ppb)), temperatur, solindstråling og vindhastighed:

ozone	radiation	wind	temperature	month	day
41	190	7.4	67	5	1
36	118	8.0	72	5	2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
18	131	8.0	76	9	29
20	223	11.5	68	9	30

Eksempel: Ozonkoncentration

```
## Se info about  data
?airquality
## Copy the data
Air <- airquality
## Remove rows with at least one NA value
Air <- na.omit(Air)

## Remove one outlier
Air <- Air[-which(Air$Ozone == 1), ]

## Check  the empirical density
hist(Air$Ozone, probability=TRUE, xlab="Ozon", main="")

## Concentrations are positive and very skewed, let's
## log-transform right away:
## (although really one could wait and check residuals from models)
Air$logOzone <- log(Air$Ozone)
## Bedre epdf?
hist(Air$logOzone, probability=TRUE, xlab="log Ozone", main="")

## Make a time variable (R timeclass, se ?POSIXct)
Air$t <- ISOdate(1973, Air$Month, Air$Day)
## Keep only some of the columns
Air <- Air[ ,c(7,4,3,2,8)]
## New names of the columns
names(Air) <- c("logOzone","temperature","wind","radiation","t")

## What's in  Air?
str(Air)
Air
head(Air)
tail(Air)

## Typically one would  begin with a pairs plot
pairs(Air, panel = panel.smooth, main = "airquality data")
```

Fit modellen i R

```r
################################

## See the relation between ozone and temperature
plot(Air$temperature, Air$logOzone, xlab="Temperature", ylab="Ozon")

## Correlation
cor(Air$logOzone, Air$temperature)

## Fit a simple linear regression model
summary(lm(logOzone ~ temperature, data=Air))

## Add a vector with random values, is there a significant linear relation?
## ONLY for ILLUSTRATION purposes
Air$noise <- rnorm(nrow(Air))
plot(Air$logOzone, Air$noise, xlab="Noise", ylab="Ozon")
cor(Air$logOzone, Air$noise)
summary(lm(logOzone ~ noise, data=Air))
```

Alternativer

Vi kan også lave en simpel lineær regressionsmodel med de to andre forklarende variable:

```
################################
## With each of the other two independent variables

## Simple linear regression model with the wind speed
plot(Air$logOzone, Air$wind, xlab="logOzone", ylab="Wind speed")
cor(Air$logOzone, Air$wind)
summary(lm(logOzone ~ wind, data=Air))

## Simple linear regression model with the radiation
plot(Air$logOzone, Air$radiation, xlab="logOzone", ylab="Radiation")
cor(Air$logOzone, Air$radiation)
summary(lm(logOzone ~ radiation, data=Air))
```

Dagsorden

Multipel lineær regression

En udvidelse af den simple lineære regressionsmodel, hvor flere *forklarende*/*uafhængige* variable inkluderes.

- I en multipel lineær regression med p *forklarende* variable benævnes de deterministiske variable $x_1, x_2, \ldots, x_p$.
- Vi modellerer en *lineær sammenhæng* mellem Y og $x_1, x_2, \ldots, x_p$, ved en regressionsmodel på formen

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1,i} + \cdots + \beta_p x_{p,i} + \varepsilon_i,$$

  hvor fejlene er uafhængige og ensfordelte med $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

Estimation

Estimation og prædiktion udføres ligesom i den simple lineære regressionsmodel.

- Parameterestimaterne findes ved at minimere RSS:

  $$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p) = \text{argmin RSS}(b_0, b_1, ..., b_p)$$

  Bemærk:

  $$\text{argmin RSS}(b_0, b_1, ..., b_p) = \text{argmin} \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \text{argmin} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2.$$

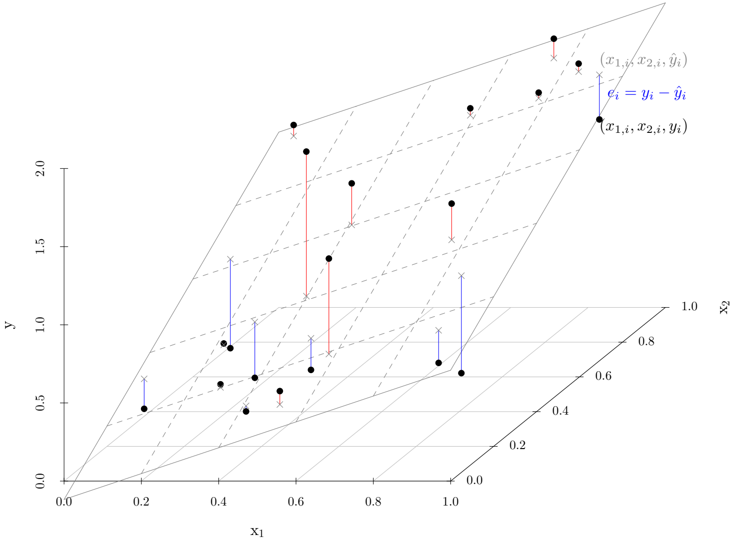
- De prædikterede (fittede) værdier findes ved:

  $$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i,1} + \cdots + \hat{\beta}_p x_{i,p},$$

- og residualerne er så:

  $$e_i = y_i - \hat{y}_i.$$

Mindste kvadraters metode



Vigtige resultater

- Bemærkning 6.6: Find $\hat{\beta}_i$ og $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ fra R-outputtet (`summary(myfit)`)

Vigtige resultater

- Bemærkning 6.6: Find $\hat{\beta}_i$ og $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ fra R-outputtet (`summary(myfit)`)
- Sætning 6.2: t-fordelingen kan bruges til inferens for modelparametre.

Vigtige resultater

- Bemærkning 6.6: Find $\hat{\beta}_i$ og $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ fra R-outputtet (`summary(myfit)`)
- Sætning 6.2: t-fordelingen kan bruges til inferens for modelparametre.
- Metoder 6.4 og 6.5: Hypotesetest og konfidensintervaller fra R-outputtet.

Vigtige resultater

- Bemærkning 6.6: Find $\hat{\beta}_i$ og $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ fra R-outputtet (`summary(myfit)`)
- Sætning 6.2: t-fordelingen kan bruges til inferens for modelparametre.
- Metoder 6.4 og 6.5: Hypotesetest og konfidensintervaller fra R-outputtet.
- Altsammen: Samme som for simpel lineær regression!

Vigtige resultater

- Bemærkning 6.6: Find $\hat{\beta}_i$ og $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ fra R-outputtet (`summary(myfit)`)
- Sætning 6.2: t-fordelingen kan bruges til inferens for modelparametre.
- Metoder 6.4 og 6.5: Hypotesetest og konfidensintervaller fra R-outputtet.
- Altsammen: Samme som for simpel lineær regression!
- (I Afsnit 6.6 af bogen: Matrix-baseret tilgang med eksplicitte formler. Ikke pensum i kurserne 02323 og 02402)

R-outputtet

```
summary(lm(logOzone ~ temperature + wind + radiation, data=Air))

##
## Call:
## lm(formula = logOzone ~ temperature + wind + radiation, data = Air)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -1.0203 -0.3150 -0.0094  0.3230  1.1223
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  0.261436   0.520496    0.50     0.62
## temperature  0.044457   0.005678    7.83  3.9e-12 ***
## wind        -0.069283   0.014514   -4.77  5.8e-06 ***
## radiation    0.002190   0.000516    4.25  4.6e-05 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.467 on 106 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.674,Adjusted R-squared:  0.664
## F-statistic: 72.9 on 3 and 106 DF,  p-value: <2e-16
```

- Læs estimater, usikkerheder osv. fra outputtet.

Fortolkning af parametre (Bemærkning 6.14)

Hvad er $\hat{\beta}_i$ udtryk for?

- Den forventede ændring i y når x_i ændres én enhed.

Fortolkning af parametre (Bemærkning 6.14)

Hvad er $\hat{\beta}_i$ udtryk for?

- Den forventede ændring i y når x_i ændres én enhed.
- Effekten af x_i givet de øvrige variable.
- Effekten af x_i korrigeret for de øvrige variables effekt.
- Effekten af x_i "når de andre variable er uændret".

Fortolkning af parametre (Bemærkning 6.14)

Hvad er $\hat{\beta}_i$ udtryk for?

- Den forventede ændring i y når x_i ændres én enhed.
- Effekten af x_i givet de øvrige variable.
- Effekten af x_i korrigeret for de øvrige variables effekt.
- Effekten af x_i "når de andre variable er uændret".

- Afhænger af hvad der ellers i modellen!
- Generelt: IKKE en kausal effekt/interventionseffekt!

Dagsorden

1. Opsummering
2. Multipel lineær regression
3. Modeludvælgelse (Model selection)
4. Modelkontrol (Analyse af residualerne)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode

Modeludvidelse (forward selection)

- *Ikke inkluderet i bogen*
- Start med en *simpel lineær regressionsmodel* med en signifikant forklarende variabel
- *Udvid modellen* med andre forklarende variable én ad gangen
- *Stop* når der ikke er flere signifikante udvidelser

```
################################
## Extend the model

## Forward selection:
## Add wind to the model
summary(lm(logOzone ~ temperature + wind, data=Air))
## Add radiation to the model
summary(lm(logOzone ~ temperature + wind + radiation, data=Air))
```

Modelreduktion (backward selection)

- *Beskrevet i bogen under sektion 6.5*
- Start med den fulde model
- Fjern den "mindst signifikante" variabel
- Stop når alle tilbageværende parametre er signifikante

```
################################
## Backward selection

## Fit the full model
summary(lm(logOzone ~ temperature + wind + radiation + noise, data=Air))
## Remove the most non-significant input, are all now significant?
summary(lm(logOzone ~ temperature + wind + radiation, data=Air))
```

Modeludvælgelse

- Der er ikke nogen sikker metode til at finde den bedste model!
- Det kræver subjektive beslutninger at udvælge en model.
- Forskellige procedurer, enten forward eller backward selection (eller begge), afhænger af forholdene.
- Der findes statistiske metoder og test til at sammenligne modeller.
- Her i kurset er kun backward selection beskrevet.

Dagsorden

Modelkontrol (Analyse af residualerne)

- Modelkontrol: Analysér residualerne for at tjekke om antagelserne er opfyldt.
- Samme antagelser som for den simple lineære model.

Antagelsen om normalfordelte residualer

- Brug normal QQ-plot:

```
################################
## Assumption of normal distributed residuals

## Save the selected fit
fitSel <- lm(logOzone ~ temperature + wind + radiation, data=Air)

## qq-normalplot
qqnorm(fitSel$residuals)
qqline(fitSel$residuals)
```

Antagelse om ensfordelte residualer

Vi kigger efter varianshomogenitet og systematiske tendenser.

- Plot residualerne (e_i) mod de prædikterede (fittede) værdier ($\hat{y}_i$):

```
################################
## Plot the residuals vs. predicted values

plot(fitSel$fitted.values, fitSel$residuals, xlab="Predicted values",
     ylab="Residuals")
```

- Plot residualerne mod de forklarende variable:

```
################################
## Plot the residuals vs. the independent variables

par(mfrow=c(1,3))
plot(Air$temperature, fitSel$residuals, xlab="Temperature")
plot(Air$wind, fitSel$residuals, xlab="Wind speed")
plot(Air$radiation, fitSel$residuals, xlab="Radiation")
```

Dagsorden

1. Opsummering
2. Multipel lineær regression
3. Modeludvælgelse (Model selection)
4. Modelkontrol (Analyse af residualerne)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode

En kurvelineær model

Regressionsmodeller til ikke-lineær data baseret på Taylorudviklinger.

Hvis vi vil benytte en model af typen

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \varepsilon_i,$$

så kan vi bruge en multipel lineær regressionsmodel

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \beta_2 x_{i,2} + \varepsilon_i,$$

hvor

$$x_{i,1} = x_i, \quad x_{i,2} = x_i^2$$

og bruge de samme metoder som for multipel lineær regression.

Udvid ozonmodellen med passende kurvelineær regression

```r
###############################
## Extend the ozone model with appropriate curvilinear regression

## Make the squared wind speed
Air$windSq <- Air$wind^2
## Add it to the model
fitWindSq <- lm(logOzone ~ temperature + wind + windSq + radiation, data=Air)
summary(fitWindSq)

## Equivalently for the temperature
Air$temperature2 <- Air$temperature^2
## Add it
fitTemperatureSq <- lm(logOzone ~ temperature + temperature2 + wind + radiation, data=Air)
summary(fitTemperatureSq)

## Equivalently for the radiation
Air$radiation2 <- Air$radiation^2
## Add it
fitRadiationSq <- lm(logOzone ~ temperature + wind + radiation + radiation2, data=Air)
summary(fitRadiationSq)

## Which one was best?
## One could try to extend the model further
fitWindSqTemperaturSq <- lm(logOzone ~ temperature + temperature2 + wind + windSq + radiation, data=Air)
summary(fitWindSqTemperaturSq)

## Model validation
qqnorm(fitWindSq$residuals)
qqline(fitWindSq$residuals)
plot(fitWindSq$residuals, fitWindSq$fitted.values, pch=19)
```

Dagsorden

Konfidens- og prædiktionsintervaller - Metode 6.9:

Som for simpel lineær regression (i princippet).

```
################################
## Confidence and prediction intervals for the curvilinear model

## Generate a new data.frame with constant temperature and radiation, but with varying wind speed
wind<-seq(1,20.3,by=0.1)
AirForPred <- data.frame(temperature=mean(Air$temperature), wind=wind,
                         windSq=wind^2, radiation=mean(Air$radiation))

## Calculate confidence and prediction intervals (actually bands)
CI <- predict(fitWindSq, newdata=AirForPred, interval="confidence", level=0.95)
PI <- predict(fitWindSq, newdata=AirForPred, interval="prediction", level=0.95)

## Plot them
plot(wind, CI[,"fit"], ylim=range(CI,PI), type="l",
     main=paste("At temperature =",format(mean(Air$temperature),digits=3),
                "and radiation =", format(mean(Air$radiation),digits=3)))
lines(wind, CI[,"lwr"], lty=2, col=2)
lines(wind, CI[,"upr"], lty=2, col=2)
lines(wind, PI[,"lwr"], lty=2, col=3)
lines(wind, PI[,"upr"], lty=2, col=3)
## legend
legend("topright", c("Prediction","95% confidence band","95% prediction band"), lty=c(1,2,2), col=1:3)
```

Dagsorden

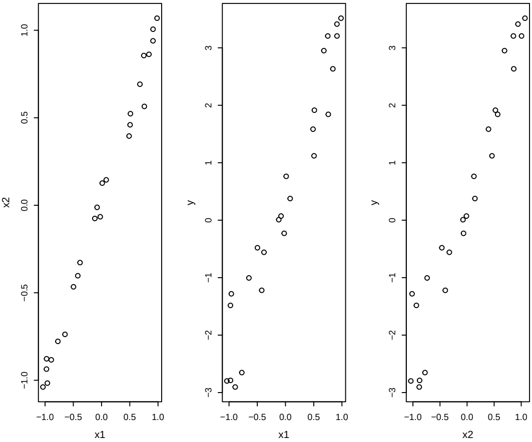
1. Opsummering
2. Multipel lineær regression
3. Modeludvælgelse (Model selection)
4. Modelkontrol (Analyse af residualerne)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode

Kollinearitet

- Hvis to (eller flere) forklarende variable har en perfekt lineær sammenhæng, så kan vi ikke afgøre, hvilken som er forklarende.
- Også et problem hvis sammenhængen er tæt på lineær.
- Relateret til konceptet "confounders".
- Med to meget korrelerede x-variable:
  - *Sammen* kan det være at ingen af dem har en "unik" effekt.
  - *Separat* kan de have en stor effekt.

Kollinearitet – Eksempel

To meget korrelerede forklarende variable `x1` og `x2` og responsvariabel `y`.



Kollinearitet – Eksempel

```
###################################
L <- lm(y ~ x1 + x2)
summary(L)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x1 + x2)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -0.7951 -0.3723  0.0038  0.3546  1.2247
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)    0.376      0.109    3.44   0.0023 **
## x1             0.709      1.535    0.46   0.6485
## x2             2.167      1.523    1.42   0.1688
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.534 on 22 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.941,Adjusted R-squared:  0.936
## F-statistic:  175 on 2 and 22 DF,  p-value: 3.05e-14
```

Kollinearitet – Konklusion

- Svært at separere effekter af kollinære variable
- Ingen nem løsning på kollinearitet
- Et fornuftigt design af eksperimentet kan hjælpe

Kollinearitet – Konklusion

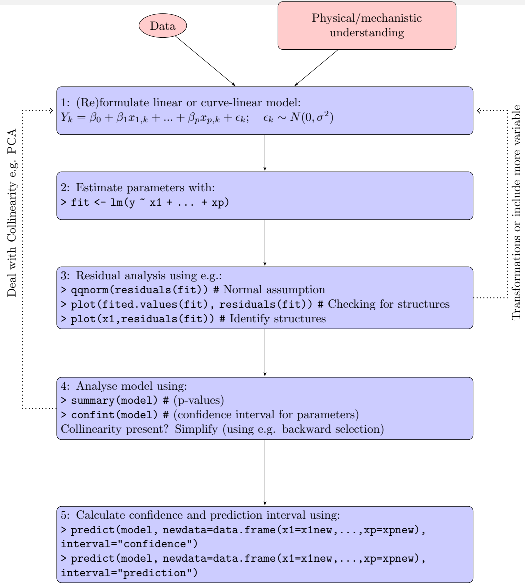
- Svært at separere effekter af kollinære variable
- Ingen nem løsning på kollinearitet
- Et fornuftigt design af eksperimentet kan hjælpe

Det er vigtigt, hvordan man designer sit eksperiment!

Dagsorden

1. Opsummering
2. Multipel lineær regression
3. Modeludvælgelse (Model selection)
4. Modelkontrol (Analyse af residualerne)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode

Metode 6.16


Data
Physical/mechanistic understanding
1: (Re)formulate linear or curve-linear model:
$Y_k = \beta_0 + \beta_1 x_{1,k} + ... + \beta_p x_{p,k} + \epsilon_k; \quad \epsilon_k \sim N(0, \sigma^2)$
2: Estimate parameters with:
> fit <- lm(y ~ x1 + ... + xp)
3: Residual analysis using e.g.:
> qqnorm(residuals(fit)) # Normal assumption
> plot(fited.values(fit), residuals(fit)) # Checking for structures
> plot(x1,residuals(fit)) # Identify structures
4: Analyse model using:
> summary(model) # (p-values)
> confint(model) # (confidence interval for parameters)
Collinearity present? Simplify (using e.g. backward selection)
5: Calculate confidence and prediction interval using:
> predict(model, newdata=data.frame(x1=x1new,...,xp=xpnew), interval="confidence")
> predict(model, newdata=data.frame(x1=x1new,...,xp=xpnew), interval="prediction")
Deal with Collinearity e.g. PCA
Transformations or include more variable

Dagsorden

1. Opsummering
2. Multipel lineær regression
3. Modeludvælgelse (Model selection)
4. Modelkontrol (Analyse af residualerne)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode