02402: Introduktion til Statistik

Forelæsning 9: Multipel lineær regression

DTU Compute
Danmarks Tekniske Universitet
2800 Kgs. Lyngby

Agenda

1. Opvarmning: simpel lineær regression
2. Multipel lineær regression
3. Modelselektion
4. Residualanalyse (modelkontrol)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode

Overview

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
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
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")
```


Eksempel: Ozonkoncentration

- Lad os først se på sammenhængen mellem log ozon koncentrationen og temperaturen.
- Anvend en *simpel lineær regressionsmodel*

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \quad , \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \text{ og i.i.d.}$$

hvor

- Y_i er log ozonkoncentrationen for måling i
- x_i er temperaturen ved måling i

Fit modellen i 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))
```


Simpel lineær regressionsmodel til de to andre

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))
```

Overview

Multipel lineær regression

- Y er den *afhængige variabel*
- Vi er interesseret i at modellere Y's afhængighed af de *forklarende* eller *uafhængige* variable (explanatory eller independent variables) $x_1, x_2, ..., x_p$
- Vi modellerer en *lineær sammenhæng* mellem Y og $x_1, x_2, ..., x_p$, ved en regressionsmodel på formen

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1,i} + \cdots + \beta_p x_{p,i} + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \text{ og i.i.d.}$$

- Y_i og ε_i er stokastiske variable, og $x_{j,i}$ er (deterministiske) variable

'Least squares'-estimater

- Koefficientestimaterne findes ved at minimere:

$$RSS(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \cdots + \beta_p x_{i,p})]^2$$

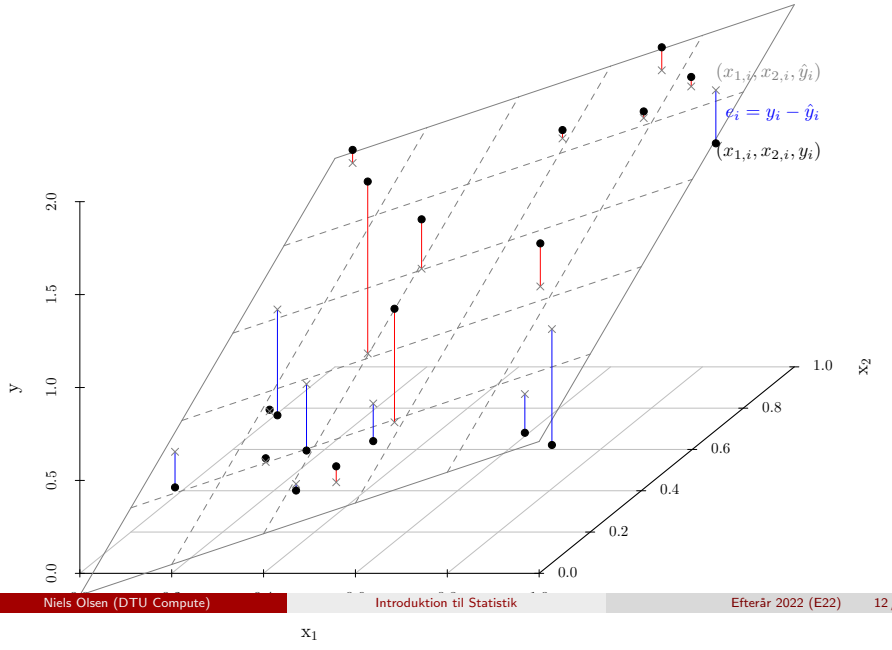
- De "prædikterede" (= "fittede") værdier findes ved:

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

- Og residualerne er så:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i$$
$$\text{residual} = \text{observation} - \text{prædiktion}$$

'Least squares'-estimater – Konceptet!



MLR – vigtige resultater – uden eksplicitte formler

- Remark 6.6: Find $\hat{\beta}_i$ og $\hat{\sigma}_{\beta_i}$ fra R-outputtet (`summary(myfit)`)
- Theorem 6.2: t-fordelingen kan bruges til inferens for modelparametre.
- Metode 6.4 og 6.5: Hypotesetests og konfidensintervaller ud 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 kursus 02402)

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.

Parameter interpretation in MLR (Remark 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!

Overview

Udvid modellen (forward selection)

- *Ikke inkluderet i kursusbogen*
- Start med den *lineære regressionsmodel* med den mest signifikante forklarende variabel
- *Udvid modellen* med andre forklarende variabler (inputs) 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))
```


Formindsk modellen (model reduction eller *backward selection*)

- *Beskrevet i kursusbogen, afsnit 6.5*
- Start med den fulde model.
- Fjern den mest insignifikante variabel.
- Stop når alle tilbageværende parameterestimater 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))
```


Modelselektion

- 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.
- Statistiske mål og tests til at sammenligne modeller
- Her i kurset er kun backward selection beskrevet

Modelselektion

I rapporter: husk at beskrive og reflektere over hvad I gør! (gælder både statistik og andet)

Overview

Residualanalyse (modelkontrol)

- Modelkontrol: Analysér residualerne for at tjekke at antagelserne er opfyldt.
- $e_i \sim N(0, \sigma^2)$ er uafhængige og ensfordelte (i.i.d.)
- Samme som for den simple lineære model

Antagelse om normalfordelte residualer

- Lav et qq-plot for at se om de ikke afviger fra at være normalfordelt

```
################################
## 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 identisk fordelte residualer

- 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")
```

- Det ser ud som om modellen godt kan forbedres...
- Plot residualer 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")
```

Overview

Kurvelineær model

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

- $x_{i,1} = x_i$
- $x_{i,2} = x_i^2$

og bruge de samme metoder som for multipel lineær regression.

Udvid ozonmodellen med passende kurvelineær regression

```
################################
## 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)
```


Overview

Konfidens- og prædiktionsintervaller, Method 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)
```

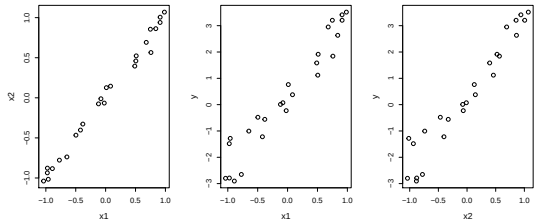

Overview

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.
- Med e.g. to meget korrelerede x-variable:
  - *Sammen* kan det være at 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

x1 og x2: Hver for sig: vi så en tydelig effekt på y.
Men *sammen*: ingen af dem er signifikante:

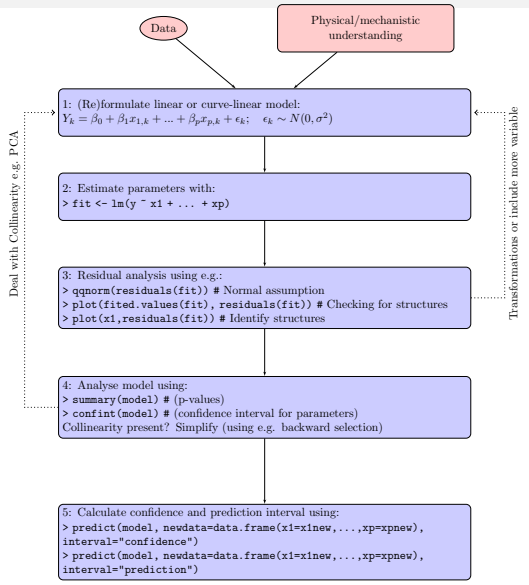
```
#################################
L <- lm(y ~ x1 + x2)
summary(L)

##
## 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
```


- Svært at separere effekter af kollinære variable
- Ingen nem løsning på kollinearitet
- Fornuftigt designet eksperiment kan hjælpe.

Det er vigtigt hvordan man designer sit eksperiment!

Overview

The overall regression method box 6.16



Agenda

1. Opvarmning: simpel lineær regression
2. Multipel lineær regression
3. Modelselektion
4. Residualanalyse (modelkontrol)
5. Kurvelinearitet
6. Konfidens- og prædiktionsintervaller
7. Kollinearitet
8. Den 'samlede' regressionsmetode