Sannolikhet och statistik XVI

Johan Jonasson

May 2021

Linjär regression. Mycket vanligt med linjära samband, t.ex.

- Ström som funktion av spänning.
- Log(C14) som funktion av ålder.
- Rödförskjutning som funktion av avstånd till galax.
- Längd hos dotter som funktion av mammans längd.

Sällan perfekta samband: data kommer inte riktigt att ligga på en linje. Modell:

$$Y_k = a + bx_k + \epsilon_k,\ k = 1, 2, \ldots, n$$

där $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots, \epsilon_n$ är oberoende och $N(0, \sigma^2)$. a, b, σ okända parametrar. Talen $x_1, x_2, \ldots, x_n$ kan ses som givna fixa tal.

ML-skattning av a och b: Det gäller att $Y_k \sim N(a + bx_k, \sigma^2)$, så

$$f_{Y_k}(y_k) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(y_k - a - bx_k)^2}.$$

Därför blir

$$\begin{aligned} L(a, b, \sigma; y_1, \ldots, y_n) &= f_{Y_1,\ldots,Y_n}(y_1, \ldots, y_n) \\ &= \frac{1}{\sigma^n (2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{k=1}^{n}(y_k - a - bx_k)^2}. \end{aligned}$$

Att maximera m.a.p. a och b är att minimera

$$\sum_{k=1}^{n}(y_k - a - bx_k)^2 =: \mathcal{L}(a, b).$$

Alltså: minsta-kvadrat-metoden.

Vi ska lösa

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a} = -2\sum_{k=1}^{n}(y_k - a - bx_k) = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -2\sum_{k=1}^{n} x_k(y_k - a - bx_k) = 0.$$

Detta ger

$$\hat{b} = \frac{\sum_{k=1}^{n}(y_k - \overline{y})(x_k - \overline{x})}{\sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x})^2}$$

$$\hat{a} = \overline{y} - \hat{b}\overline{x}.$$

Man brukar skriva

$$S_{xx} = \sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x})^2,\ S_{xy} = \sum_{k=1}^{n}(y_k - \overline{y})(x_k - \overline{x}),\ S_{yy} = \sum_{k=1}^{n}(y_k - \overline{y})^2.$$

Då blir

$$\hat{b} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}.$$

Man kan beräkna att

$$\hat{b} \sim N\left(b, \frac{\sigma^2}{S_{xx}}\right), \hat{a} \sim N\left(a, \frac{\sigma^2 \sum_{k=1}^{n} x_k^2}{nS_{xx}}\right).$$

Om σ^2 känd, gör konfidensintervall/test för a resp b med dessa. T.ex.

$$\frac{\hat{b} - b}{\sigma/\sqrt{S_{xx}}} \sim N(0,1)$$

så

$$b \in \hat{b} \pm z_{\alpha/2}\frac{\sigma}{\sqrt{S_{xx}}} \qquad (1-\alpha).$$

Om σ^2 är okänd, ersätt med s^2 och få

$$\frac{\hat{b} - b}{s/\sqrt{S_{xx}}} \sim t_{n-2}$$

och

$$b \in \hat{b} \pm F^{-1}_{t_{n-2}}(1 - \alpha/2)\frac{s}{\sqrt{S_{xx}}} \qquad (1 - \alpha).$$

Analogt för a (men inte lika intressant).

Ok, så vad är s^2? Jo,

$$s^2 = \frac{1}{n-2}\sum_{k=1}^{n}(y_k - \hat{a} - \hat{b}x_k)^2.$$

Den är vvr för σ^2. Formel:

$$s^2 = \frac{1}{n-2}\left(S_{yy} - \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}}\right).$$

Formler som gör det lättare att räkna:

$$S_{xy} = \sum (x_k - \overline{x})(y_k - \overline{y}) = \sum x_k y_k - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right).$$

Då får vi också

$$S_{xx} = \sum (x_k - \overline{x})^2 = \sum x_k^2 - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)^2$$

och analogt för y.

Exempel: För att observera hur en kvinnas längd beror av hennes mors längd, mätte vi sex mödra-dotterpar. Vi tror på ett linjärt samband. Data:

$$(170.1, 173.4),\ (161.3, 162.6),\ (177.1, 170.5)$$

$$(167.0, 162.8),\ (168.6, 171.2),\ (162.2, 165.5)$$

Vi får

$$S_{xy} = \sum x_k y_k - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right) = 91.323$$

$$S_{xx} = \sum x_k^2 - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)^2 = 166.628.$$

Detta ger

$$\hat{b} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = 0.548.$$

$$\hat{a} = \overline{y} - \hat{b}\overline{x} = 75.74.$$

Den skattade regressionslinjen blir alltså

$$y = 75.74 + 0.548x.$$

Vi får också

$$s^2 = \frac{1}{4}\sum_{k=1}^{6}(y_k - \hat{a} - \hat{b}x_k)^2 = 14.34.$$

Symmetriskt 95% konfintervall för b:

$$b \in \hat{b} \pm F_{t_4}^{-1}(0.975)\frac{s}{\sqrt{S_{xx}}} = 0.548 \pm 2.776\frac{\sqrt{14.34}}{\sqrt{166.6}} = 0.55 \pm 0.81.$$

Om vi gör ett test av $H_0 : b = 0$ mot $H_A : b \neq 0$ kan vi alltså inte förkasta H_0 på 5% signnivå. □

Exempel: Vid Virginia Polythèque mätte man mängden syre, y, som krävs för nedbrytning av partiklar som funktion av mängden utsläppta partiklar, x, vid garvning. Linjärt samband. Siffror:

$$n = 33,\ \sum x_k y_k = 41355,\ \sum x_k^2 = 41086,\ \sum y_k^2 = 43117$$

$$\sum x_k = 1104,\ \sum y_k = 1124.$$

Skatta regrlinjen $y = a + bx$ och ge 95% konfintervall för b.

$$S_{xy} = \sum x_k y_k - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right) = 41355 - \frac{1}{33}\cdot 1104\cdot 1124 = 3572.$$

$$S_{xx} = \sum x_k^2 - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)^2 = 41086 - \frac{1}{33}\cdot 1104^2 = 4152.$$

Detta ger:

$$\hat{b} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{3572}{4152} = 0.86.$$

$$\hat{a} = \overline{y} - \hat{b}\overline{x} = \frac{1}{33}(1124 - 0.86 \cdot 1104) = 5.29.$$

Regressionslinjen:

$$y = 5.29 + 0.86x.$$

Konfintervall: Vi har $F_{t_{31}}^{-1}(0.975) = 2.04$. Vi behöver s.

$$S_{yy} = \sum y_k^2 - \frac{1}{n}\left(\sum y_k\right)^2 = 43117 - \frac{1}{33}1124^2 = 4833.$$

$$s^2 = \frac{1}{n-2}\left(S_{yy} - \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}}\right) = \frac{1}{31}\left(4833 - \frac{3572^2}{4152}\right) = 56.74.$$

Alltså

$$b = 0.86 \pm 2.04 \cdot \frac{\sqrt{56.74}}{\sqrt{4152}} = 0.86 \pm 0.24 \qquad (95\%).$$

□

Prediktion i linjär regression. Antag att vi vill ge ett prediktionsintervall för en ny observation

$$Y = a + bx + \epsilon$$

för ett givet värde x. Rimlig punktgissning: $\hat{a} + \hat{b}x$. Skriv

$$D = Y - (\hat{a} + \hat{b}x).$$

Vi har $\mathbb{E}[D] = 0$. Vad är $\mathbb{V}\mathrm{ar}(D)$? Eftersom $\hat{a} = \overline{Y} - \hat{b}\overline{x}$, får vi

$$D = Y - \overline{Y} - \hat{b}(x - \overline{x}).$$

Obs att Y och $\overline{Y}$ är oberoende, ty Y är en ny obs. Därför är också Y och $\hat{b}$ oberoende. Det gäller också att $\mathbb{C}\mathrm{ov}(\hat{b}, \overline{Y}) = 0$, ty

$$\begin{aligned}
\mathbb{C}\mathrm{ov}(\overline{Y}, S_{xy}) &= \mathbb{C}\mathrm{ov}\left(\overline{Y}, \sum x_k Y_k - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)\left(\sum Y_k\right)\right) \\
&= \sum x_k \mathbb{C}\mathrm{ov}(\overline{Y}, Y_k) - \overline{x}\sum \mathbb{C}\mathrm{ov}(\overline{Y}, Y_k) \\
&= \frac{1}{n}\sigma^2 \sum x_k - \overline{x}\sigma^2 = 0.
\end{aligned}$$

Vi får

$$\mathbb{V}\mathrm{ar}(D) = \sigma^2 + \frac{1}{n}\sigma^2 + (x-\overline{x})^2\mathbb{V}\mathrm{ar}(\hat{b}) = \left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(x-\overline{x})^2}{S_{xx}}\right)\sigma^2.$$

Alltså

$$\frac{D}{\sigma\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x-\overline{x})^2}{S_{xx}}}} \sim N(0,1).$$

Man kan ana att

$$\frac{D}{s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x-\overline{x})^2}{S_{xx}}}} \sim t_{n-2}.$$

Detta ger ett prediktionsintervall

$$Y \in \hat{a} + \hat{b}x \pm F^{-1}_{t_{n-2}}(1-\alpha/2)s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x-\overline{x})^2}{S_{xx}}}$$

med prediktionsgrad $1-\alpha$.

Exempel: Gör ett 90% prediktionsintervall för en ny observation Y vid $x = 40$ i Virginia Polythèque-exemplet. Vi har $F^{-1}_{t_{31}}(0.95) = 1.696$, $\overline{x} = 1104/33 = 33.45$, så $x - \overline{x} = 6.55$ så

$$Y \in 5.29 + 0.86 \cdot 40 \pm 1.696\sqrt{56.74}\sqrt{\frac{34}{33} + \frac{6.55^2}{4152}} = 36.7 \pm 13.0.$$

□

Exempel: Gör en linjär regression med data $(1,1)$, $(2,2)$, $(3,5)$, ett 90 % konfidensintervall för b, ett 90% prediktionsintervall för $x = 4$ och ett 90% prediktionsintervall för $x = 2$.

Vi har

$$n = 3,\ \sum x_k = 6,\ \sum y_k = 8,\ \sum x_k y_k = 20,\ \sum x_k^2 = 14,\ \sum y_k^2 = 30$$

Vi får

$$S_{xy} = 20 - \frac{1}{3} \cdot 8 \cdot 6 = 4,\ S_{xx} = 14 - \frac{1}{3}6^2 = 2,\ S_{yy} = 30 - \frac{1}{3}8^2 = \frac{26}{3}.$$

Alltså

$$\hat{b} = \frac{4}{2} = 2$$

och

$$\hat{a} = \overline{y} - \hat{b}\overline{x} = \frac{1}{3}(8 - 2 \cdot 6) = -\frac{4}{3}.$$

Regressionslinjen blir

$$y = -\frac{4}{3} + 2x.$$

Vidare är

$$s^2 = \frac{1}{n-2}\left(S_{yy} - \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}}\right) = \frac{26}{3} - \frac{4^2}{2} = \frac{2}{3}.$$

Konfintervallet är

$$b \in \hat{b} \pm F_{t_1}^{-1}(0.95)\frac{s}{S_{xx}} = 2 \pm 6.31\frac{\sqrt{2/3}}{\sqrt{2}} = 2 \pm 3.64 \qquad (90\%).$$

Prediktionsintervall för $x = 4$: Det gäller att $x - \overline{x} = 2$, så det 90%-iga predintervallet blir

$$\begin{aligned} Y \in \hat{a} + \hat{b}x \pm F_{t_{n-2}}^{-1}(0.95)s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x-\overline{x})^2}{S_{xx}}} &= -\frac{4}{3} + 2 \cdot 4 \pm 6.31\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{4}{3} + \frac{2^2}{2}} \\ &= 6.7 \pm 9.4. \end{aligned}$$

Prediktionsintervall för $x = 2$: Här är $x - \overline{x} = 0$, i övrigt samma siffror, så vi får

$$\begin{aligned} Y \in \hat{a} + \hat{b}x \pm F^{-1}_{t_{n-2}}(0.95)s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x-\overline{x})^2}{S_{xx}}} &= -\frac{4}{3} + 2 \cdot 2 \pm 6.31\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{4}{3}} \\ &= 2.7 \pm 6.0. \end{aligned}$$

Vi ser att det är svårare att prediktera med extrapolation än med interpolation.