Stockholm University

Föreläsning 8: Enkel linjär och icke-linjär regression

Matias Quiroz[1]

[1]Statistiska institutionen, Stockholms universitet

VT 2023

Innehåll

- Minsta kvadratmetoden för linjär regression.
- Prediktion i linjär regression.
- Regression mot medelvärdet.
- Residualanalys.
- R-kvadrat som mått på förklaringsgrad.
- Variansuppdelning i linjär regression.
- Icke-linjär regression via transformationer.

Prediktion är mer användbart än korrelation!

- Förra föreläsningen gick vi igenom begreppet samband och **speciellt linjärt samband** i form av korrelation.
- Korrelationskoefficienten är ett mått på linjärt samband.
- Att veta styrkan och riktningen på det linjära sambandet mellan två variabler är viktigt.
- Men det är mycket viktigare (och roligare!) att, om y och x har ett samband, prediktera värdet på y givet ett värde på x.
- En modell som predikterar y givet ett värde på x kallas för **regression** i statistik. I machine learning kallas det `AI` (artificial intelligence) ☺.
- När vi antar att y beror linjärt på x så kallas det för enkel linjär regression (**linear regression** på engelska).
- När vi antar att y beror linjärt på k variabler $x_1, x_2, \ldots, x_k$, så kallas modellen multipel linjär regression (**multiple linear regression** på engelska).

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden

- Fett mot protein för olika menyalternativ på Burger King:

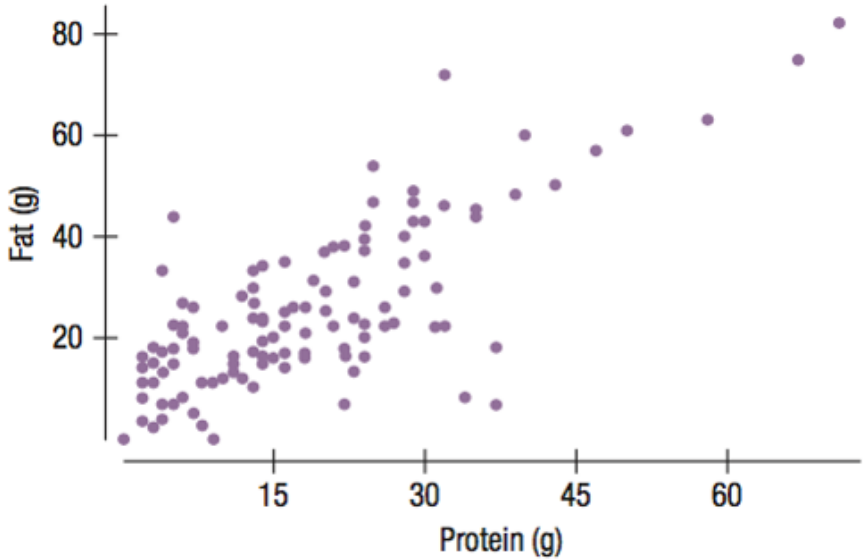


Figure 1: Figur 7.1 i De Veaux et al. (2021).

- Korrelationskoefficienten är $r = 0.76$.
- Det verkar finnas ett linjärt samband mellan y och x.
- Vilken rät linje ska vi välja för att beskriva sambandet?

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- Låt $\hat{y}$ vara modellens predikterade genomsnittliga värde för ett givet x.
- Om vi antar en linjär modell, så predikterar vi enligt

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x,$$

  där b_0 är interceptet (prediktionen för $\hat{y}$ när $x = 0$) och b_1 är linjens lutning.
- I praktiken finns det oändligt många värden på b_0 och b_1 vi kan välja.
- Vi vill välja b_0 och b_1 som anpassar data på ett optimalt sätt.
- Vad vi menar med "att anpassar data på ett optimalt sätt"? Vi vill minimera (i någon mening) modellens prediktionsfel.
- Prediktionsfelet mäts av **residualer**. En residual är skillnaden mellan en observation och modellens prediktion av observationen,

$$\text{Residual} = \text{Observation} - \text{Predikterat värde}.$$

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- En residual betecknas e och beräknas enligt

$$e = y - \hat{y} = y - (b_0 + b_1 x),$$

eftersom $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ för en linjär regression.

- Burger King datasetet med en anpassad linje (röd).

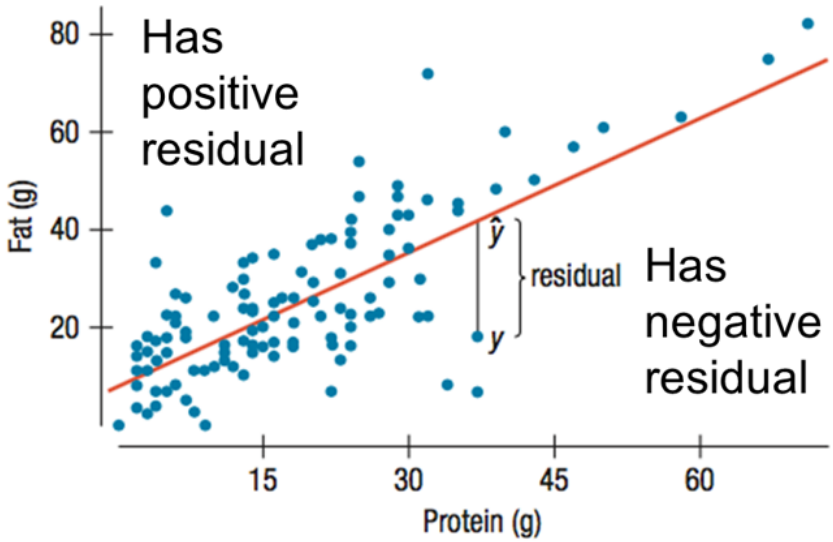


Figure 2: Från lärarmaterialet skapat av utgivaren av De Veaux et al. (2021).

- Den röda linjen beskrivs av ekvationen $\hat{y} = b_0 + b_1 x$.
- Observationer ovanför (under) linjen har positiva (negativa) residualer.

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- Vi vill att den räta linjen i någon mening minimerar prediktionsfelen, dvs residualerna.
- Ett tänkbart mått som mäter det sammanlagda prediktionsfelet är residualkvadratsumman (**residual sum of squares** på engelska)

$$\sum e^2, \tag{1}$$

där $e = y - \hat{y} = y - (b_0 + b_1 x)$.

- Varför kvadrerar vi residualerna? Vi vill inte att de positiva och negativa felen ska ta ut varandra.
- Man kan visa att

$$b_1 = r\frac{s_y}{s_x} \text{ och } b_0 = \overline{y} - b_1\overline{x},$$

ger en modell $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ som minimerar (1).

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ med

$$b_1 = r\frac{s_y}{s_x} \text{ och } b_0 = \overline{y} - b_1\overline{x},$$

kallas för **minsta kvadratanpassningen** av data.

- Metoden, dvs att hitta värden b_0 och b_1 som minimeras (1) kallas för minsta kvadratmetoden (**least squares method** på engelska).
- För Burger King exempel ger minsta kvadratmetoden

$$\widehat{Fat} = 8.4 + 0.91 Protein,$$

dvs

$$b_0 = 8.4 \text{ och } b_1 = 0.91.$$

- Hur tolkas b_0 och b_1?

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- I ekvationen $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ är b_0 interceptet och b_1 linjens lutning.
- Interceptet är det predikterade värdet när $x = 0$: $\hat{y} = b_0$.
- För Burger King exemplet: Den predikterade genomsnittliga fettmängden för en produkt utan proteiner.
- Man ska vara försiktig med att tolka interceptet som något meningsfullt.
- Exempel: Modell som predikterar blodtryck som en linjär funktion av vikt. Meningsfull tolkning av interceptet?
- Viktigt att fråga sig om det är meningsfullt att tolka interceptet innan man gör det!

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- En lutning i en rät linje defineras som

$$\text{Lutning} = \frac{\text{Förändring i } y \text{ variabeln}}{\text{Förändring i } x \text{ variabeln}} = \frac{\Delta y}{\Delta x}. \tag{2}$$

- Lutningen har enheten: enhet y/enhet x, dvs "enhet y per enhet x".
- I Burger King exemplet: 0.91 gram fett per gram protein.
- Vi kan skriva om (2) som

$$\Delta x \cdot \text{Lutning} = \Delta y. \tag{3}$$

- Antag att x ökar en enhet, dvs $x \to x + 1$. Då är $\Delta x = x + 1 - x = 1$.
- $\Delta x = 1$ i (3) ger $\Delta y = 1 \cdot \text{Lutning} = \text{Lutning}$.
- Således kan vi tolka b_1 som den förändringen i y som är associerad med en en-enhets ökning av x.

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- Det är frestande att säga: Att öka x med en enhet medför en ökning av y med b_1 enheter.
- Detta är en kausal tolkning! Vi säger att x medför y.
- **Regression modellerar inte kausalitet**.
- **Regression modellerar samband**.
- Kausalitet kräver teoretiska resonemang kring variablerna i fråga.
- I Burger King exemplet:
  - Lägger vi till ett gram protein så medför det i genomsnitt $b_1 = 0.91$ extra gram fett (kausal tolkning).
  - Produkter med ett extra gram protein tenderar att (i genomsnitt) ha $b_1 = 0.91$ extra fett (sambandstolkning).

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- Minsta kvadratanpassningens $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ egenskaper:
  1. Minimerar residualkvadratsumman i (1).
  2. Residualerna summerar till 0, dvs $\sum e = 0$.
  3. Den anpassade linjen går genom punkten $(\overline{x}, \overline{y})$.
- Man kan visa 1. genom att minimera (1) med avseende på b_0 och b_1. Se s.236 i De Veaux et al. (2021) (för den nyfikne studenten).
- Egenskap 2. kan visas genom att använda $b_0 = \overline{y} - b_1 \overline{x}$,

$$\begin{aligned}
\sum e &= \sum y - (b_0 + b_1 x) \\
&= \sum y - b_0 - b_1 x \\
&= \sum y - (\overline{y} - b_1 \overline{x}) - b_1 x \\
&= \sum y - \overline{y} - b_1 (x - \overline{x}) \\
&= \sum (y - \overline{y}) - b_1 \sum (x - \overline{x}),
\end{aligned}$$

och utnyttja att både $\sum(y - \overline{y})$ och $\sum(x - \overline{x})$ är 0.

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- För egenskap 3., det predikterade värdet för $\overline{x}$

$$\begin{aligned}\widehat{y} &= b_0 + b_1\overline{x} \\ &= \overline{y} - b_1\overline{x} + b_1\overline{x} \\ &= \overline{y},\end{aligned}$$

eftersom $b_0 = \overline{y} - b_1\overline{x}$. Alltså ligger punkten $(\overline{x}, \overline{y})$ på linjen.

Anpassa en rät linje: Minsta kvadratmetoden, forts

- Hur beräknar vi b_0 och b_1 i praktiken?
- Funktionen `lm` i R (linear models) räknar ut b_0 och b_1.
- R får inte användas på tentan. Enkelt att räkna genom formlerna

$$b_1 = r\frac{s_y}{s_x} \text{ och } b_0 = \overline{y} - b_1\overline{x}.$$

- Burger King exemplet:

Protein	Fat
$\overline{x} = 18.0$ g	$\overline{y} = 24.8$ g
$s_x = 13.5$ g	$s_y = 16.2$ g
$r = 0.76$	

Figure 3: Tabell från s.230 i De Veaux et al. (2021).

- $b_1 = 0.76 \cdot 16.2/13.5 = 0.912$ och $b_0 = 24.8 - 0.912 \cdot 18 = 8.384$ (utan avrundning).

Prediktion i linjär regression

- När vi anpassat modellen, dvs har ekvationen för linjen, börjar det roliga!
- Burger King gör reklam för en ny produkt med proteininnehåll 63 gram men det framgår inte från reklamen hur mycket fett den innehåller.
- Enligt vår modell kommer den i genomsnitt att den innehålla

$$\hat{y} = 8.4 + 0.91 \cdot 63 = 65.7$$

  gram fett.
- Enkelt att prediktera i linjär regression:
  1. Anpassa modellen med minsta kvadratmetoden, dvs räkna b_0 och b_1.
  2. Beräkna $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ för det x värdet man vill prediktera responsvariabeln för.
- Var försiktig med att prediktera för x-värden utanför intervallet för de x värden användes för att anpassa modellen.
- Linjära modellen måste vara trovärdig. Mer om hur vi kollar detta snart.

Vad händer om vi får nya data?

- Nya data ger ny deskriptiv statistik. Villanis `widget1` och `widget2` .
- Om vi tar ett nytt stickprov ändras minsta kvadratanpassningen, dvs hela linjen.
- Nya b_0 och b_1. Hur varierar lutningen b_1 från stickprov till stickprov?
- Ett stickprov på 193 broar i New York state. Skick mot ålder vid inspektion.

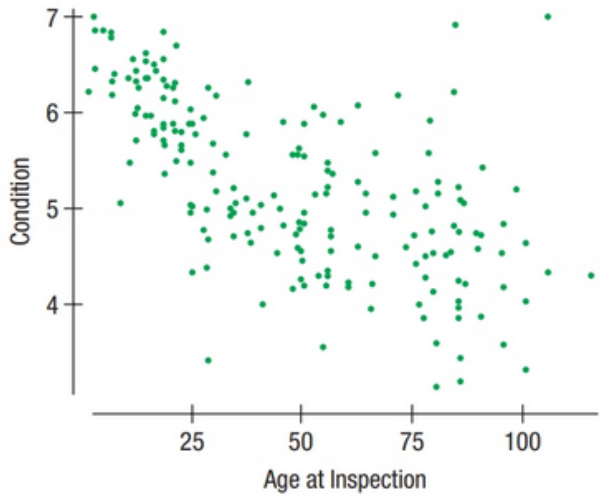


Figure 4: Figur från s.232 i De Veaux et al. (2021).

- $b_1 \approx -0.02$. Skickmåttet $\downarrow$ med ca 0.02 per år en byggnad föråldras.

Vad händer om vi får nya data?, forts.

- Beteckna lutningskoefficienten för populationen β_1.
- Stickprovets lutningskofficient är $b_1 \approx -0.02$. b_1 är en **skattning** av populationens lutningskoefficient β_1. Villani berättar mer.
- Finns det ett linjärt samband mellan skick och ålder **i populationen**?
- Antag att ett sådant samband inte finns. Då är $\beta_1 = 0$.
- Ett första resonemang: $b_1 \approx -0.02$ vilket är ganska nära 0. Förmodligen finns inget samband.
- Resonemanget ovan tar inte hänsyn till att b_1 **varierar från stickprov till stickprov**.

Vad händer om vi får nya data?, forts.

- Det finns 17493 broar i New York state. Tag 1000 nya stickprov, varje stickprov bestående av 193 observationer.
- **Samplingfördelningen** för lutningskoefficienten b_1:

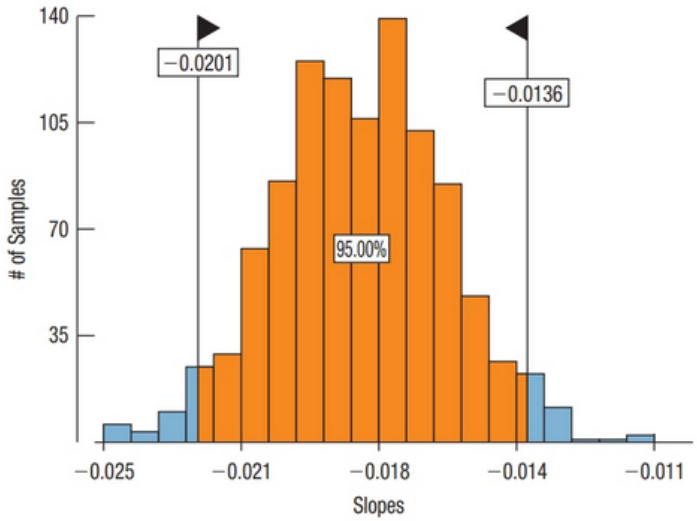


Figure 5: Figur från s.234 i De Veaux et al. (2021).

- Kommentarer:
  - 95% av alla stickprov ger lutningar mellan -0.0201 och -0.136.
  - Samplingfördelningen är (approximativt) symmetrisk.
  - Det negativa sambandet ($b_1 < 0$) uppkommer vid varje stickprov.
  - $b_1 \approx 0.02$ är inte ett alltför ovanligt värde.

Vad händer om vi får nya data?, forts.

- Simuleringarna motstrider att $\beta_1 = 0$ (varenda simulering visade att skattningen var < 0).
- Simuleringarna stödjer hypotesen att de finns ett negativt linjärt samband, dvs att $\beta_1 < 0$.
- Trots att b_1 var ganska liten, så hade den tillräcklig lite spridning för att vi skulle kunna säga $\beta_1 < 0$.
- Vi kallar detta ett **statistiskt signifikant** resultat. **Resultatet beror inte på slumpen**.
- Ett resultat som beror på slumpen kallas för ett **statistiskt insignifikant** resultat.
- Del 2 kommer att gå igenom hur vi kan komma fram till samma slutsats utan att ta 1000 nya stickprov.

Regression mot medelvärdet

- Regression mot medelvärdet (**regression to the mean** på engelska): En avvikande x observation resulterar i en prediktion $\hat{y}$ som avviker mindre.
- Exempel: Antag att x avviker 2 SD (s_x) från $\overline{x}$. Då avviker $\hat{y} < 2$ SD (s_y) från $\overline{y}$.
- $\hat{y}$ är närmare sitt medelvärde (mätt i SD s_y) än vad x är närmare sitt medelvärde (mätt i SD s_x).
- Regressionen har "dragit ner" prediktionen närmare medelvärdet för y, jämfört med hur långt ifrån x låg från medelvärdet för x.
- Låt oss göra en regression på standariserade data för att förklara fenomenet.

Regression mot medelvärdet, forts.

- Standariserade data

$$z_x = \frac{x - \overline{x}}{s_x} \text{ och } z_x = \frac{y - \overline{y}}{s_y}.$$

- Medelvärdena efter standarisering är 0, dvs $\overline{z}_x = 0$ och $\overline{z}_y = 0$.
- Standardavvikelserna efter standarisering är 1, dvs $s_{z_x} = 1$ och $s_{z_y} = 1$.
- En minsta kvadratanpassning för regressionen z_y mot z_x ger

$$\hat{z}_y = b_0 + b_1 z_x,$$

där $b_0 = \overline{z}_y - b_1 \overline{z}_x$ och $b_1 = r\frac{s_{zy}}{s_{z_x}}$, och r är korrelationskoefficienten mellan z_y och z_x.

- Notera att $b_0 = 0 - b_1 \cdot 0 = 0$ och $b_1 = r\frac{1}{1} = r$.

Regression mot medelvärdet, forts.

- Minsta kvadratanpassningen är därför

$$\hat{z}_y = r z_x .$$

- $-1 < r < 1$, dvs kan inte vara större eller mindre än 1.
- Exempel: Låt $z_x = 2$ (x avviker 2 SD från $\overline{x}$). För alla $-1 < r < 1$,

$$\hat{z}_y = r \cdot 2 < 2, \text{ dvs } \hat{y} \text{ avviker } < 2 \text{ SD från } \overline{y}.$$

Residualanalys

- En förutsättning för att använda linjär regression är att den linjära modellen måste vara trovärdig, dvs anpassa observerade data.
- "All models are wrong, but some are useful" – George E. P. Box.
- En **residualanalys** är en mycket viktig del av modellvalidering.
- Om modellen beskriver data på ett adekvat sätt, så kommer residualerna inte ha något tydligt mönster i sig. De beter sig slumpmässigt.
- Stora enskilda residualer ger information om outliers. Dessa bör examineras.
- Vad räknas som en stor residual? Om residualerna är normalfördelade, så vet vi att 99.7% ligger ± 3 SD från sitt medelvärde.
- Vad är residualernas medelvärde?
- Tips: $\sum e = 0$ enligt egenskap 2. från slide 11.

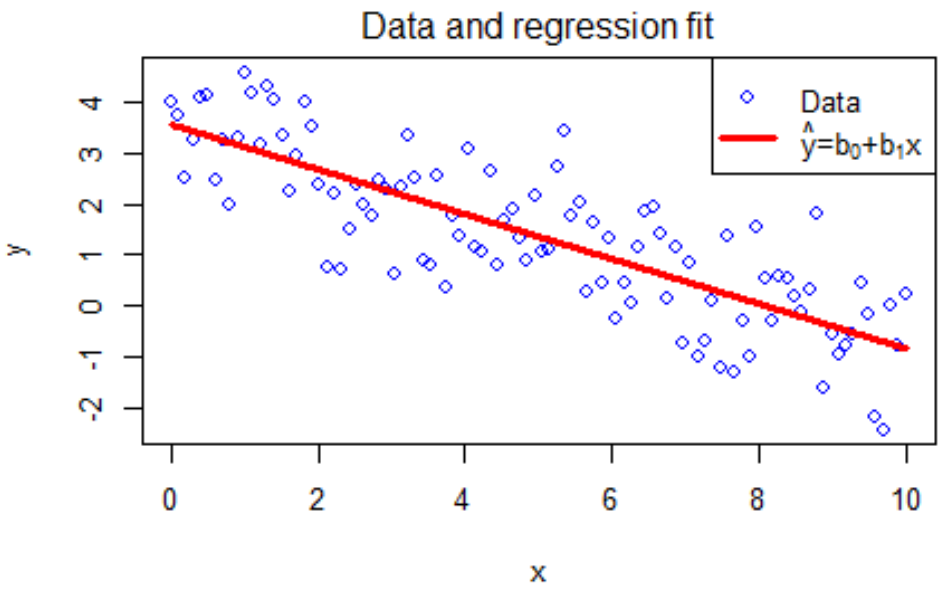
Residualanalys, forts.

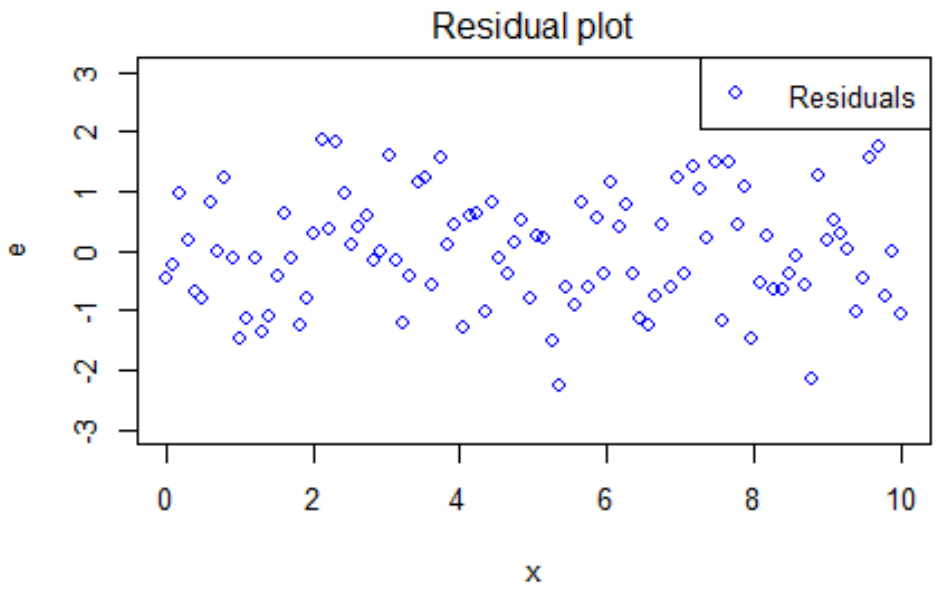
- $\overline{e} = \frac{\sum e}{n} = \frac{0}{n} = 0$, dvs residualernas medelvärde är 0.
- Residualernas standardavvikelse kan räknas enligt

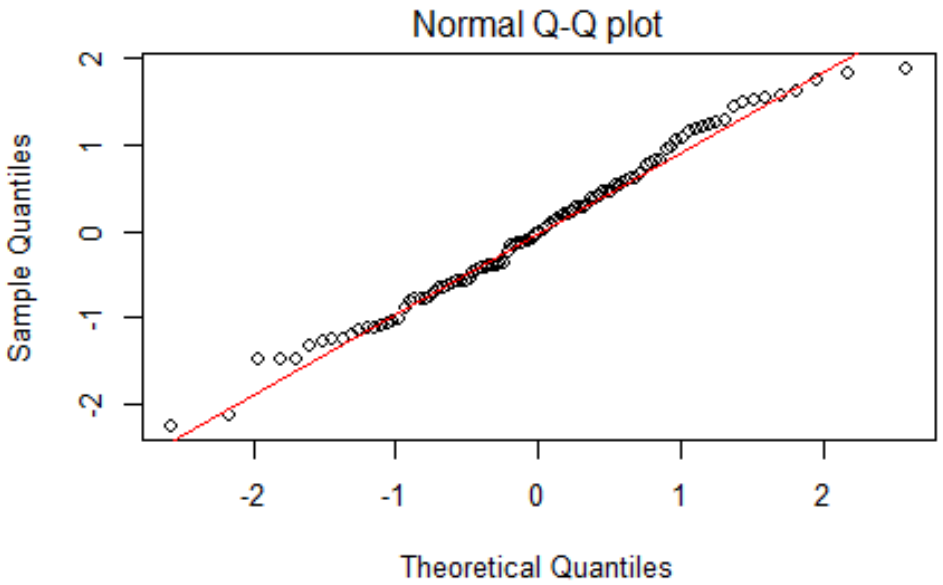
$$s_e = \sqrt{\frac{\sum e^2}{n-2}}.$$

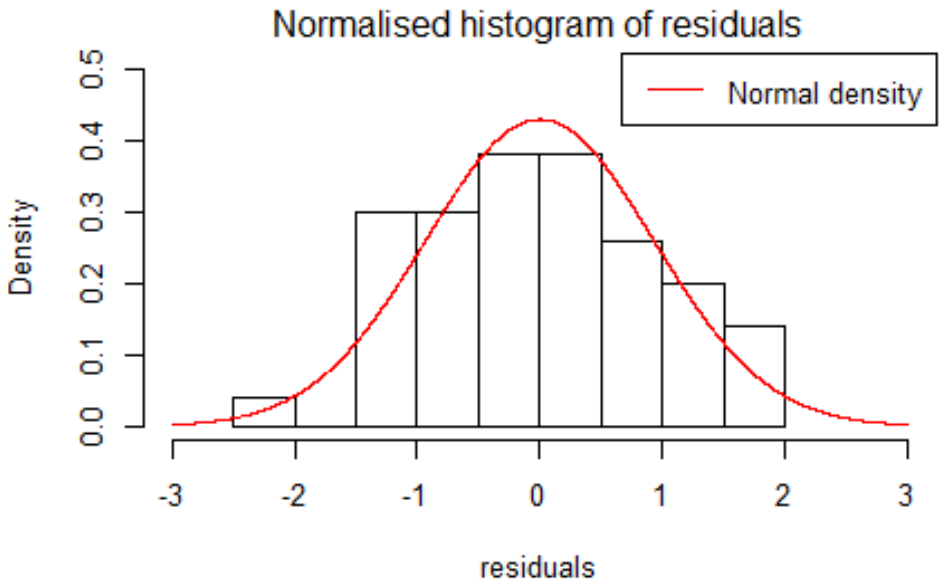
- Varför delar vi med $n-2$ istället för n eller $n-1$? Vi behöver lära oss mer statistik innan vi kan förklara det.
- I del två av kursen kommer vi att räkna **samplingfördelningen** för b_1. För att göra det behöver vi fler modellantaganden som medför:
  1. **Residualerna är normalfördelade**.
  2. **Residualernas varians är konstant**, dvs beror inte på x.
- Vi kan undersöka 1. genom 68–95–99.7 regeln eller en normalfördelningsplot.
- Vi kan undersöka 2. genom att plotta e mot x och se om spridningen är ungefärlig densamma för alla x.

Residualerna uppfyller modellantaganden

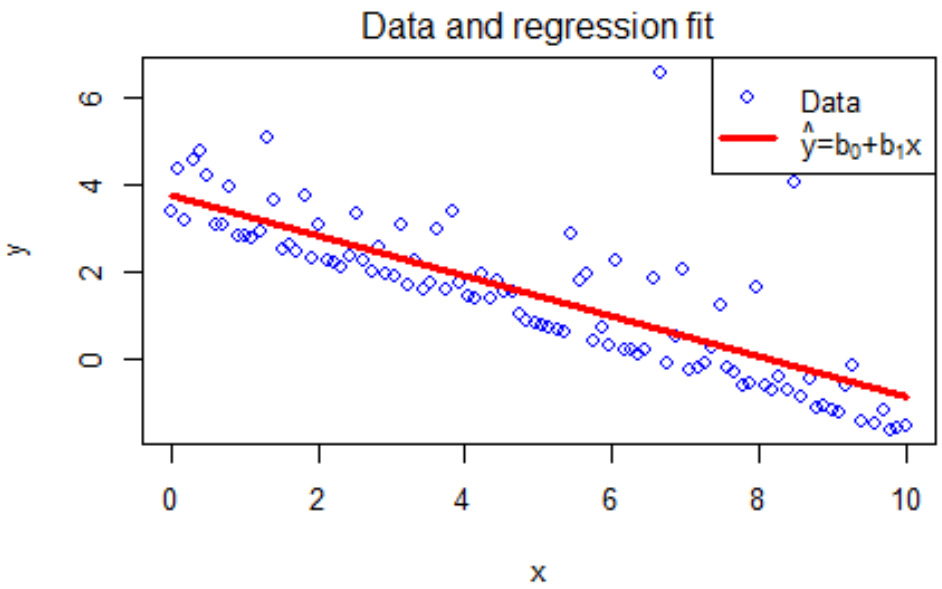


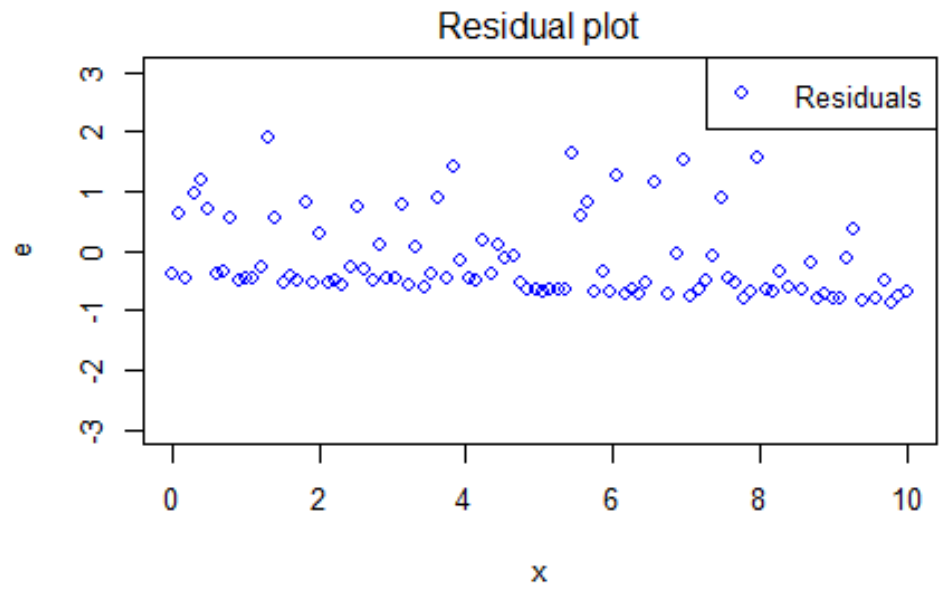


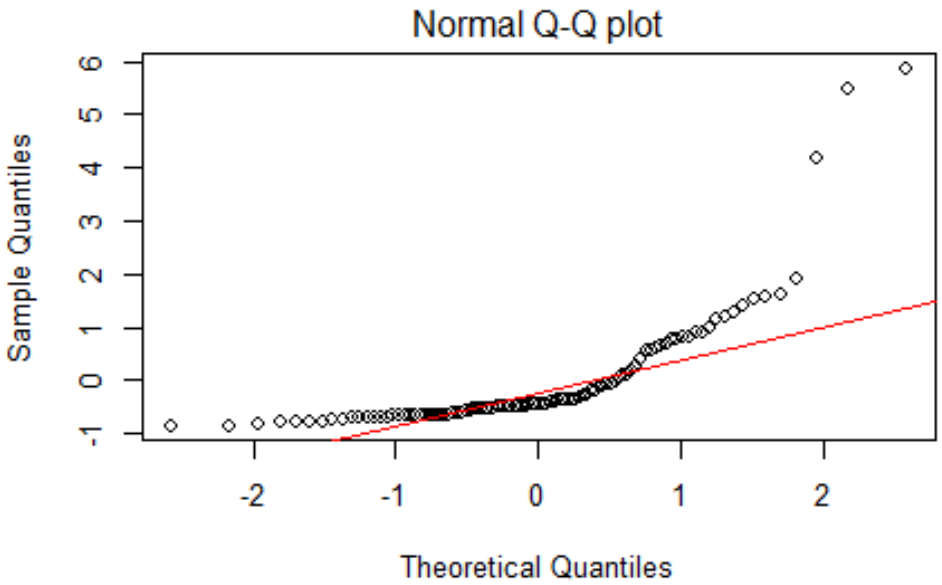


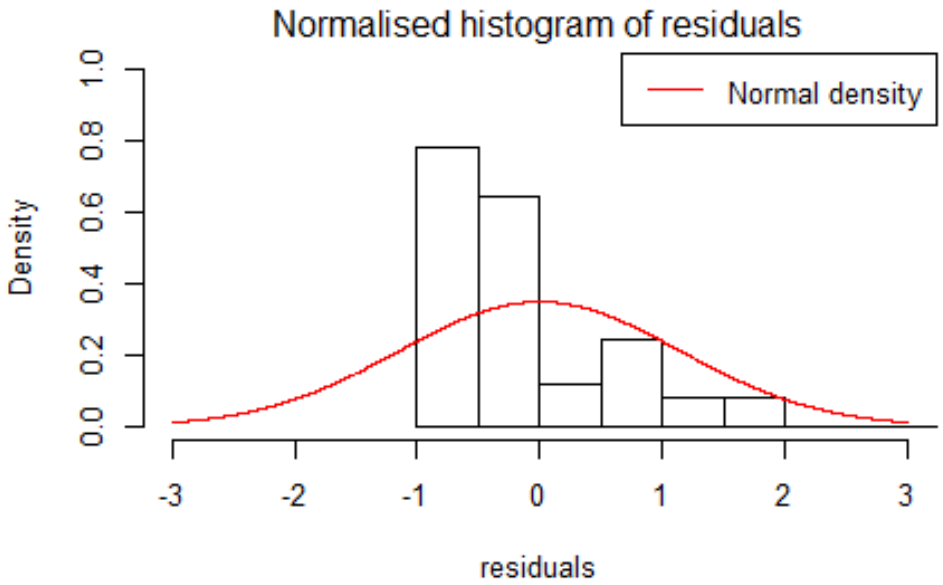


Residualerna är inte normalfördelade (skeva åt höger)

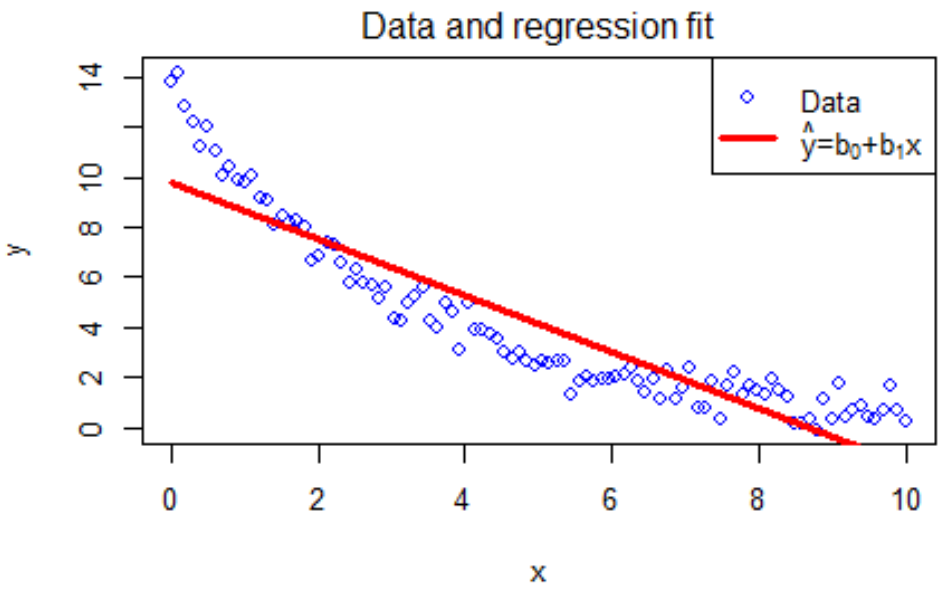


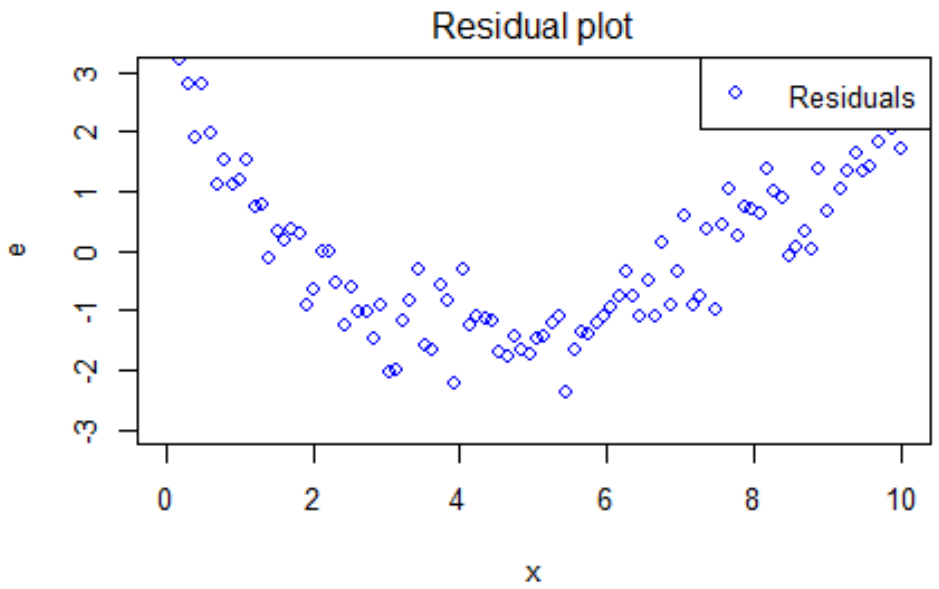


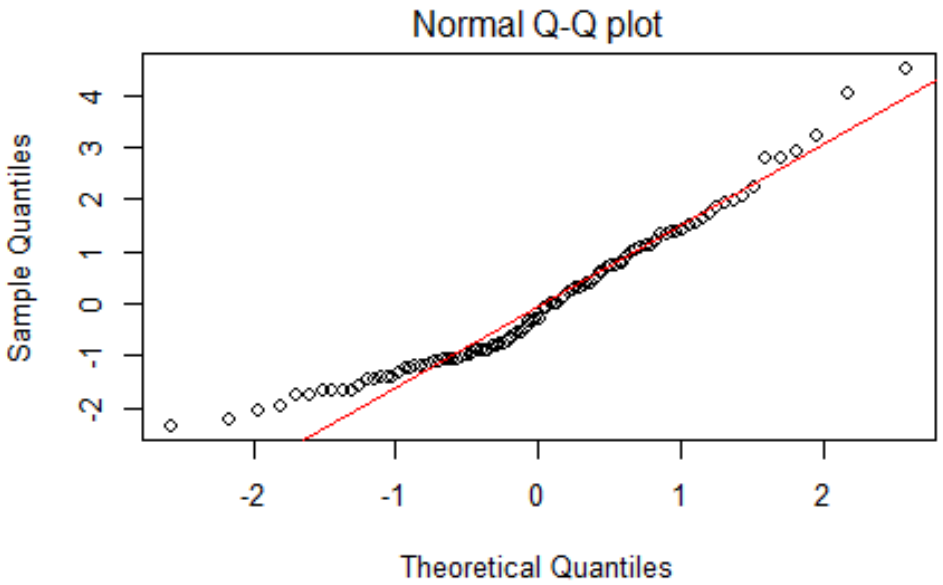


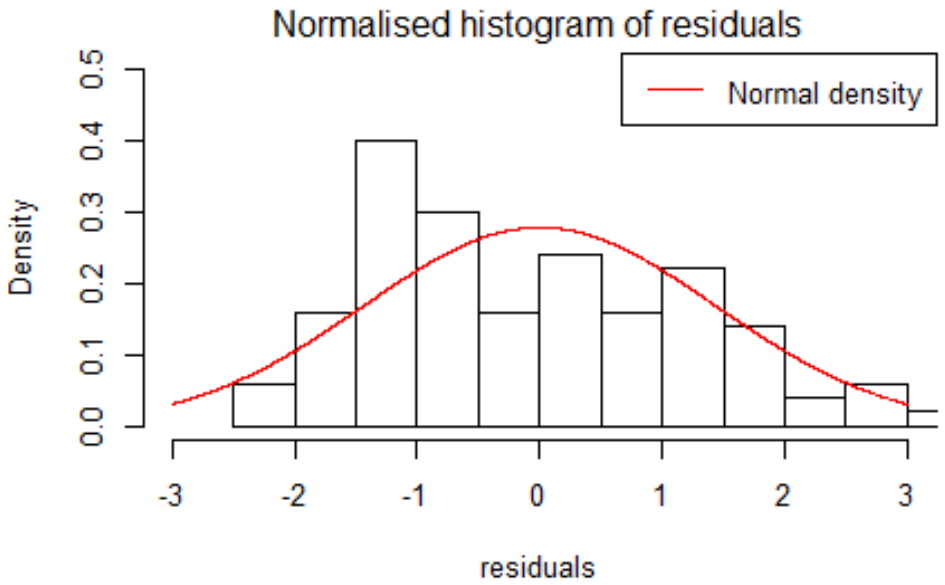


Residualerna är inte slumpmässiga

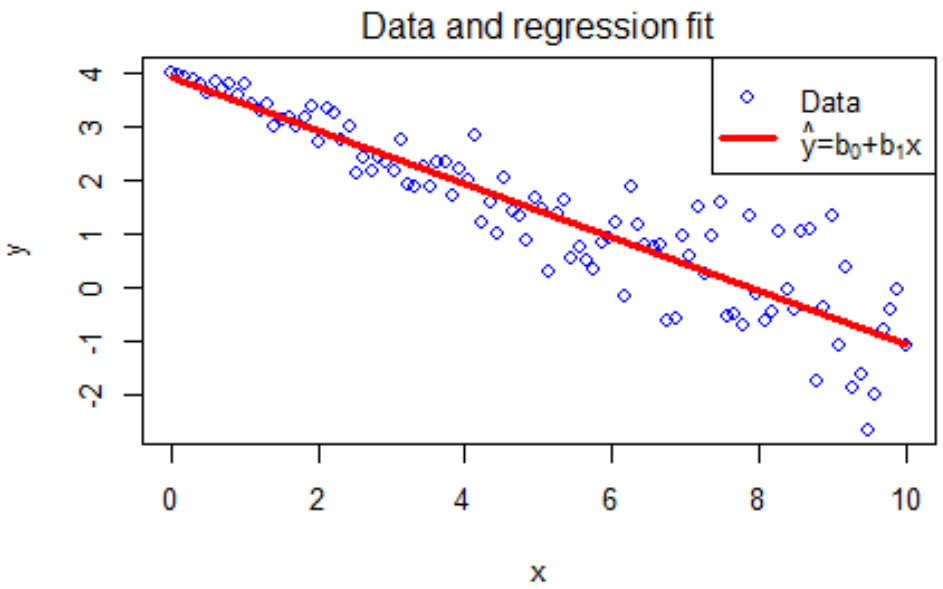


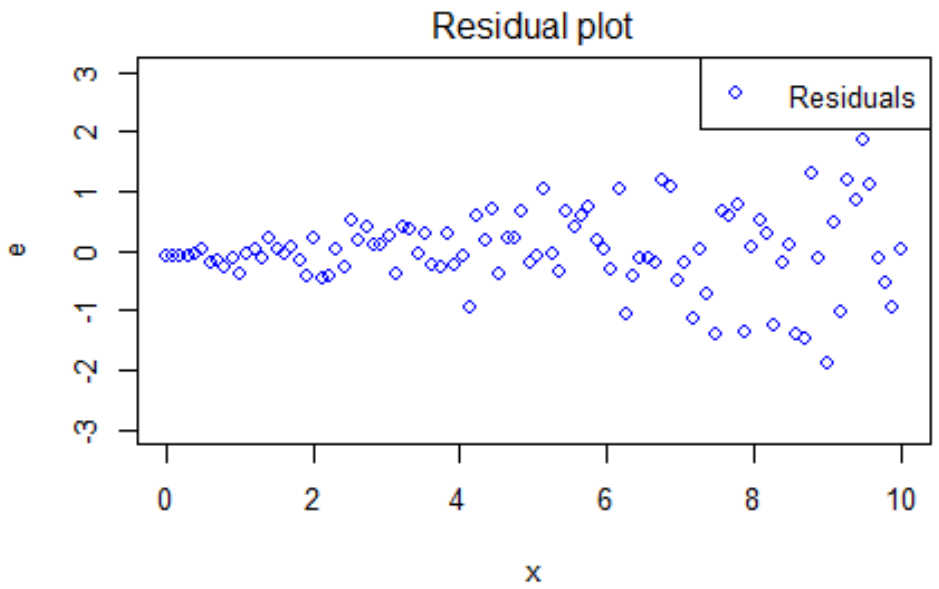


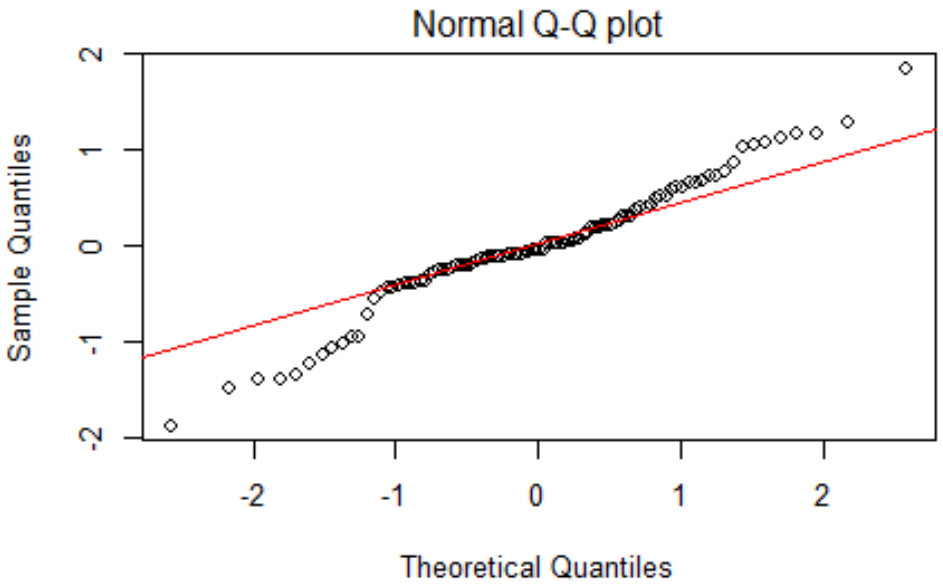


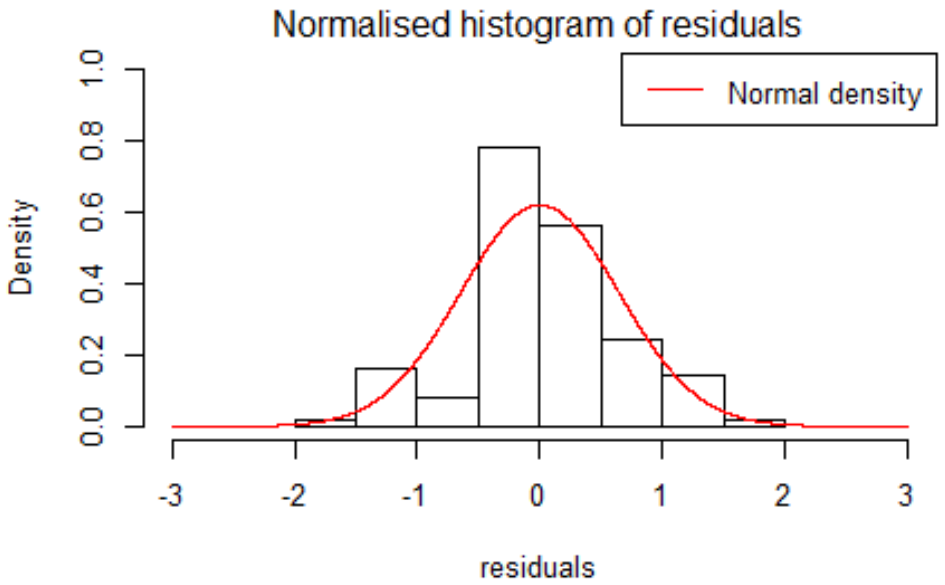


Residualernas varians är inte konstant









R-kvadrat: Mått på förklarad variation

- Varför anpassar vi regressionsmodeller?
  1. **Förstå sambandet** mellan y och x (positivt/negativt, inget linjärt samband).
  2. **Prediktera** y givet ett värde på x.
  3. **Förklara variationen** i y med hjälp av x
- Vad menar vi med att "förklara variation i y med hjälp av x" ?
- Antag först att vi bara har variabeln y (dvs inget x). Ett tänkbart mått på variationen i y från Föreläsning 3 är den **totala kvadratsumman**,

$$\text{SST} = \sum (y - \bar{y})^2.$$

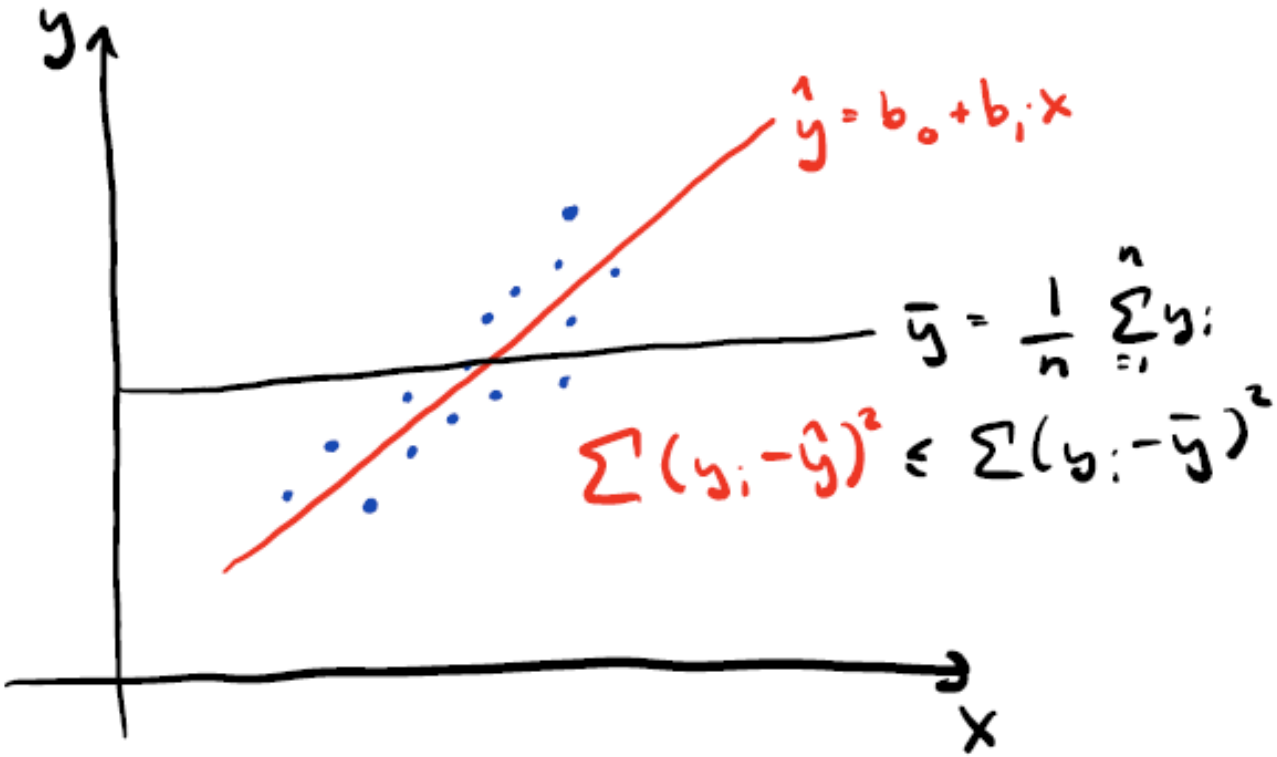
- Tag nu in x och skatta en regression $\hat{y} = b_0 + b_1 x$. Ett tänkbart mått på variationen i y runt regressionslinjen är **residualkvadratsumman**

$$\text{SSE} = \sum (y - \hat{y})^2.$$

- Vilken av SST och SSE är störst?

R-kvadrat: Mått på förklarad variation, forts.

- Man kan visa att $\text{SSE} \leq \text{SST}$. Ju mindre SSE är i förhållande till SST, desto mer av den totala variationen SST fångas av regressionen.



- Figuren visar hur en regression ($\hat{y}$) lämnar mindre variation kvar jämfört med att inte ha en regression ($\overline{y}$).

R-kvadrat: Mått på förklarad variation, forts.

- SST är den **totala oförklarade variationen**.
- SSE är den variationen som är kvar efter regressionen, dvs **regressionens oförklarade variation**.
- SSE/SST är **regressionens oförklarade variation som andel av den totala oförklarade variationen**.
- Eftersom $0 \leq \text{SSE} \leq \text{SST}$, så ligger $0 \leq \text{SSE}/\text{SST} \leq 1$.
- R-kvadrat, betecknad R^2 **mäter andelen av den totala variationen som förklaras av regressionen**, dvs modellens **förklaringsgrad**.
- Den defineras enligt

$$R^2 = 1 - \frac{\text{SSE}}{\text{SST}},$$

eller i ord

$$\text{Andel förklarad variation} = 1 - \text{Andel oförklarad variation}.$$

R-kvadrat: Mått på förklarad variation, forts.

- Man kan visa att R^2 också kan räknas genom r^2, därav namnet.
- R^2 ligger mellan 0 och 1. Ibland uttrycks den i procent och multipliceras då med 100.
- $R^2 \approx 1$ betyder att den linjära modellen har förklarat mestadels av variationen i y med hjälp av x.
- $R^2 \approx 0$ betyder att den linjära modellen förklarar nästan inget av variationen i y med hjälp av x.
- Det går inte att säga vad ett bra värde på R^2 är, det beror på applikationen.
- I vetenskapliga experiment kan R^2 vara runt 0.8-0.9 om modellen är bra.
- I de sociala vetenskaperna får man vara nöjd med 0.3-0.5. Svårare att prediktera variabler i t.ex ekonomi jämfört med fysik.

R-kvadrat: Mått på förklarad variation, forts.

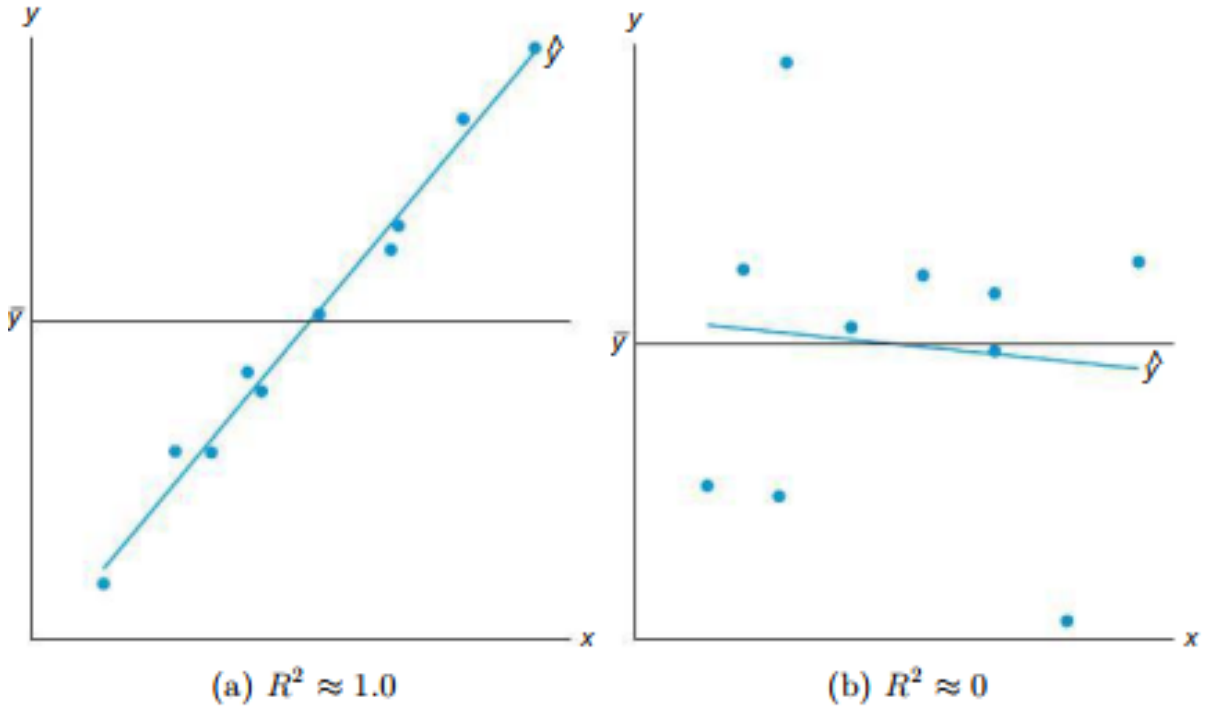


Figure 6: Figur 11.10 in Walpole et al. (2016).

- Figuren till vänster visar en linjär regression som fångar mestadels av den totala variationen.
- Figuren till höger visar en linjär regression som fångar väldigt lite av den totala variationen.

Variansuppdelning i linjär regression

- Vi har definierat två olika variationer i linjär regression:
  - SST är den **totala oförklarade variationen** i y.
  - SSE är residualernas variation, dvs **regressionens oförklarade variation**.
- Det finns en tredje variation som mäter hur mycket prediktionen $\hat{y}$ varierar kring $\overline{y}$.
- Denna kallas regressionens kvadratsumma (**sum of squares regression** på engelska),

$$\text{SSR} = \sum(\hat{y} - \overline{y})^2.$$

- Ett viktigt resultat är att SST kan dekomponeras enligt

$$\text{SST} = \text{SSR} + \text{SSE},$$

dvs

$$\sum(y - \overline{y})^2 = \sum(\hat{y} - \overline{y})^2 + \sum(y - \hat{y})^2.$$

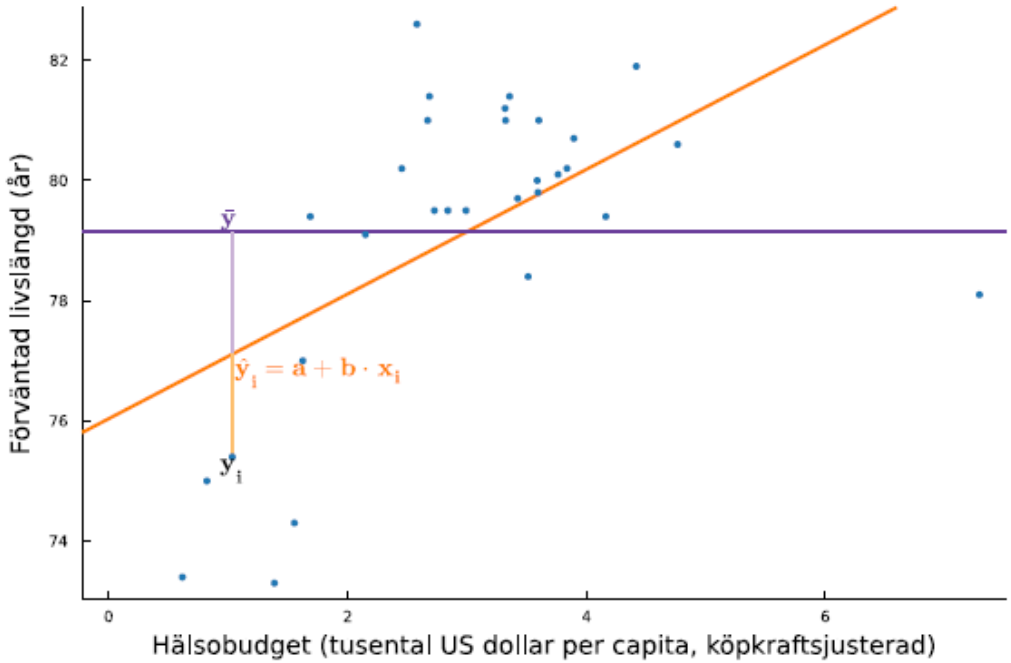
- Resultatet kallas för variansuppdelning. Analysis of variance (**ANOVA**) på engelska.

Variansuppdelning i linjär regression, forts.

- Intuition för resultatet fås genom omskrivningen

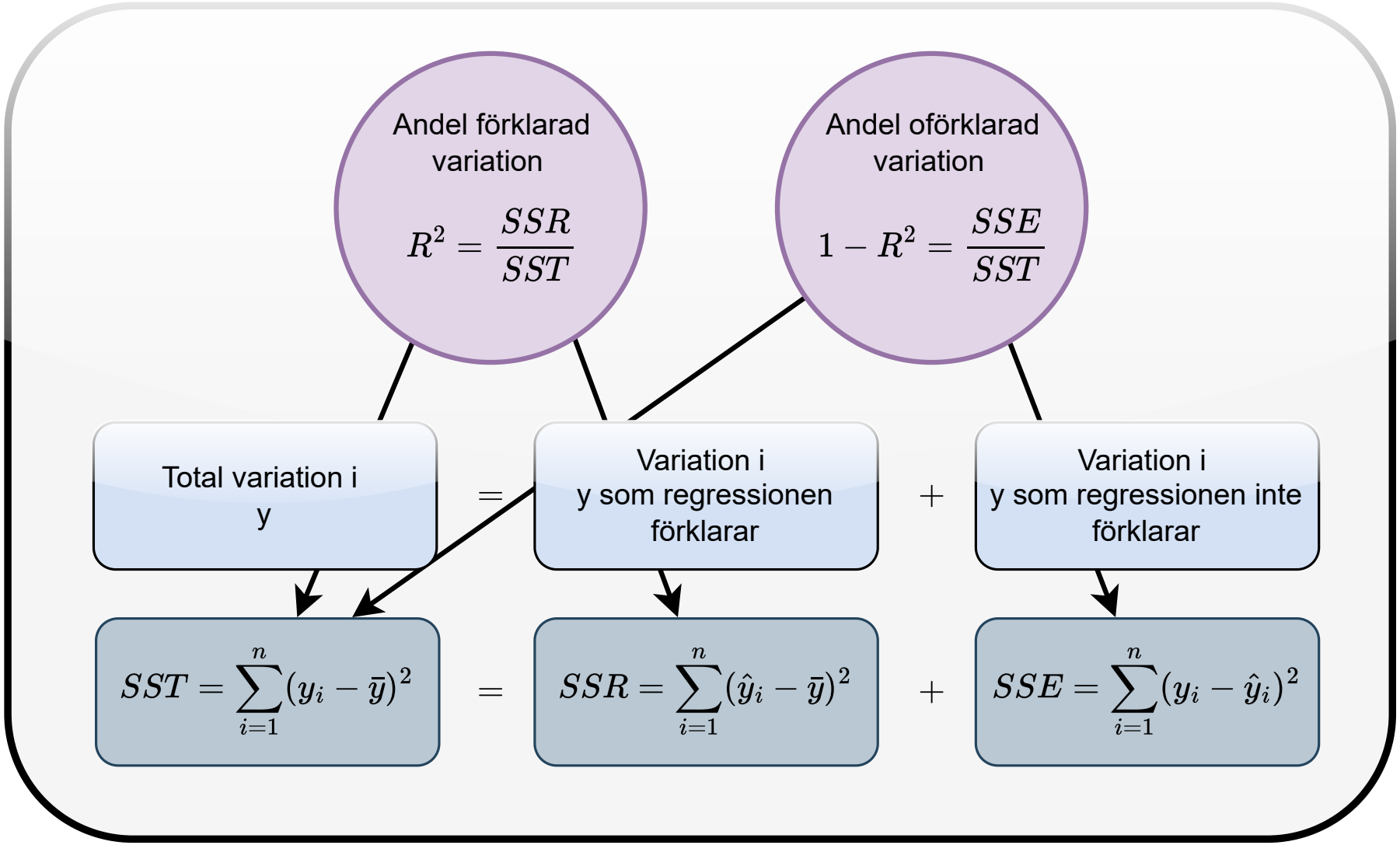
$$y - \overline{y} = y - \hat{y} + \hat{y} - \overline{y} = (y - \hat{y}) + (\hat{y} - \overline{y}).$$

- Variansuppdelning i regressionen förväntad livslängd mot hälsobudget för olika länder:



- Notera att R-kvadrat också kan räknas som $R^2 = \frac{\text{SSR}}{\text{SST}}$.

R-kvadrat och variansuppdelning



Repetition av antaganden i linjär regression

- Både y och x måste vara numeriska variabler.
- Det finns andra regressionsmodeller man kan använda när y är en kategorisk variabel — fortsätt läsa statistik (SDA II)!
- Variablerna måste förhålla sig (approximativt) linjärt till varandra.
- Uppenbara outliers kan påverka minsta kvadratanpassningen. Anpassa linjen utan outliers för att kontrollera att resultaten blir ungefär desamma.
- Spridningen för y densamma för alla x. Residualernas varians måste vara konstant.
- Residualerna bör vara (approximativt) normalfördelade.
- Vad gör vi om variablerna inte förhåller sig linjärt?
- Förra föreläsningen nämnde vi att man kan transformera variablerna för att få ett mer linjärt förhållande.
- Icke-linjär regression via potenstransformationer!

Icke-linjär regression via transformationer

- **Ladder of powers**. Stege av potenstransformationer:

Potenstransformationer för y och x.

Stegnivå	y	x
1	y^2	x^2
2	y	x
3	$y^{1/2}$	$x^{1/2}$
4	$\log(y)$	$\log(x)$
5	$-y^{-1/2}$	$-x^{-1/2}$
6	$-y^{-1}$	$-x^{-1}$

Figure 7: Tabell från Lab 4. Ladder of powers.

- Om y och x inte förhåller sig linjärt så kan vi transformera variablerna för att få ett linjärt förhållande.

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- Notera att $y^{1/2} = \sqrt{y}$, $-y^{-1/2} = -1/\sqrt{y}$ och $-y^{-1} = -1/y$.
- Varför har Stegnivå 5 och 6 negativa tecken?
- Negativa tecken på dessa stegnivåer ser till att **ordningen bevaras**.
- Utan det negativa tecknet på de två sista transformationer så bevaras inte ordningen. Exempel om sista transformationen inte har ett minustecken:

$$3 < 6, \text{ och för de transformerade värden } 1/3 > 1/6.$$

- Med det **negativa tecknet bevaras ordningen**, eftersom

$$3 < 6, \text{ och för de transformerade värden } -1/3 < -1/6.$$

Icke-linjär regression via transformationer

- Plotta y mot x och gå upp och ner för stegen (dvs transformera) tills sambandet mellan de transformerade variablerna ter sig någorlunda linjärt.
- Ska vi röra oss upp eller ner längst stegen?
- Beror på formen på sambandet. Mer av en konst än vetenskap, men det finns tumregler. **John Tukeys cirkel**.
- Transformationer av x kallas **feature learning** i machine learning.

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

Potenstransformationer för y och x.

Stegnivå	y	x
1	y^2	x^2
2	y	x
3	$y^{1/2}$	$x^{1/2}$
4	$\log(y)$	$\log(x)$
5	$-y^{-1/2}$	$-x^{-1/2}$
6	$-y^{-1}$	$-x^{-1}$

Figure 8: Tabell från Lab 4. Ladder of powers.

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- John Tukeys cirkel för hur man rör sig upp och ner längst stegen:

Potens	y	x
2	y^2	x^2
1	y	x
$\frac{1}{2}$	$\sqrt{y}$	$\sqrt{x}$
"0"	$\log y$	$\log x$
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{y}}$	$-\frac{1}{\sqrt{x}}$
-1	$-\frac{1}{y}$	$-\frac{1}{x}$

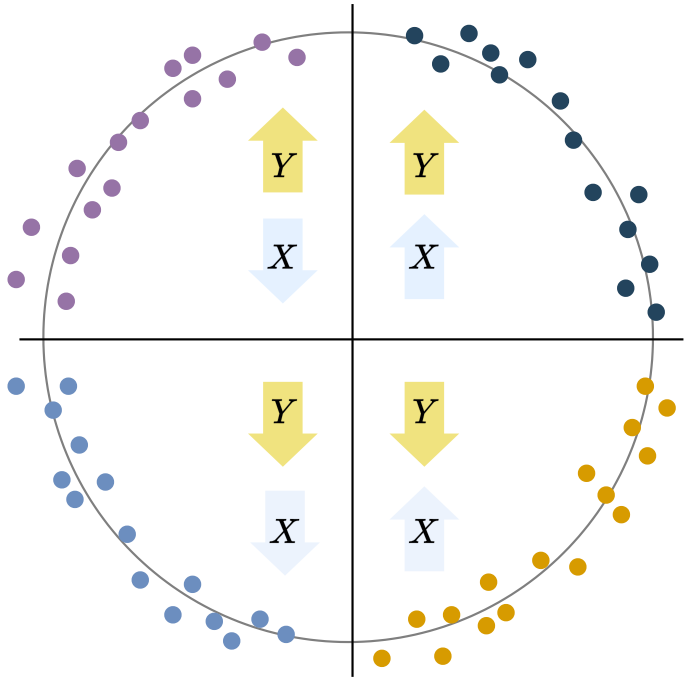
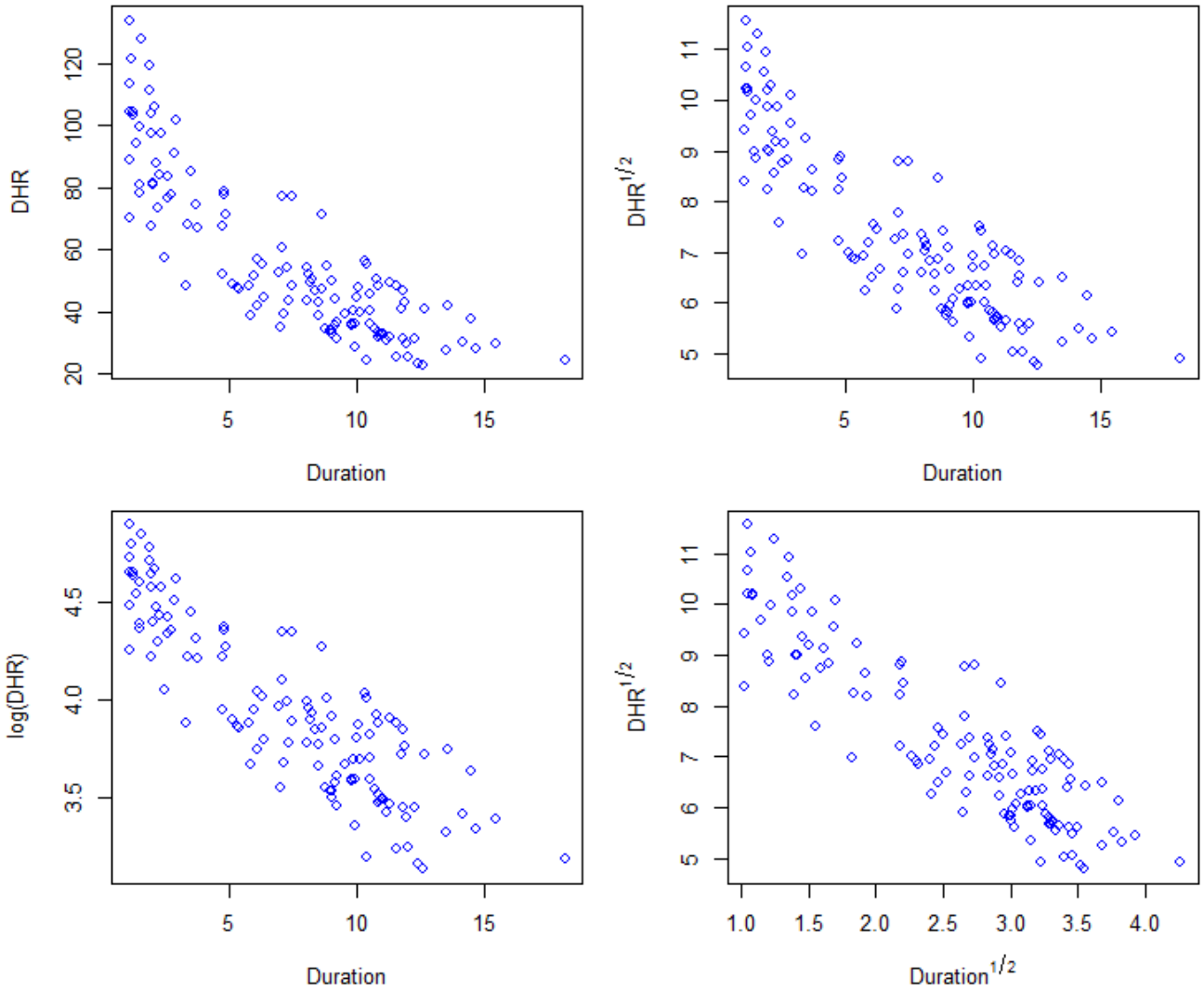


Figure 9: Stege av potenstransformationer (vänster) och Tukeys cirkel (höger).

- Om data är en avtagande funktion som är konvex (konkav uppåt) befinner vi oss på tredje kvadranten. Flytta $x \downarrow$ och/eller $y \downarrow$ i stegen.
- Om data är en avtagande funktion som är konkav befinner vi oss på första kvadranten. Flytta $x \uparrow$ och/eller $y \uparrow$ i stegen.

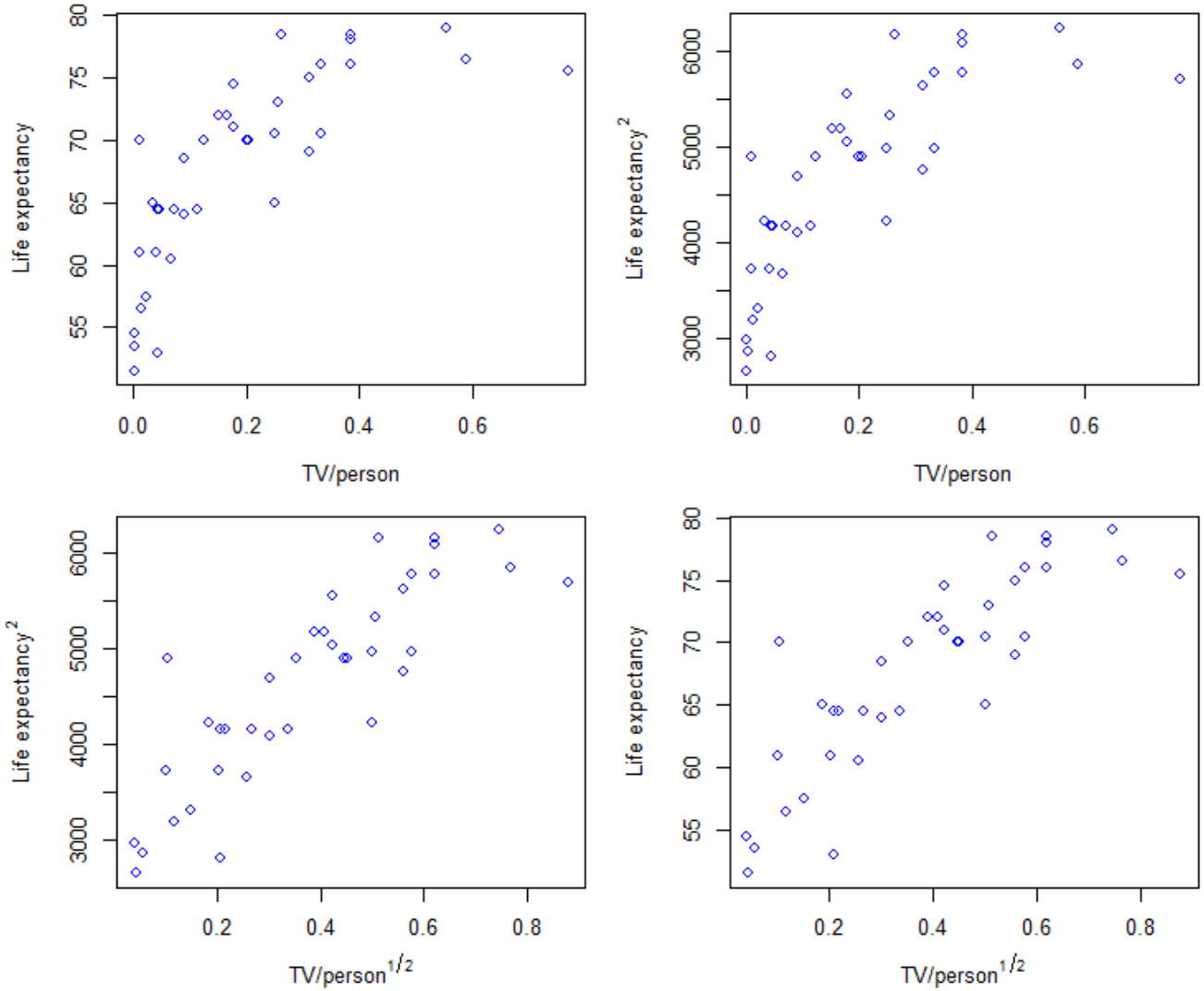
Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- Pingviners dykpuls mot tid för dykningen. Tredje kvadranten på Tukeys cirkel.



Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- Förväntad livslängd mot antal TV per capita. Andra kvadranten på Tukeys cirkel.



Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- När vi bestämt transformation(er) så anpassar vi en regression på transformerade variabler.
- I pingvinexemplet väljer vi transformationerna $DHR^{1/2}$ och $Duration^{1/2}$.
- Vi anpassar modellen

$$\widehat{DHR^{1/2}} = 11.847 - 1.746 Duration^{1/2}.$$

- Notera att anpassningen ger en prediktion i den transformerade skalan, dvs $DHR^{1/2}$.
- Hur går vi från $\widehat{DHR^{1/2}} \implies \widehat{DHR}$?
- Vi behöver "reversera transformationen". En funktion som reverserar en transformation kallas för en inverstransformation.

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

Prediktion i originalskala (kolumn till höger) för olika transformerade responser (kolumn till vänster).

Transformation av responsen	**Prediktion i y-skala ($\hat{y}$)**
y^2	$\left(\widehat{y^2}\right)^{1/2}$
y	$\hat{y}$
$y^{1/2}$	$\left(\widehat{y^{1/2}}\right)^{2}$
$\log(y)$	$\exp\left(\widehat{\log(y)}\right)$
$-y^{-1/2}$	$\left(\widehat{-y^{-1/2}}\right)^{2}$
$-y^{-1}$	$-\left(\widehat{-y^{-1}}\right)^{-1}$

Figure 10: Tabell från Lab 4. Prediktion i originalskala med olika transformerade responser.

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- Antag att vi vill prediktera genomsnittliga dykpulsen för en pingvin som dyker 16 minuter, dvs $Duration^{1/2} = 16^{1/2} = 4$.
- I $DHR^{1/2}$ skala är prediktionen

$$\widehat{DHR^{1/2}} = 11.847 - 1.746 \cdot 16^{1/2} = 4.863.$$

- I DHR skala blir prediktionen $\widehat{DHR} = 4.863^2 \approx 23.65$ slag per minut.

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- Notera att anpassningen är **linjär i de transformerade skalorna**.

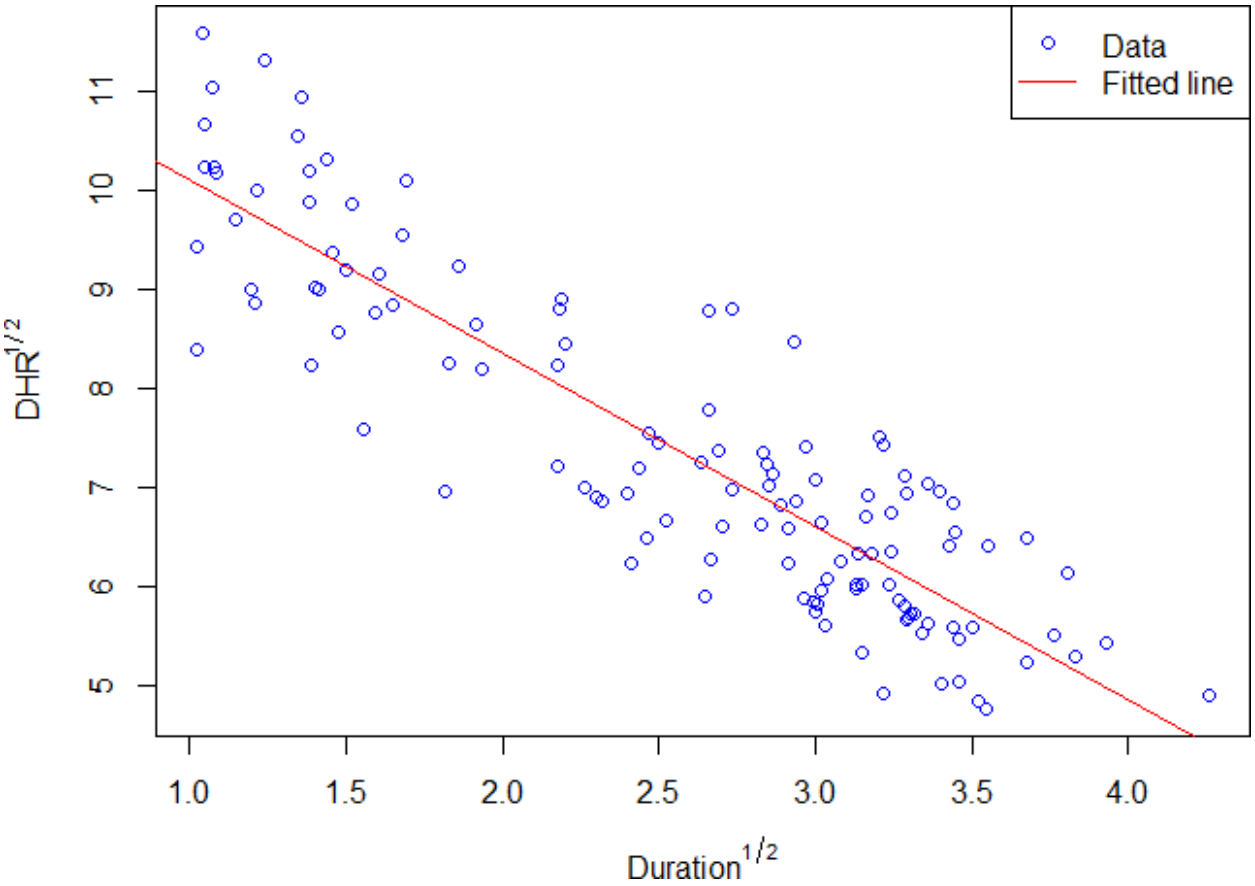


Figure 11: Data och anpassad regression i transformerad skala.

- Varför kallar vi det här för icke-linjär regression?

Icke-linjär regression via transformationer, forts.

- Regressionen är **icke-linjär i originalskalan**!

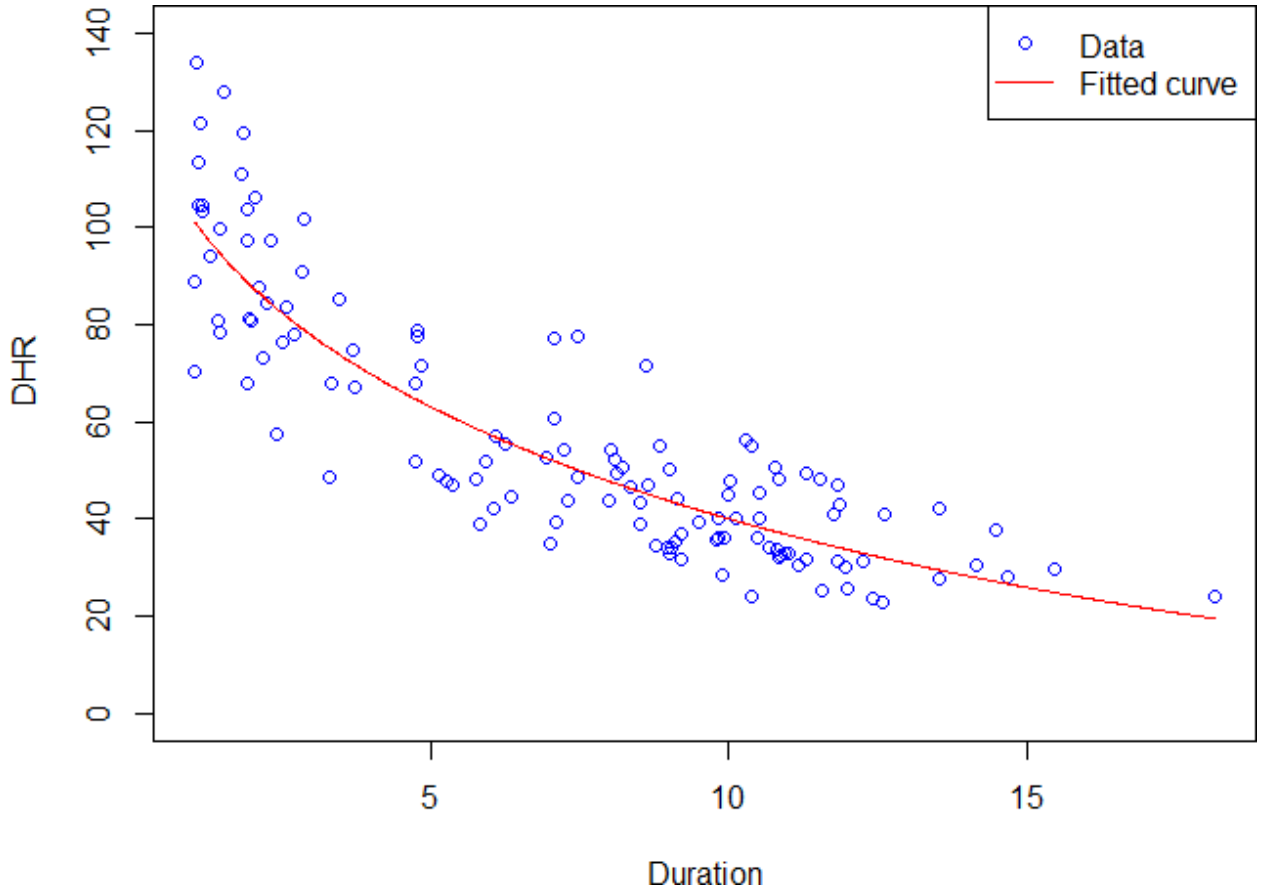


Figure 12: Data och anpassad regression i original skala.

Transformationer i linjär regression, forts.

- Det finns tolkningar av b_1 för vissa transformationer men vi går inte igenom dom i SDA I[1].
- Är en modell användbar om vi inte kan tolka b_1?
- Om målet är prediktion så bryr vi oss inte om att tolka koefficienter.
- **Deep learning** modeller saknar tolkningar av koefficienterna. Extremt bra på prediktion för många typer av data, speciellt bilder.
- Deep learning kan ses som en regression där man gör väldigt komplexa transformationer av x variabeln[2].

[1] Några modeller i SDA II. Ännu fler i Generaliserade Linjära Modeller (GLM).
[2] Vår kurs Maskininlärning på masternivå lär ut deep learning.

References I

De Veaux, R. D., Velleman, P., and Bock, D. (2021). *Stats: Data and Models*. Pearson, Harlow, United Kingdom, fifth edition.

Walpole, R. E., Myers, R. H., Myers, S. L., and Ye, K. (2016). *Probability & Statistics for Engineers and Scientists*. Macmillan New York, 9 edition.