Regressions- och tidsserieanalys

Föreläsning 4 - Multipel regression

Mattias Villani

Statistiska institutionen
Stockholms universitet

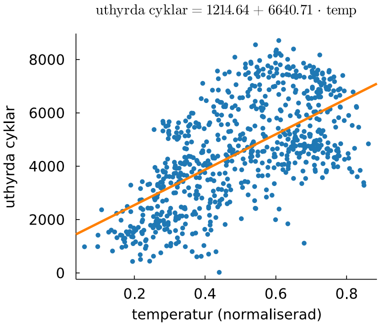
Institutionen för datavetenskap
Linköpings universitet

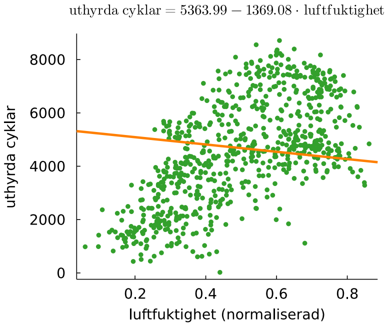
mattiasvillani.com @matvil mattiasvillani

Översikt

- **Multipel regression**
- **Hypotesttest (t cch F)**
- Intro till **regularisering**

Cykeluthyrning revisited





Fler förklarande variabler - multipel regression

- Skatta enkel regression för varje förklarande variabel. 👎
- Skatta multipel regression med alla förklarande variabler. 👍
- Regressionanpassning med två förklarande variabler

$$y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

- b_1 talar om hur y förändras när vi ändrar x_1 med en enhet (utan att ändra x_2).
- b_2 talar om hur y förändras när vi ändrar x_2 med en enhet (utan att ändra x_1).
- I multipel regression **kontrollerar** man **för** (tar hänsyn till) de **andra förklarande variablernas effekt** på y.

Minsta kvadrat-skattningar

- **Stickprov**: (y_i, x_{1i}, x_{2i}) för $i = 1, \ldots, n$.
- x_{1i} är t ex den i:te observationens värde på x_1-variabeln.
- Hitta a, b_1 och b_2 som **minimerar residualkvadratsumman**

$$Q = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - b_1 x_{1i} - b_2 x_{2i})^2$$

- Vi får nu tre ekvationer (från partialderivatorna) som ska lösa med avseende på a, b_1 och b_2. Se AJÅ.
- Med k förklarande variabler får vi $k+1$ ekvationer att lösa.

$$y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k$$

- Använd dator! (enkelt programmera själv med linjär algebra).

Enkel regression temp - R

```
> lmfit = lm(nRides ~ temp, data = bike); regsummary(lmfit)

Analysis of variance - ANOVA
-----------------------------------------------
       df         SS         MS      F     Pr(>F)
Regr    1 1078688585 1078688585 473.47 2.8106e-81
Error 729 1660846807    2278254
Total 730 2739535392

Measures of model fit
-----------------------------------------------
  Root MSE         R2     R2-adj
1509.38845    0.39375    0.39292

Parameter estimates
-----------------------------------------------
            Estimate Std. Error t value   Pr(>|t|)
(Intercept)   1214.6     161.16  7.5367 1.4327e-13
temp          6640.7     305.19 21.7594 2.8106e-81
```

- Skattad modell

$$\text{antal uthyrningar} = 1214.64 + 6640.71 \cdot \text{temperatur}$$

Multipel regression temp och hum - R

```
> lmfit = lm(nRides ~ temp + hum, data = bike); regsummary(lmfit)

Analysis of variance - ANOVA
-------------------------------------------------
        df         SS        MS      F     Pr(>F)
Regr     2 1169231889 584615944 271.03 1.0559e-88
Error  728 1570303503   2157010
Total  730 2739535392

Measures of model fit
-------------------------------------------------
  Root MSE         R2     R2-adj
1468.67638    0.42680    0.42522

Parameter estimates
-------------------------------------------------
            Estimate Std. Error t value   Pr(>|t|)
(Intercept)   2657.9     272.42  9.7565 3.2258e-21
temp          6887.0     299.38 23.0042 1.9558e-88
hum          -2492.9     384.76 -6.4789 1.7012e-10
```

- Skattad modell:

$$\text{antal uthyrningar} = 2657.9 + 6886.97 \cdot \text{temperatur} - 2492.85 \cdot \text{luftfuktighet}$$

Multipel regression temp, hum, wind - R

```
> lmfit = lm(nRides ~ temp + hum + windspeed, data = bike); regsummary(lmfit)

Analysis of variance - ANOVA
-----------------------------------------------
       df         SS        MS      F     Pr(>F)
Regr    3 1262638191 420879397 207.18 4.2551e-97
Error 727 1476897201   2031495
Total 730 2739535392

Measures of model fit
-----------------------------------------------
  Root MSE         R2     R2-adj
1425.30539    0.46090    0.45867

Parameter estimates
-----------------------------------------------
            Estimate Std. Error t value   Pr(>|t|)
(Intercept)   4084.4     337.86 12.0888 8.7098e-31
temp          6625.5     293.09 22.6062 4.1807e-86
hum          -3100.1     383.99 -8.0734 2.8330e-15
windspeed    -4806.9     708.90 -6.7808 2.4754e-11
```

- Skattad modell:

$$\text{antal uthyrningar} = 4084.4 + 6625.5 \cdot \text{temp} - 3100.1 \cdot \text{hum} - 4806.9 \cdot \text{wind}$$

Multipel regression

- **Multipel** regression med k förklarande variabler:

$$y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k$$

- **Residualvariansen** mäter graden av spridning kring linjen

$$s_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - (k+1)},$$

där de predikterade värden ges av regressionekvationen

$$\hat{y}_i = a + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \ldots + b_{ki} x_k.$$

- **Andel förklarad variation**

$$R^2 = \frac{\mathrm{SSR}}{\mathrm{SST}} = \frac{\sum(\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

- Alternativt sätt (kom ihåg att $\mathrm{SST} = \mathrm{SSR} + \mathrm{SSE}$)

$$R^2 = \frac{\mathrm{SSR}}{\mathrm{SST}} = \frac{\mathrm{SST} - \mathrm{SSE}}{\mathrm{SST}} = 1 - \frac{\mathrm{SSE}}{\mathrm{SST}} = 1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

Multipel regression som sannolikhetsmodell

- **Populationsmodell** för regression med två förklarande variabler:

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$$

- **Populationsmodell för multipel regression** med k förklarande variabler:

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_k x_k + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$$

- β_j talar om hur y förändras när vi ändrar x_j med en enhet (utan att ändra de andra x-variablerna).
- Samma **antaganden** som tidigare:
  - Feltermerna ε_i har **samma varians** σ_ε^2 (homoskedastiticitet)
  - Feltermerna är **normalfördelade**
  - Feltermerna är **oberoende**.

Konfidensintervall

- **Exakt 95% konfidensintervall för β_j**

$$b_j \pm t_{0.975}(n-k-1) \cdot s_{b_j}$$

där s_{b_j} är standardfelet för b_j (liknande b, men mer komplex).

- Cykeluthyrning med $k = 3$ förklarande variabler

$$t_{0.975}(n-k-1) = t_{0.975}(727) = 1.963$$

```
Parameter estimates
--------------------------------------------------
             Estimate Std. Error t value   Pr(>|t|)   2.5 %  97.5 %
(Intercept)   4084.4     337.86 12.0888 8.7098e-31  3421.1  4747.7
temp          6625.5     293.09 22.6062 4.1807e-86  6050.1  7200.9
hum          -3100.1     383.99 -8.0734 2.8330e-15 -3854.0 -2346.3
windspeed    -4806.9     708.90 -6.7808 2.4754e-11 -6198.7 -3415.2
```

```
> lmfit = lm(nRides ~ temp + hum + windspeed, data = bike);
> regsummary(lmfit, conf_intervals = T)
```

- *p*-**värdet** beräknas på samma sätt som i enkel regression, men från $t_{0.975}(n-k-1)$ fördelningen.

Signifikanstest för en regressionkoefficient t-test

- **Nollhypotes** som testar om x_j är en signifikant variabel

$$H_0 : \beta_j = 0$$
$$H_1 : \beta_j \neq 0$$

- **Teststatistiska**

$$t = \left| \frac{b_j - 0}{s_{b_j}} \right|$$

- Vi förkastar nollhypotesten på signifikansnivån $\alpha = 0.05$ om

$$t_{\text{obs}} > t_{\text{crit}} = t_{0.975}(n - k - 1) \text{ (från tabell).}$$

- Cykeluthyrning. Testa om windspeed är en signifikant variabel:

$$t_{\text{obs}} = |(-4806.92 - 0)/708.90| = 6.780$$

  och $t_{\text{crit}} = t_{0.975}(727) = 1.963$. Eftersom $t_{\text{obs}} > t_{\text{crit}}$ så förkastar vi H_0 på 5% signifikansnivå.

ANOVA - medelversionen

- **Mean Squared Error (MSE)**

$$\text{MSE} = \frac{\text{SSE}}{n-(k+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n-(k+1)} = s_e^2$$

- **Mean Square Regression (MSR)**

$$\text{MSR} = \frac{\text{SSR}}{k}$$

- **Mean Square Total (MST)**

$$\text{MST} = \frac{\text{SST}}{n-1}$$

- Notera att **frihetsgraderna summerar också**

$$\begin{array}{ccccc} \text{df(SST)} & = & \text{df(SSE)} & = & \text{df(SSR)} \\ n-1 & = & n-(k+1) & + & k \end{array}$$

Signifikanstest för flera regressionkoefficienter

- **F-test statistiska**

$$F = \frac{\mathrm{MSR}}{\mathrm{MSE}}$$

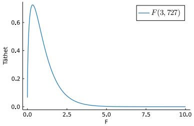
- **Nollhypotesen** om **ingen regression**

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \ldots = \beta_k = 0$$
$$H_1 : \text{åtminstone något } \beta_j \neq 0$$

- Under H_0 följer F en **F-fördelning med k och $n-(k+1)$ frihetsgrader**.

$$F \sim F(k, n-k-1)$$

- Cykeluthyrningsdata: $F_{\mathrm{obs}} = 207.18$. $F_{0.95}(3, 727) = 2.617$. Vi tokförkastar nollhypotesen om ingen regression!



Val av förklarande variabler

- Ju fler förklarande variabler desto mer förklarar regressionen.
- R^2 **kan inte minska** när man lägger till fler förklarande variabler. Se upp för överanpassning!
- R^2_{adjusted} ("justerad R-2"), se AJÅ, kan minska om en förklarande variabel bara reducerar variationen marginellt.
- Andra vanliga informationskriterier: **AIC**, **BIC**.
- **Full sökning**: Gå igenom alla möjliga kombinationer av förklarande variabler och välj modell med högst R^2_{adjusted}. Beräkningstungt.

Stepwise selection and beyond

- **Forward selection**:
  1. Börja med bara interceptet.
  2. Lägg till x-variabeln med högst t_{obs}, om $t_{\text{obs}} > 2$, annars stanna.
  3. Lägg till x-variabeln med högst t_{obs}, givet att valda variabeln i Steg 2 ingår i modellen, om $t_{\text{obs}} > 2$, annars stanna.
  4. Fortsätt tills ingen ny förklarande variabel har $t_{\text{obs}} > 2$ i modellen där alla tidigare variabler ingår.
- **Backward selection**. Starta med alla variabler i modellen. Ta bort den variabel som har lägst t_{obs}. Skatta modellen utan denna variabel. Fortsätt tills alla variabler som är kvar har $t_{\text{obs}} > 2$.
- Det finns massor av andra (bättre) variabelselektionsstrategier. **Bayesian variable selection**. *Bayesian Learning 7.5 hp*.

L2-regularisering (Ridge regression)

- **För många förklarande variabler** $\Rightarrow$ MK-metoden överanpassar data. Modellen är **överparametriserad**.
- Variabelselektion försöker minska antalet skattade parametrar.
- **L2-regularisering** (**ridge regression**) behåller alla variabler i modellen men minimerar en **straffad residualkvadratsumma**:

$$Q_{-} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a - b_1 x_{1i} - \ldots - b_k x_{ki})^2 + \lambda \cdot \sum_{j=1}^{k} b_j^2$$

- Straff/kostnad för att introducera en variabel i modellen

$$\lambda \cdot \sum_{j=1}^{k} b_j^2$$

- Hur hårt vi straffar bestäms av **regulariseringsparametern λ**.
- Stort λ kommer krympa estimaten av b_j mot noll. Biased, men lägre varians. **Bias-Variance trade-off**.
- Vi kan bestämma λ själva, eller skatta via korsvalidering.

L1-regularisering (Lasso regression)

- **L1-regularisering** (**Lasso**) straffar med **absolutbelopp**:

$$Q_{-} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - b_1 x_{1i} - \ldots - b_k x_{ki})^2 + \lambda \cdot \sum_{j=1}^{k} |b_j|$$

- Lasso har två effekter:
  - krymper b_j mot noll (shrinkage)
  - kan sätta vissa b_j exakt till noll (selection)
- `glmnet` paketet i R gör både L1 och L2 regularisering och mer.
- Lasso är extremt populär. Go-to när man har väldigt många förklarande variabler.