Regressions- och tidsserieanalys

Föreläsning 7 - Icke-linjär regression. Polynom- och exponentiella samband

Mattias Villani

Statistiska institutionen
Stockholms universitet

Institutionen för datavetenskap
Linköpings universitet

 mattiasvillani.com  @matvil  mattiasvillani

Översikt

- Utvärdera och **välja modeller baserat på prognosförmåga**
- **Polynomregression**
- **Exponentiella modeller**

Prognosförmåga på testdata

- Dela upp observationer i två delmängder:
  - **Träningsdata** för att skatta modellens parametrar.
  - **Testdata** för att utvärdera modellens prediktioner.
- Modellen får aldrig chans att anpassa sig till testdata.
- Prediktionsmått: **kvadrerade prediktionsfel på testdata**

$$\text{SSE}_{\text{test}} = \sum_{j=1}^{n_{\text{test}}} (y_j - \hat{y}_j)^2$$

- Observera:
  - summan är över observationerna i testdata.
  - modellen som ger $\hat{y}_j$ är **skattad enbart på träningsdata**.
  - **överanpassning** på träningsdata $\Rightarrow$ dåliga prediktioner på testdata.

Korsvalidering

- Vilka observationer ska vara i träning respektive test?
  - Tidsserier: låt de senare observationerna vara i test.
  - Regression: **Korsvalidering**. Dela upp data i K st **folds**:

Split 1

country	spending (x)	lifespan (y)
Australia	3.357	81.4
Austria	3.763	80.1
Belgium	3.595	79.8
Canada	3.895	80.7
Czech	1.626	77
Denmark	3.512	78.4
Finland	2.84	79.5
France	3.601	81
Germany	3.588	80
Greece	2.727	79.5
Hungary	1.388	73.3
Iceland	3.319	81.2
Ireland	3.424	79.7
Italy	2.686	81.4
Japan	2.581	82.6
Korea	1.688	79.4
Luxembourg	4.162	79.4
Mexico	0.823	75
Netherlands	3.837	80.2
N.Zealand	2.454	80.2
Norway	4.763	80.6
Poland	1.035	75.4
Portugal	2.15	79.1
Slovakia	1.555	74.3
Spain	2.671	81
Sweden	3.323	81
Switzerland	4.417	81.9
Turkey	0.618	73.4
UK	2.992	79.5
USA	7.29	78.1

Split 2

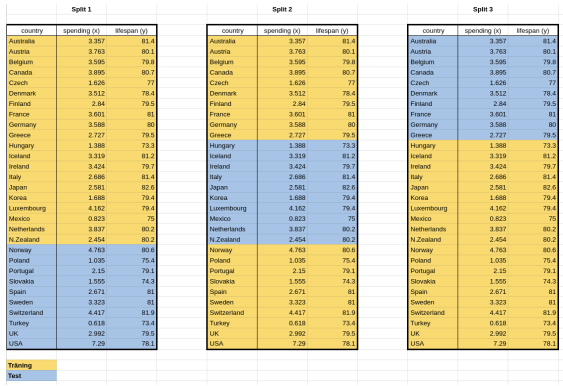
country	spending (x)	lifespan (y)
Australia	3.357	81.4
Austria	3.763	80.1
Belgium	3.595	79.8
Canada	3.895	80.7
Czech	1.626	77
Denmark	3.512	78.4
Finland	2.84	79.5
France	3.601	81
Germany	3.588	80
Greece	2.727	79.5
Hungary	1.388	73.3
Iceland	3.319	81.2
Ireland	3.424	79.7
Italy	2.686	81.4
Japan	2.581	82.6
Korea	1.688	79.4
Luxembourg	4.162	79.4
Mexico	0.823	75
Netherlands	3.837	80.2
N.Zealand	2.454	80.2
Norway	4.763	80.6
Poland	1.035	75.4
Portugal	2.15	79.1
Slovakia	1.555	74.3
Spain	2.671	81
Sweden	3.323	81
Switzerland	4.417	81.9
Turkey	0.618	73.4
UK	2.992	79.5
USA	7.29	78.1

Split 3

country	spending (x)	lifespan (y)
Australia	3.357	81.4
Austria	3.763	80.1
Belgium	3.595	79.8
Canada	3.895	80.7
Czech	1.626	77
Denmark	3.512	78.4
Finland	2.84	79.5
France	3.601	81
Germany	3.588	80
Greece	2.727	79.5
Hungary	1.388	73.3
Iceland	3.319	81.2
Ireland	3.424	79.7
Italy	2.686	81.4
Japan	2.581	82.6
Korea	1.688	79.4
Luxembourg	4.162	79.4
Mexico	0.823	75
Netherlands	3.837	80.2
N.Zealand	2.454	80.2
Norway	4.763	80.6
Poland	1.035	75.4
Portugal	2.15	79.1
Slovakia	1.555	74.3
Spain	2.671	81
Sweden	3.323	81
Switzerland	4.417	81.9
Turkey	0.618	73.4
UK	2.992	79.5
USA	7.29	78.1

Träning
Test

Korsvalidering



Split 1

country	spending (x)	lifespan (y)
Australia	3.357	81.4
Austria	3.763	80.1
Belgium	3.595	79.8
Canada	3.895	80.7
Czech	1.626	77
Denmark	3.512	78.4
Finland	2.84	79.5
France	3.601	81
Germany	3.588	80
Greece	2.727	79.5
Hungary	1.388	73.3
Iceland	3.319	81.2
Ireland	3.424	79.7
Italy	2.686	81.4
Japan	2.581	82.6
Korea	1.688	79.4
Luxembourg	4.162	79.4
Mexico	0.823	75
Netherlands	3.837	80.2
N.Zealand	2.454	80.2
Norway	4.763	80.6
Poland	1.035	75.4
Portugal	2.15	79.1
Slovakia	1.555	74.3
Spain	2.671	81
Sweden	3.323	81
Switzerland	4.417	81.9
Turkey	0.618	73.4
UK	2.992	79.5
USA	7.29	78.1

Split 2

country	spending (x)	lifespan (y)
Australia	3.357	81.4
Austria	3.763	80.1
Belgium	3.595	79.8
Canada	3.895	80.7
Czech	1.626	77
Denmark	3.512	78.4
Finland	2.84	79.5
France	3.601	81
Germany	3.588	80
Greece	2.727	79.5
Hungary	1.388	73.3
Iceland	3.319	81.2
Ireland	3.424	79.7
Italy	2.686	81.4
Japan	2.581	82.6
Korea	1.688	79.4
Luxembourg	4.162	79.4
Mexico	0.823	75
Netherlands	3.837	80.2
N.Zealand	2.454	80.2
Norway	4.763	80.6
Poland	1.035	75.4
Portugal	2.15	79.1
Slovakia	1.555	74.3
Spain	2.671	81
Sweden	3.323	81
Switzerland	4.417	81.9
Turkey	0.618	73.4
UK	2.992	79.5
USA	7.29	78.1

Split 3

country	spending (x)	lifespan (y)
Australia	3.357	81.4
Austria	3.763	80.1
Belgium	3.595	79.8
Canada	3.895	80.7
Czech	1.626	77
Denmark	3.512	78.4
Finland	2.84	79.5
France	3.601	81
Germany	3.588	80
Greece	2.727	79.5
Hungary	1.388	73.3
Iceland	3.319	81.2
Ireland	3.424	79.7
Italy	2.686	81.4
Japan	2.581	82.6
Korea	1.688	79.4
Luxembourg	4.162	79.4
Mexico	0.823	75
Netherlands	3.837	80.2
N.Zealand	2.454	80.2
Norway	4.763	80.6
Poland	1.035	75.4
Portugal	2.15	79.1
Slovakia	1.555	74.3
Spain	2.671	81
Sweden	3.323	81
Switzerland	4.417	81.9
Turkey	0.618	73.4
UK	2.992	79.5
USA	7.29	78.1

Träning

Test

- **Mått på prognosförmåga**:

$$\mathrm{SSE}_{\mathrm{CV}} = \sum_{k=1}^{K} \mathrm{SSE}_{\mathrm{test}}^{(k)}$$

där $\mathrm{SSE}_{\mathrm{test}}^{(k)}$ är SSE för testdata i fold k.

- Lättare att tolka **Root MSE** (utan korrektion för frihetsgrader)

$$\mathrm{RMSE}_{CV} = \sqrt{\frac{\mathrm{SSE}_{Cv}}{n}}$$

- Prognosförmåga på testdata kan användas för **modellval**.
- För mer info: masterkursen *Maskininlärning 7.5 hp*.

Kvadratisk regression

- **Kvadratisk regression**

$$y = a + b_1 x + b_2 x^2$$

- ... är **multipel regression med två förklarande variabler**:
  - $x_1 = x$
  - $x_2 = x^2$
- **Populationsmodell**:

$$y = \alpha + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \varepsilon$$

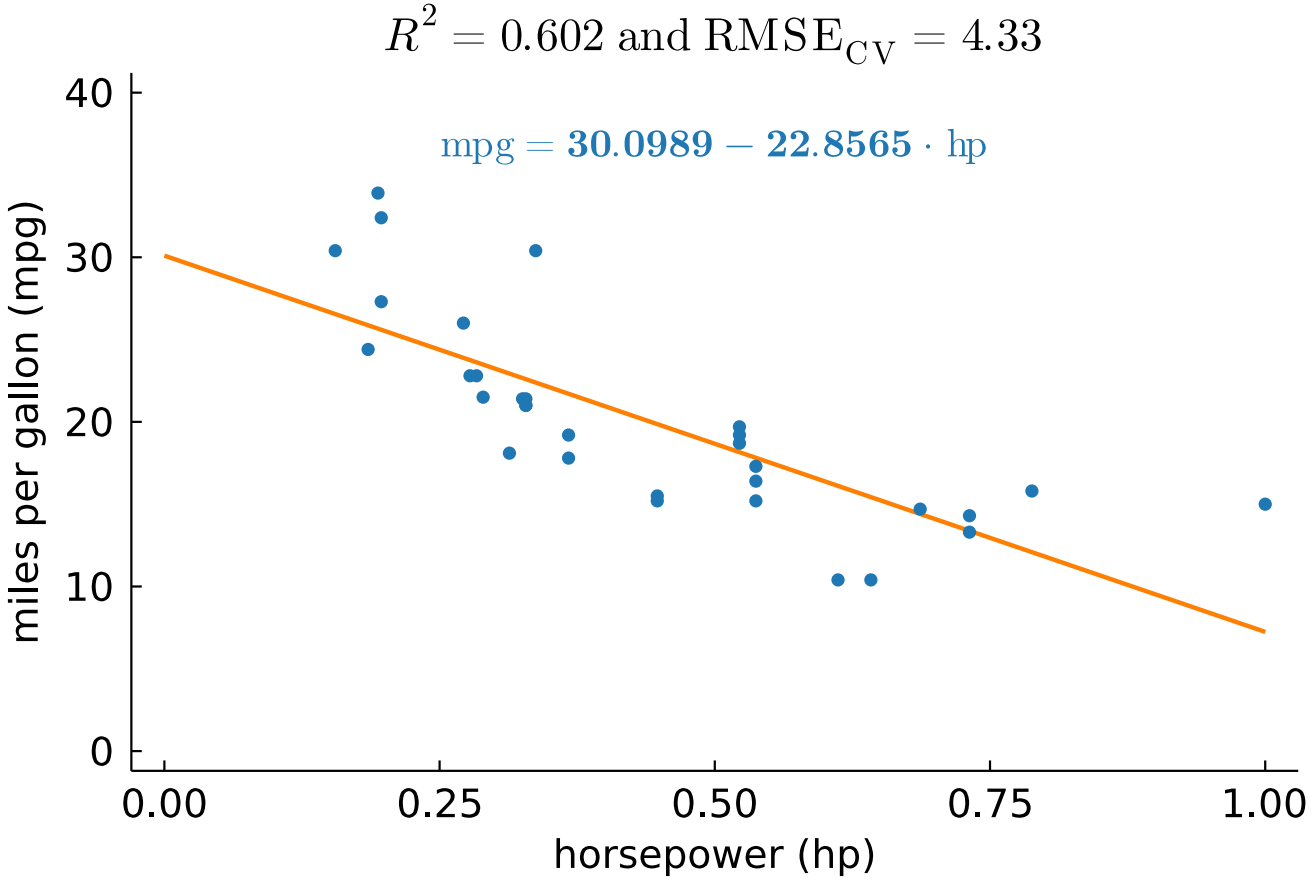
- **Minsta-kvadratmetoden** för att beräkna a, b_1 och b_2!
- Kvadratisk regression **icke-linjär i** x, men linjär i α, β_1 och β_2.

Kvadratisk regression - excel

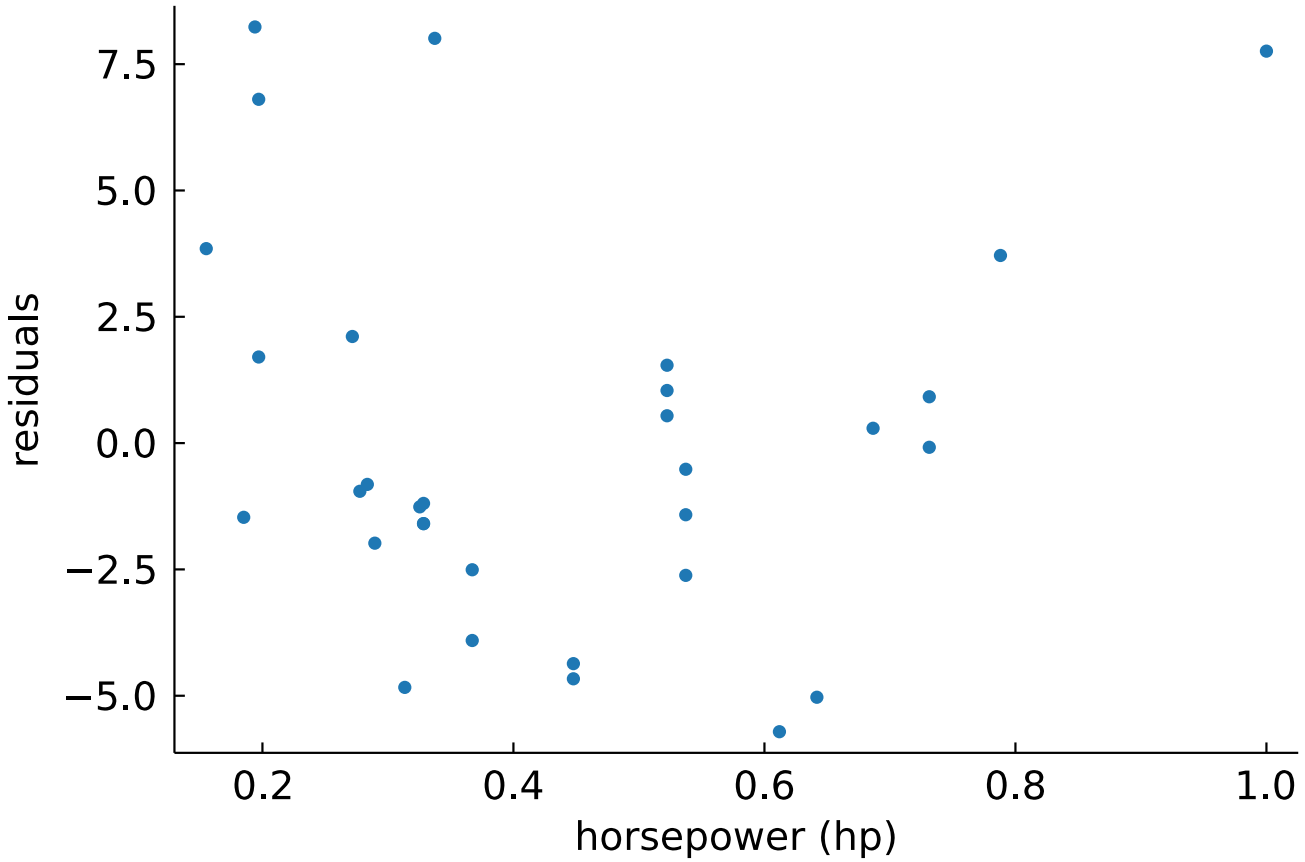
	A	B	C	D
1		mpg (y)	hp (x)	x^2
2	Mazda RX4	21.000	0.328	0.108
3	Mazda RX4 Wag	21.000	0.328	0.108
4	Datsun 710	22.800	0.278	0.077
5	Hornet 4 Drive	21.400	0.328	0.108
6	Hornet Sportabo	18.700	0.522	0.273
7	Valiant	18.100	0.313	0.098
8	Duster 360	14.300	0.731	0.535
9	Merc 240D	24.400	0.185	0.034
10	Merc 230	22.800	0.284	0.080
11	Merc 280	19.200	0.367	0.135
12	Merc 280C	17.800	0.367	0.135
13	Merc 450SE	16.400	0.537	0.289
14	Merc 450SL	17.300	0.537	0.289
15	Merc 450SLC	15.200	0.537	0.289
16	Cadillac Fleetwo	10.400	0.612	0.374
17	Lincoln Continer	10.400	0.642	0.412
18	Chrysler Imperia	14.700	0.687	0.471
19	Fiat 128	32.400	0.197	0.039
20	Honda Civic	30.400	0.155	0.024
21	Toyota Corolla	33.900	0.194	0.038
22	Toyota Corona	21.500	0.290	0.084
23	Dodge Challeng	15.500	0.448	0.200
24	AMC Javelin	15.200	0.448	0.200
25	Camaro Z28	13.300	0.731	0.535
26	Pontiac Firebird	19.200	0.522	0.273
27	Fiat X1-9	27.300	0.197	0.039
28	Porsche 914-2	26.000	0.272	0.074
29	Lotus Europa	30.400	0.337	0.114
30	Ford Pantera L	15.800	0.788	0.621
31	Ferrari Dino	19.700	0.522	0.273
32	Maserati Bora	15.000	1.000	1.000
33	Volvo 142E	21.400	0.325	0.106

- Notera att `hp` är normaliserad genom att dividera med max(`hp`) i stickprovet.
  Blir **numeriskt stabilare om man normaliserar** så.

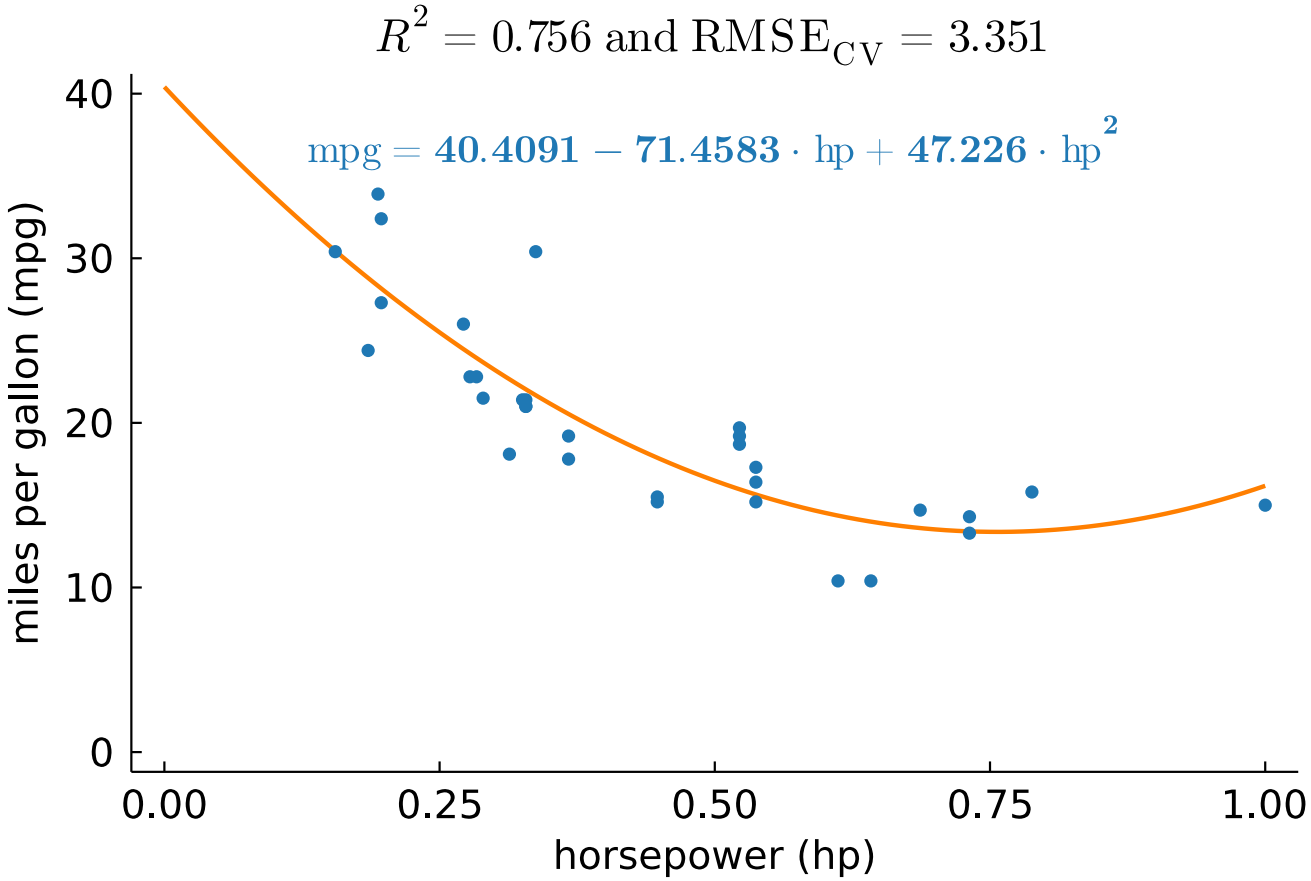
mtcars data - linjär regression mot hp



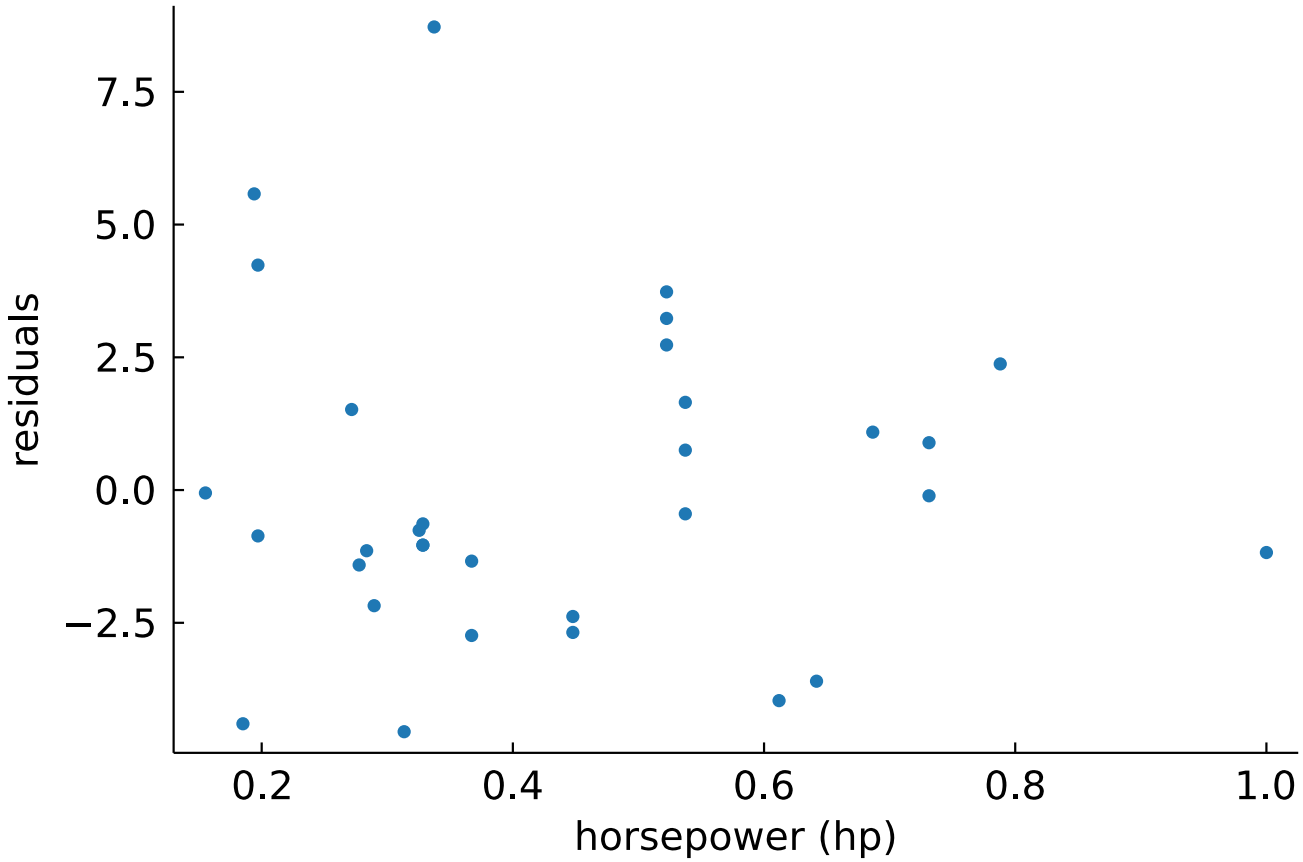
mtcars data - residualer linjär regression



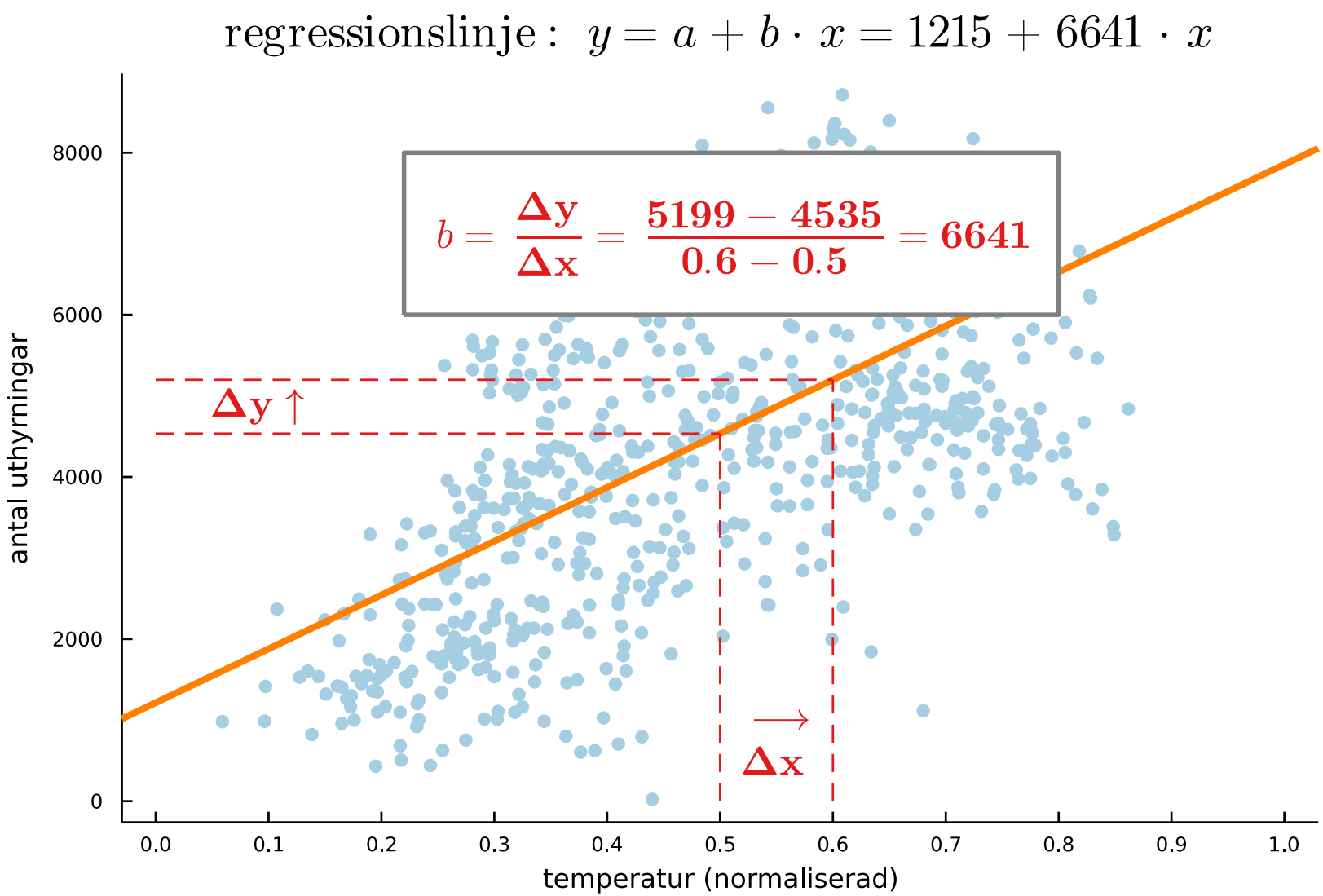
mtcars data - kvadratisk regression mot hp



mtcars data - residualer kvadratisk regression



Linjär regression - tolkning b



Tolkningar av parametrar i kvadratisk regression

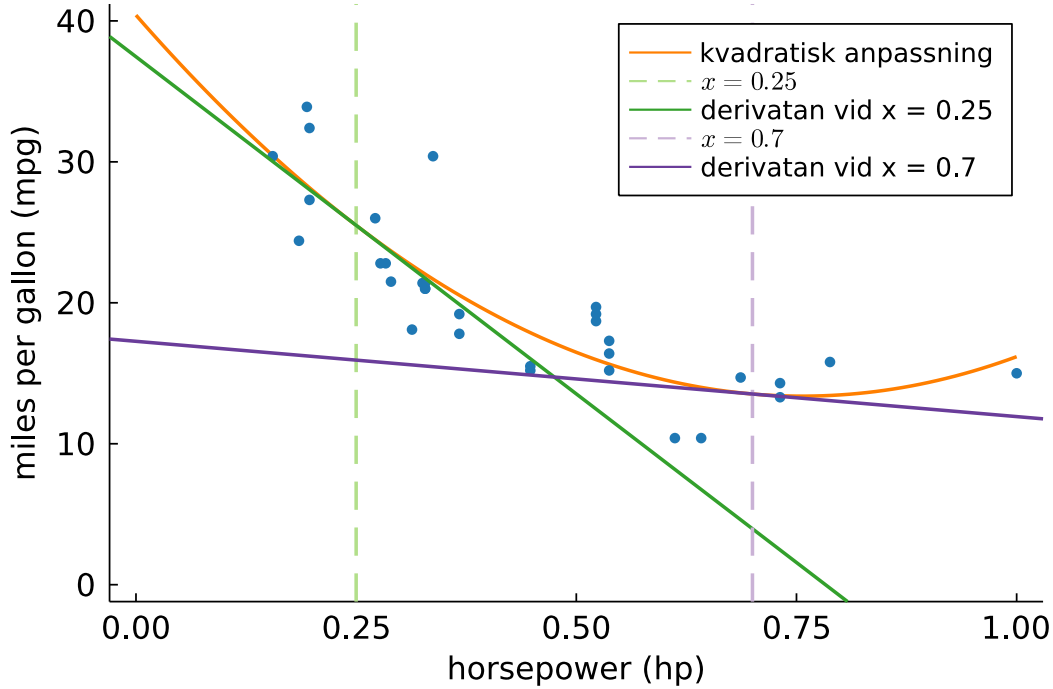
- **Kvadratisk regression**

$$y = a + b_1 x + b_2 x^2$$

- **Regressionskoefficienterna** tolkas som **derivator**:

$$\frac{dy}{dx} = b_1 + 2b_2 \cdot x$$

- Effekten av en liten förändring Δx i x beror på x själv:



Polynomregression

- **Polynomregression**

$$y = a + b_1 x + b_2 x^2 + \ldots + b_k x^k$$

- Polynomregression av ordning k är detsamma som multipel regression med k förklarande variabler:
  - $x_1 = x$
  - $x_2 = x^2$
  - $\vdots$
  - $x_k = x^k$
- **Populationsmodell**:

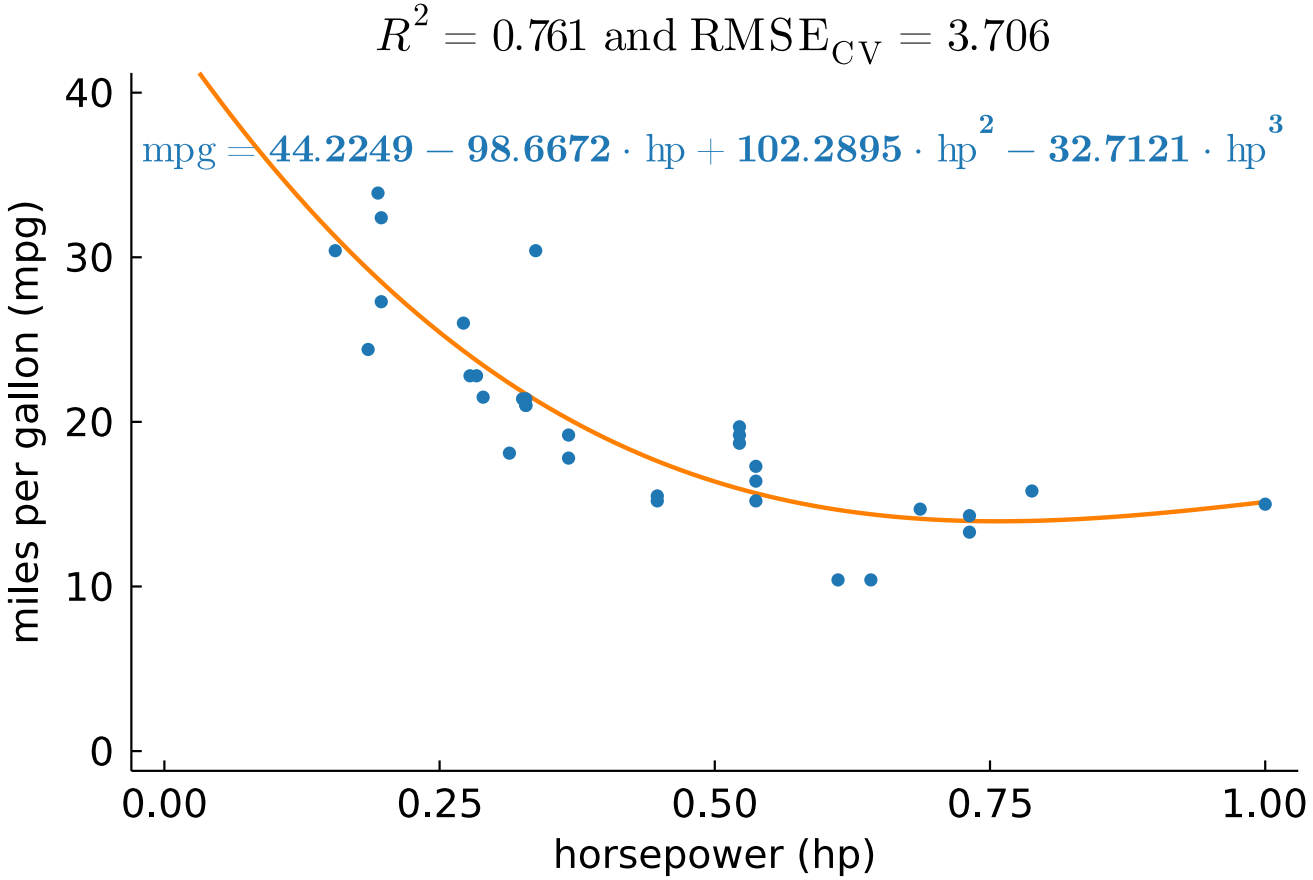
$$y = \alpha + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \ldots + \beta_k x^k + \varepsilon$$

- **Minsta-kvadratmetoden** kan användas för att beräkna $a, b_1, \ldots b_k$!
- Polynomregression är **icke-linjär i** x, men linjär i α, $\beta_1, \ldots \beta_k$.

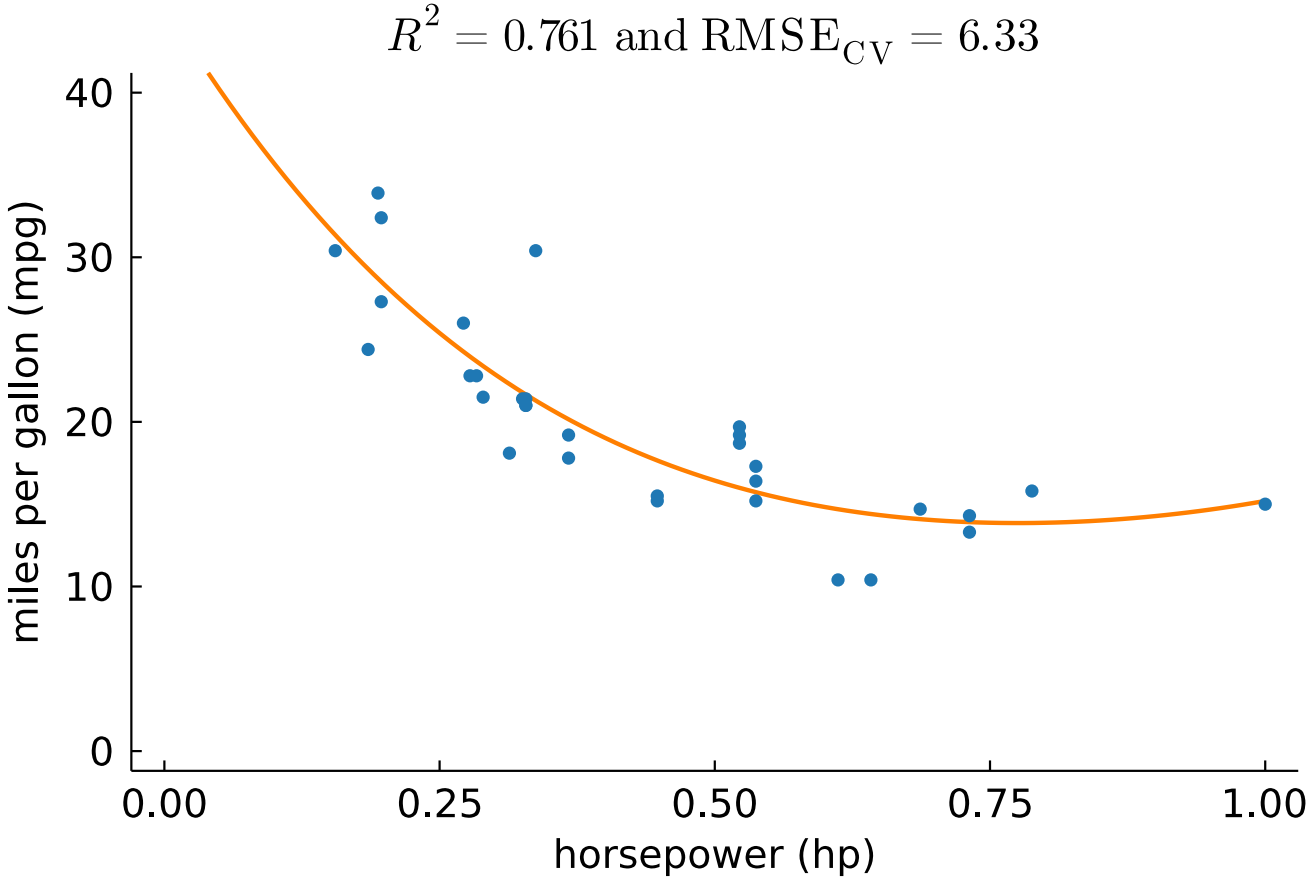
Polynomregression - excel

	A	B	C	D	E	F
1		mpg (y)	hp (x)	x^2	x^3	x^4
2	Mazda RX4	21.000	0.328	0.108	0.035	0.012
3	Mazda RX4 Wag	21.000	0.328	0.108	0.035	0.012
4	Datsun 710	22.800	0.278	0.077	0.021	0.006
5	Hornet 4 Drive	21.400	0.328	0.108	0.035	0.012
6	Hornet Sportabo	18.700	0.522	0.273	0.143	0.074
7	Valiant	18.100	0.313	0.098	0.031	0.010
8	Duster 360	14.300	0.731	0.535	0.391	0.286
9	Merc 240D	24.400	0.185	0.034	0.006	0.001
10	Merc 230	22.800	0.284	0.080	0.023	0.006
11	Merc 280	19.200	0.367	0.135	0.049	0.018
12	Merc 280C	17.800	0.367	0.135	0.049	0.018
13	Merc 450SE	16.400	0.537	0.289	0.155	0.083
14	Merc 450SL	17.300	0.537	0.289	0.155	0.083
15	Merc 450SLC	15.200	0.537	0.289	0.155	0.083
16	Cadillac Fleetwo	10.400	0.612	0.374	0.229	0.140
17	Lincoln Continer	10.400	0.642	0.412	0.264	0.170
18	Chrysler Imperia	14.700	0.687	0.471	0.324	0.222
19	Fiat 128	32.400	0.197	0.039	0.008	0.002

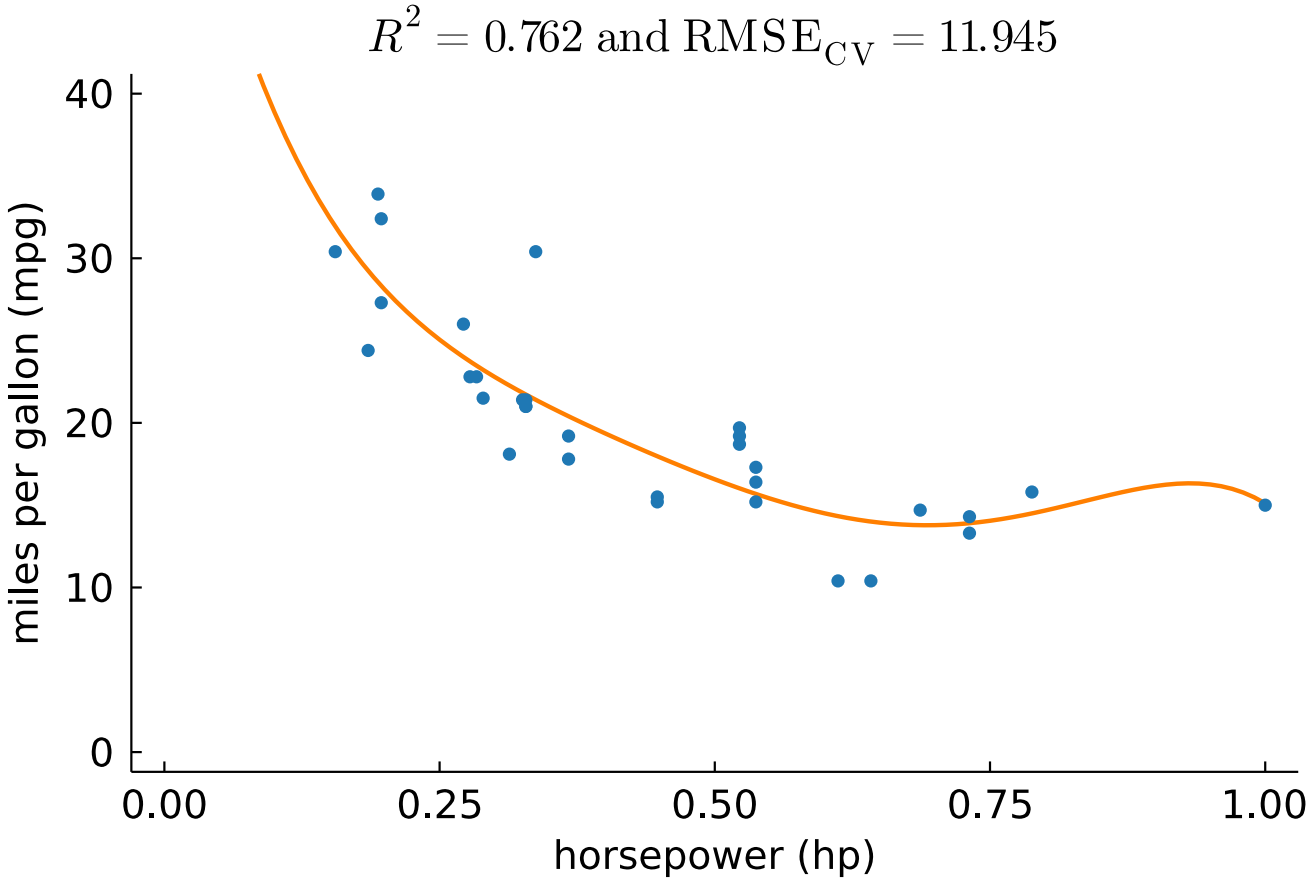
mtcars data - kubisk regression mot hp



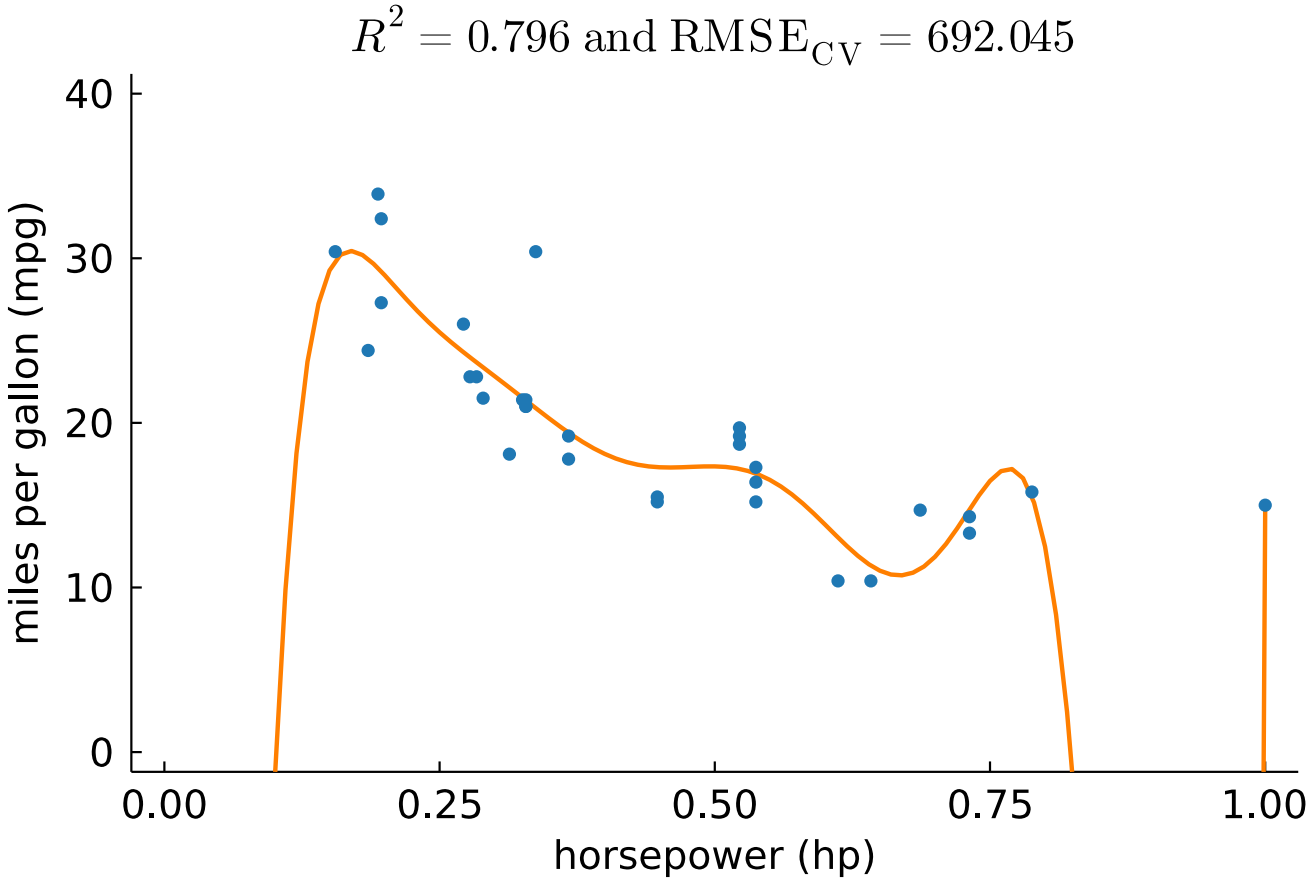
mtcars data - polynomregression ordning 4



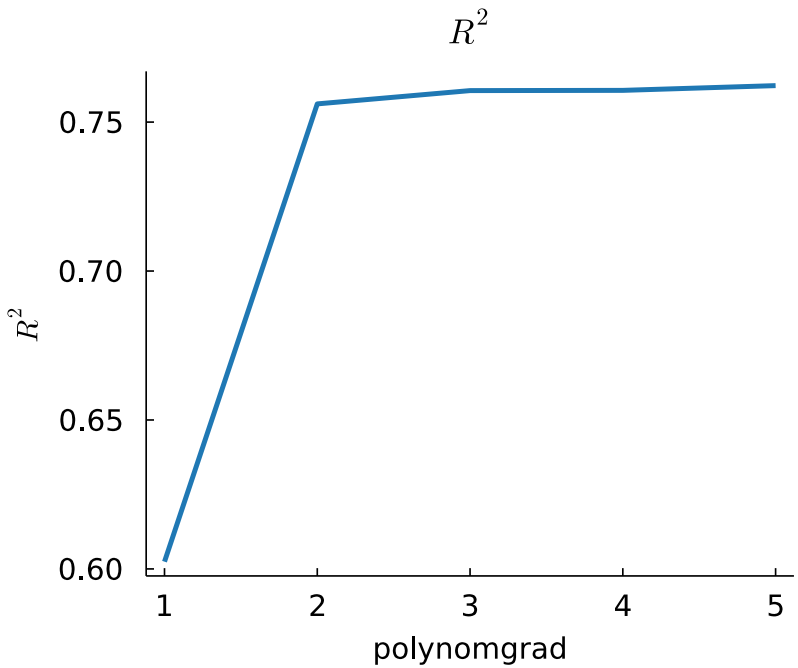
mtcars data - polynomregression ordning 5

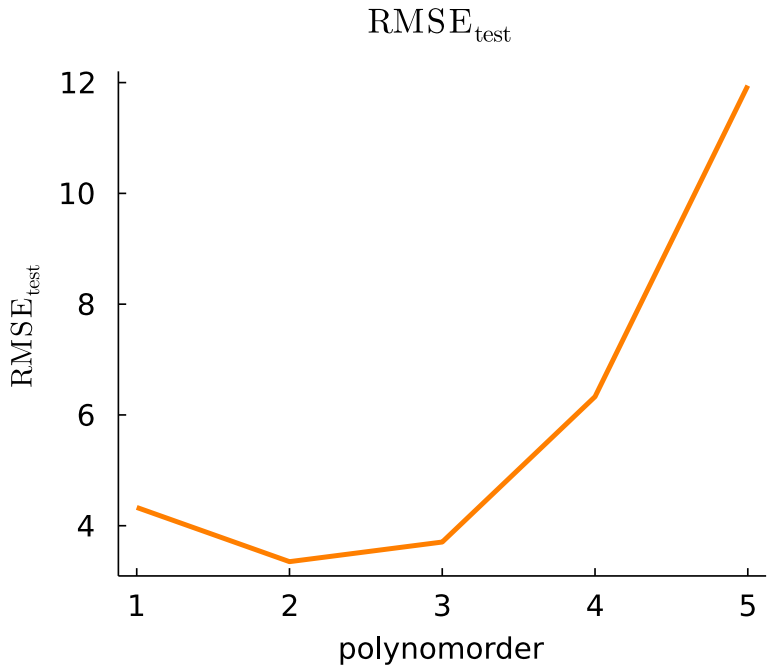


mtcars data - polynomregression ordning 10



mtcars data - R^2 och RMSE-CV($K = 4$)

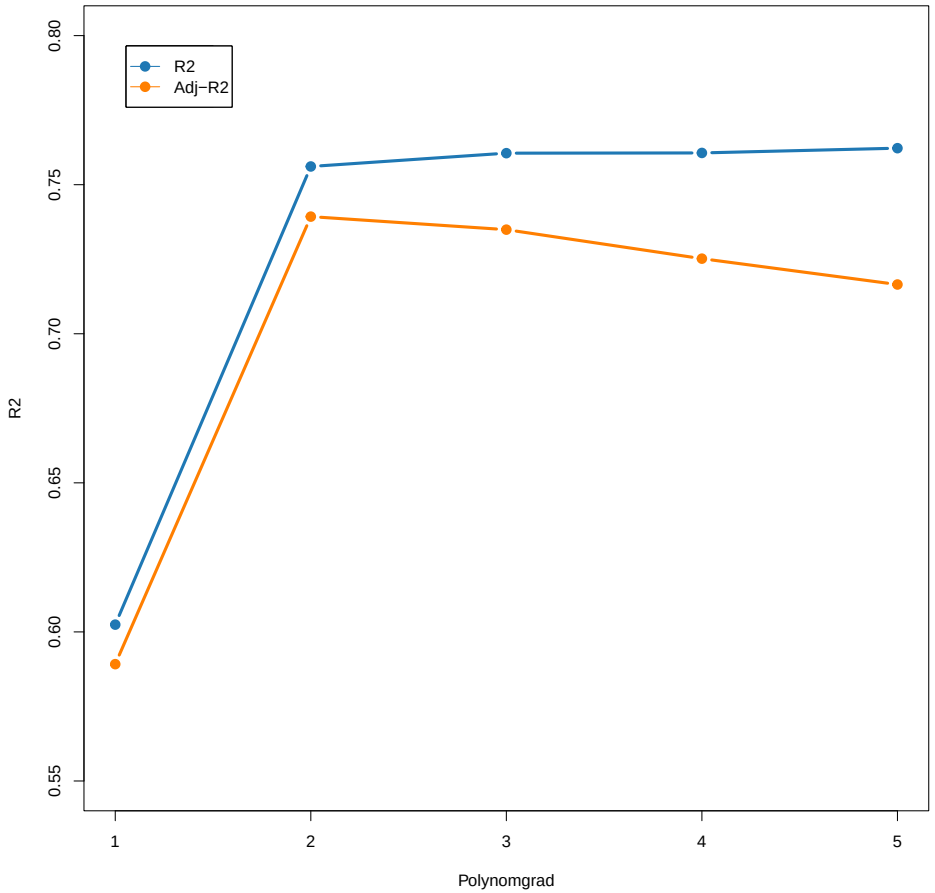




mtcars data - R^2 och R^2_{adjusted}

- Justerad R^2

$$R^2_{\text{adjusted}} = 1 - \frac{s_e^2}{s_y^2} = 1 - \frac{\text{MSE}}{\text{MST}}$$



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.

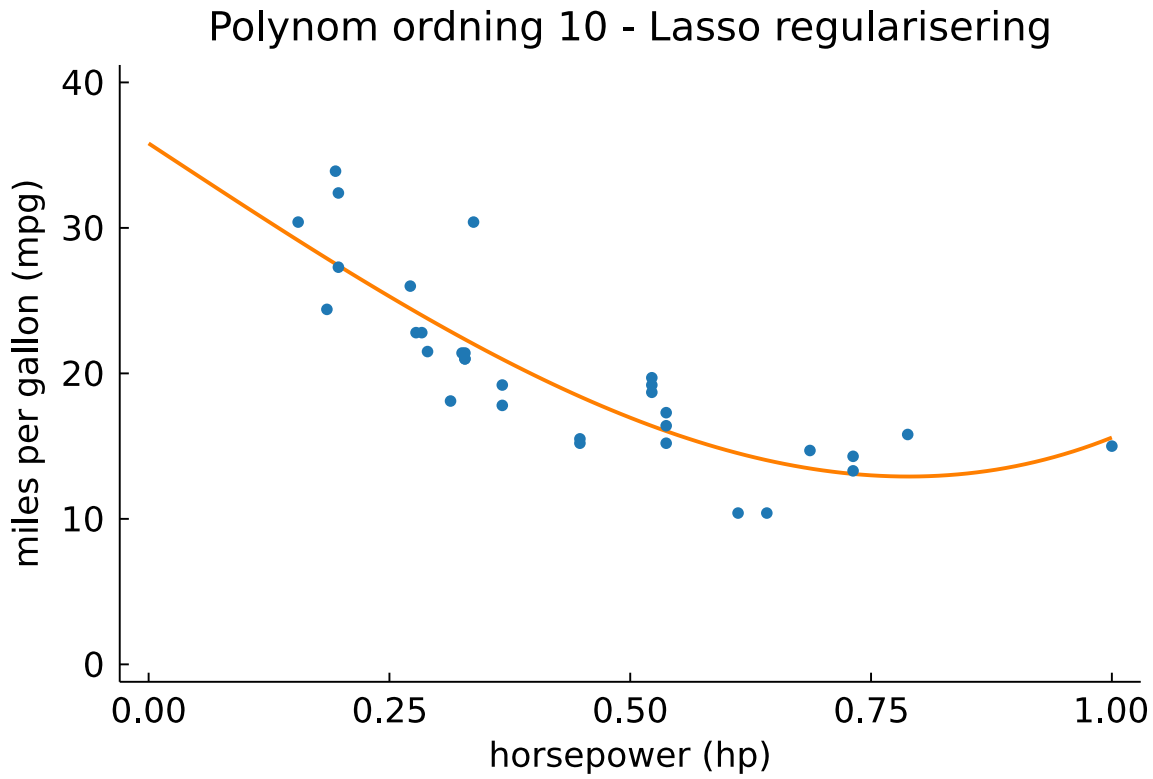
L1-regularisering (Lasso regression)

- **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.

Lasso regularisering polynom ordning 10



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

- $a = 35.80,\ b_1 = -43.58,\ b_3 = 23.32.$
- $b_2 = 0$ och $b_4 = \ldots = b_{10} = 0$ (**variabelselektion**).

Exponentiella samband

- Du sätter in 200 kr på banken till 5% årsränta. Utveckling:

$$1 \text{ år: } 200 \cdot 1.05 = 210.000 \text{ kr}$$

$$2 \text{ år: } 200 \cdot 1.05^2 = 220.500 \text{ kr}$$

$$3 \text{ år: } 200 \cdot 1.05^3 = 231.525 \text{ kr}$$

- Efter x år: $200 \cdot 1.05^x$. **Exponentiell tillväxt**. Samma procentuella ökning varje år.
- **Exponentiellt samband**

$$y = a \cdot b^x$$

- a är det **initiala** beloppet eller storheten.
- b bestämmer **tillväxttakten**

$b > 1$ ökande

$b < 1$ minskade

$b = 1$ konstant (nolltillväxt)

Exponentiell regression

- **Exponentiell regression**:

$$y = a \cdot b^x$$

- **Logaritmregler** (10-logaritmer $\log = \log_{10}$)

$\log(a \cdot b) = \log a + \log b$ ("log av produkten är summan av log")

$\log b^x = x \log b$ ("exponenten hoppar ner framför")

- Logaritmera båda sidor

$$\underbrace{\log y}_{\tilde{y}} = \underbrace{\log a}_{\tilde{a}} + \underbrace{\log b}_{\tilde{b}} \cdot x$$

$$\tilde{y} = \tilde{a} + \tilde{b}x$$

$$\tilde{a} = \log a$$

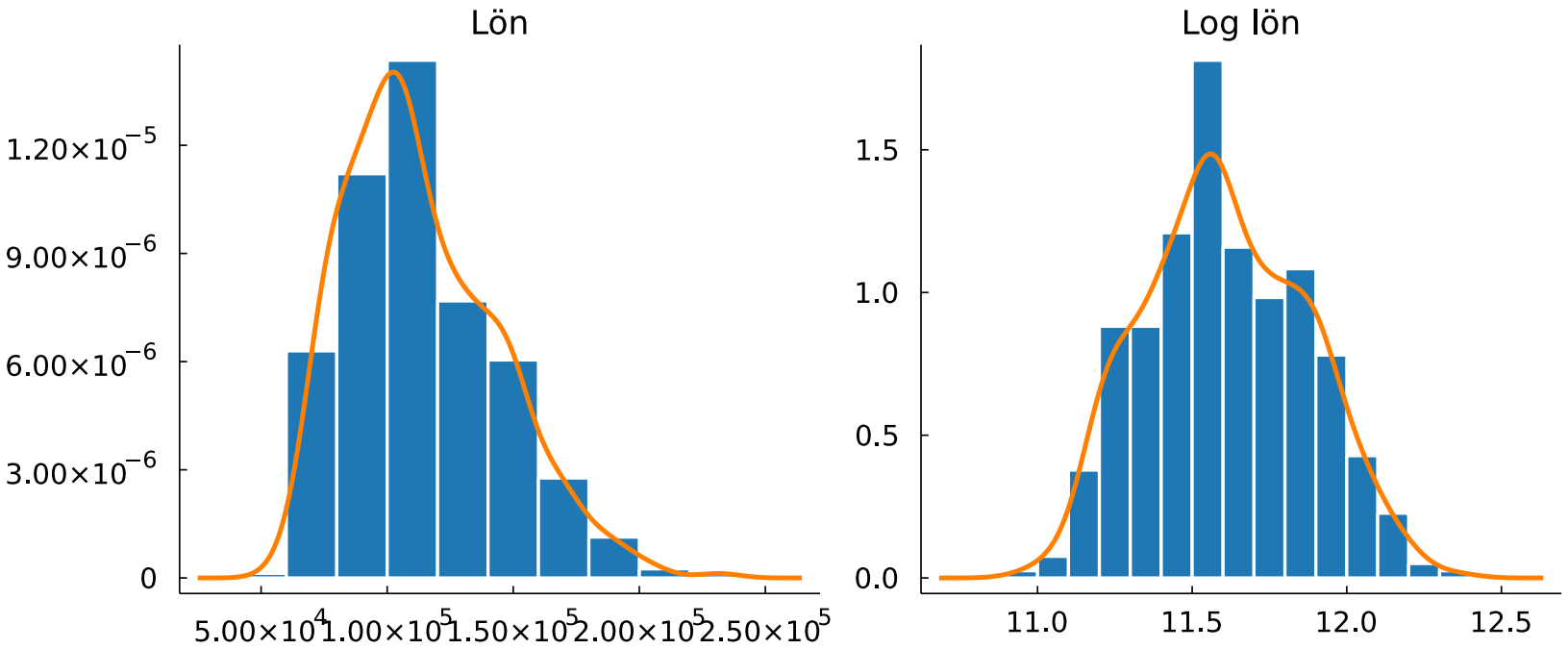
$$\tilde{b} = \log b$$

- Skatta $\tilde{a}$ och $\tilde{b}$ med **minsta-kvadrat** med $\tilde{y} = \log y$!
- Skattningar för a och b fås genom **anti-logaritmering**

$$a = 10^{\tilde{a}} \qquad \text{och} \qquad b = 10^{\tilde{b}}$$

Exponentiell regression

- **Responsvariabler** med **enbart positiva värden** (t ex lön):
  - **Normalfördelning** ofta **opassande** pga **skevhet**.
  - **kan ge prediktioner för y som är negativa**.



Exponentiell regression

- **Populationsmodell**:

$$y = \alpha \cdot \beta^x \varepsilon$$

- **Logaritmen av feltermen** ε är **normalfördelad.**
- Vi säger att feltermen ε är **lognormal** fördelad. Innebär $\varepsilon > 0$.
- **Logaritmera** för att göra modellen **linjär**!

$$\underbrace{\log y}_{\tilde{y}} = \underbrace{\log \alpha}_{\tilde{\alpha}} + \underbrace{\log \beta}_{\tilde{\beta}} \cdot x + \underbrace{\log \varepsilon}_{\tilde{\varepsilon}}$$

$$\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta} \cdot x + \tilde{\varepsilon}, \qquad \tilde{\varepsilon} \sim N\left(0, \sigma_{\tilde{\varepsilon}}^2\right).$$

- t-test för $H_0 : \tilde{\beta} = 0$ är **test för konstant tillväxt** $\beta = 1$.
- **Prediktion** för $x = x_0$:

$$\hat{y} = a \cdot b^{x_0} = 10^{\tilde{a}} \cdot (10^{\tilde{b}})^{x_0} = 10^{\tilde{a} + \tilde{b} x_0}$$

- Dvs, gör prediktion $\widehat{\log y}$ och "anti-logga" för prognosen för $\hat{y}$.

Kinesisk tillväxt

	A	B	C	D	E
1	year	gdp	gdpgrowth	log10(gdp)	t = year - 1999
2	2000	959.3725	9.86	2.981987265	1
3	2001	1053.1082	9.77	3.022472994	2
4	2002	1148.5083	9.06	3.060134138	3
5	2003	1288.6433	12.2	3.11013272	4
6	2004	1508.6681	17.07	3.178593708	5
7	2005	1753.4178	16.22	3.243885411	6
8	2006	2099.2294	19.72	3.3220599	7
9	2007	2693.9701	28.33	3.430392771	8
10	2008	3468.3046	28.74	3.540117232	9
11	2009	3832.2364	10.49	3.583452292	10
12	2010	4550.4531	18.74	3.658054643	11
13	2011	5618.1323	23.46	3.749591962	12
14	2012	6316.9183	12.44	3.80050526	13
15	2013	7050.6463	11.62	3.848228929	14
16	2014	7678.5995	8.91	3.885282016	15
17	2015	8066.9426	5.06	3.906708967	16
18	2016	8147.9377	1	3.9110477	17
19	2017	8879.4387	8.98	3.948385513	18
20	2018	9976.6771	12.36	3.998985916	19
21	2019	10216.6303	2.41	4.009307678	20
22	2020	10500.3956	2.78	4.021205661	21
23					

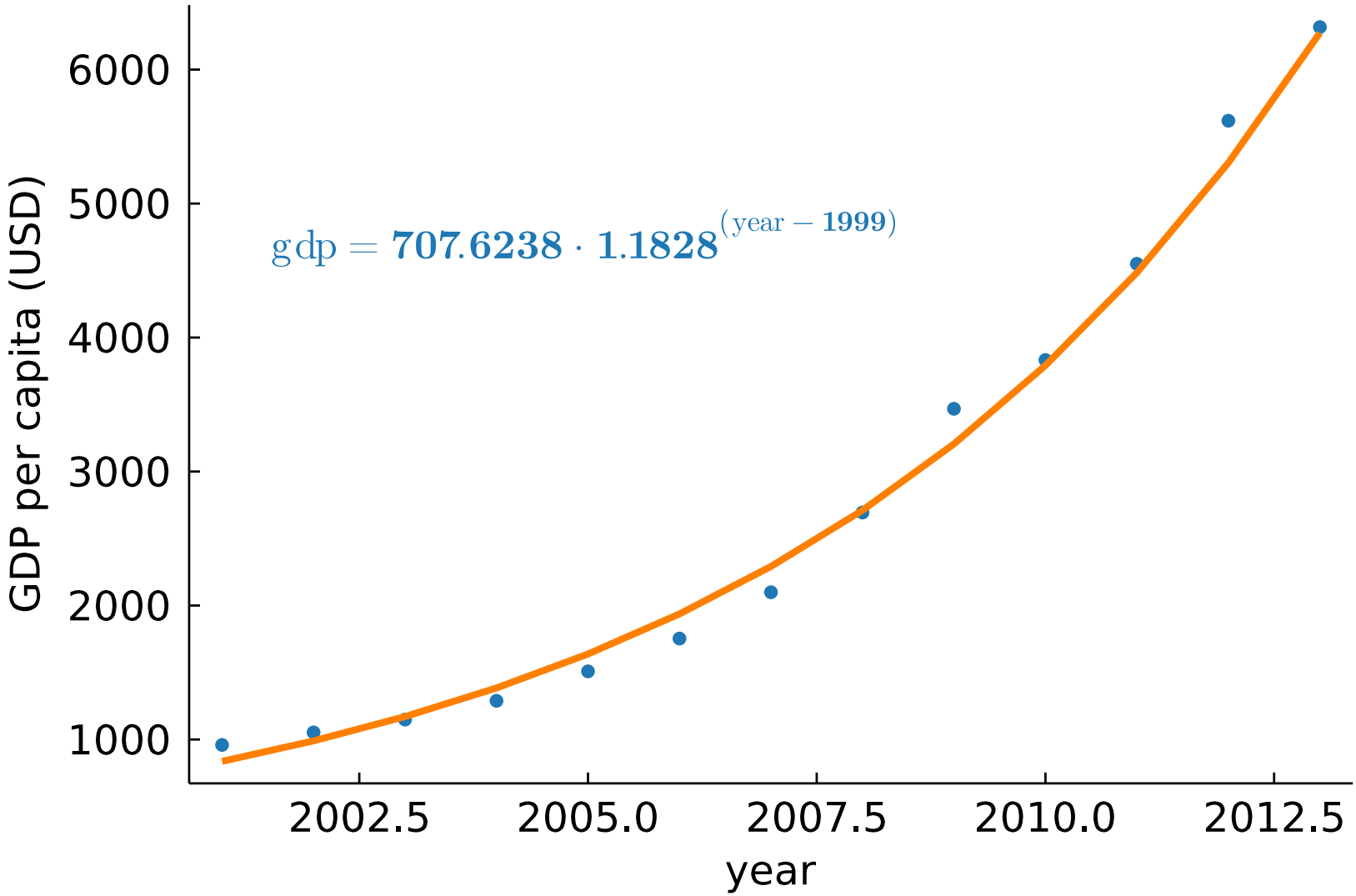
Kinesisk tillväxt 2000-2013

Coefficients:

	Coef.	Std. Error	t	Pr(>|t|)	Lower 95%	Upper 95%
(Intercept)	2.8498	0.0192341	148.16	<1e-18	2.80747	2.89214
year	0.0729005	0.00242327	30.08	<1e-11	0.067567	0.0782341

- $\tilde{a} = 2.8498$, så $a = 10^{\tilde{a}} = 707.62376$.
- $\tilde{b} = 0.0729005$, så $b = 10^{\tilde{b}} = 10^{0.0729005} = 1.18277$.

Kinesisk tillväxt 2000-2013



Kinesisk tillväxt 2000-2021