



Diplomado en Big Data y Ciencias de Datos

Minería de Datos

Análisis de Regresión

Educación Profesional - Escuela de Ingeniería UC

Sebastián Raveau









Análisis de regresión

Técnica econométrica ampliamente utilizada en múltiples contextos

Corresponde a un método de aprendizaje supervisado

Nos interesa entender y predecir variables numéricas (continuas y discretas)

Podemos estudiar relaciones lineales y no lineales

Recordemos las técnicas de Minería de Datos

Técnicas Predictivas – Aprendizaje Supervisado

Regresión ajustar variables/relaciones continuas

Clasificación ajustar variables/relaciones discretas

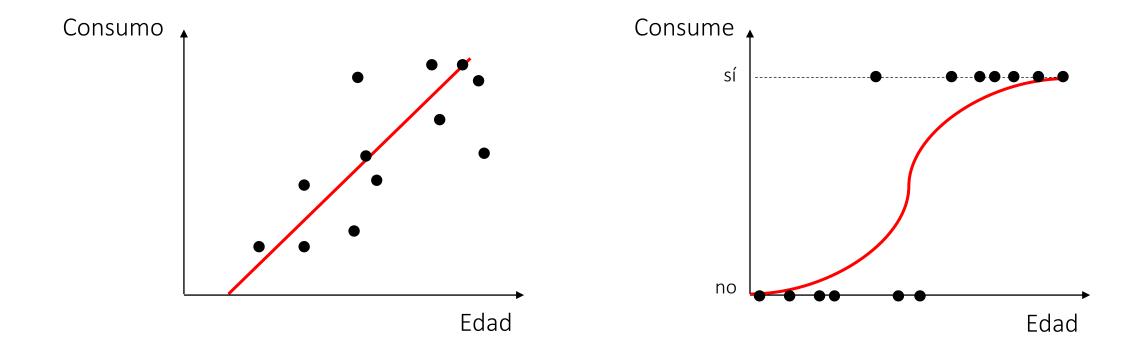
Técnicas Descriptivas – Aprendizaje No Supervisado

Clustering agrupar datos similares

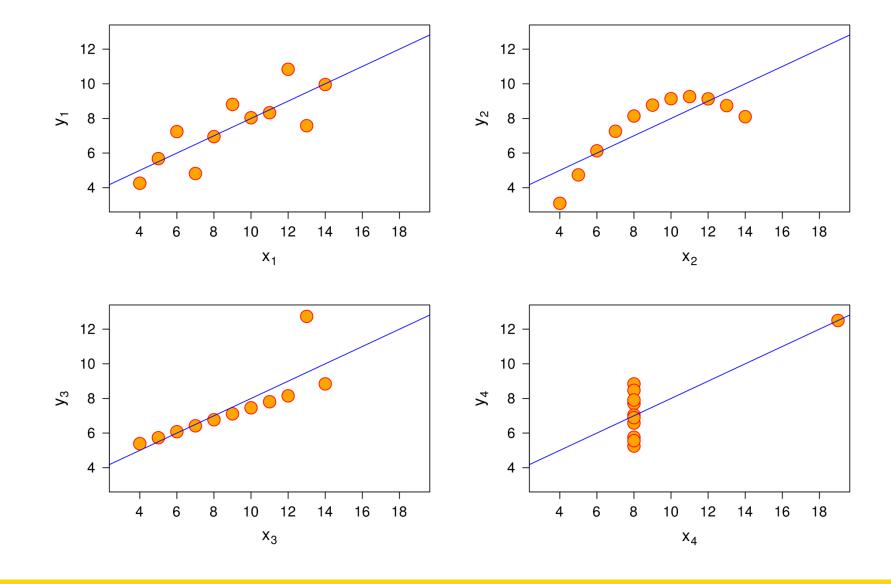
Asociación identificar patrones y coocurrencias

Análisis de regresión

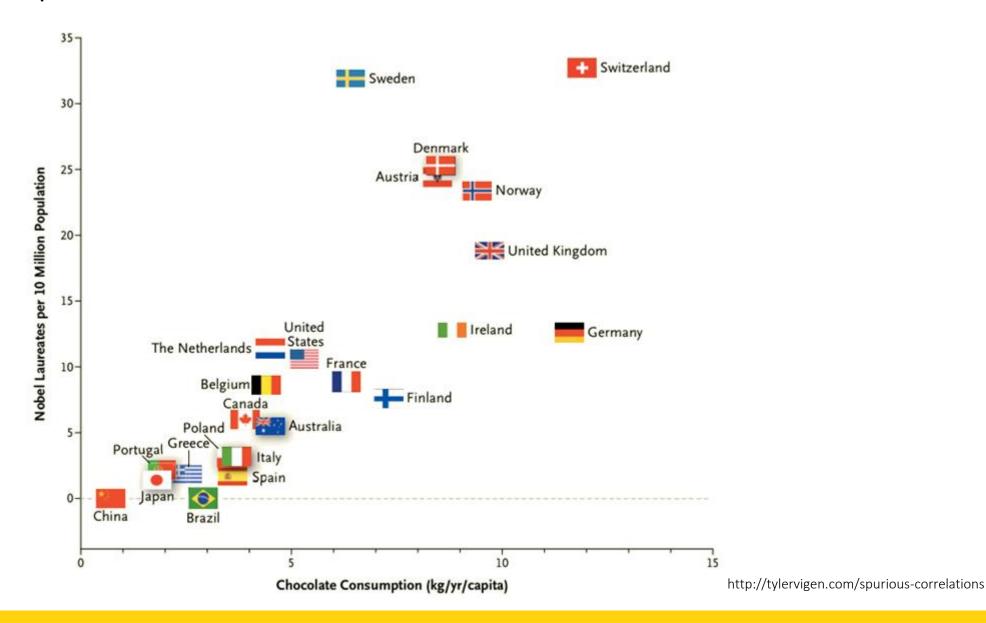
Supongamos que queremos predecir el consumo de cierto producto



Cuarteto de Anscombe



Relaciones espurias



Regresión Lineal

Regresión Lineal

En esta caso la variable endógena es continua

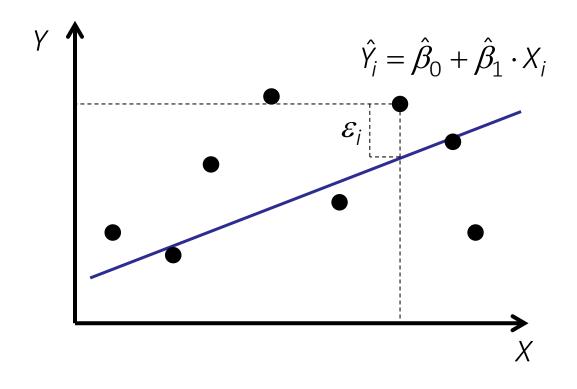
Buscamos ajustar una ecuación lineal que nos permita entender y predecir la variable endógena en función de las variables exógenas

La relación es lineal en los parámetros, no necesariamente en los atributos

$$Y = \beta_0 + \beta_1 \cdot \ln X$$
 versus $Y = \beta_0 + \beta_1 \cdot X^{\beta_2}$

Regresión lineal mediante mínimos cuadrados

Existen diversas maneras de encontrar ajustar una recta $Y_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot X_i + e_i$ a los datos



Mínimos Cuadrados

$$\mathsf{Min}\;\sum_{i} \boldsymbol{\varepsilon}_{i}^{2}$$

Regresión lineal mediante mínimos cuadrados

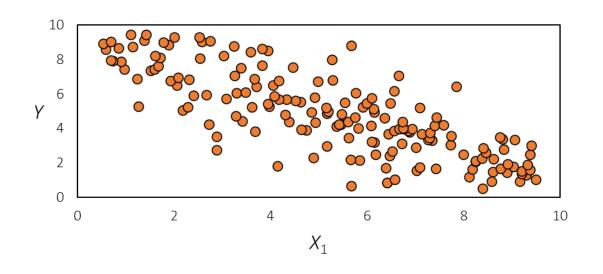
Dada la regresión lineal

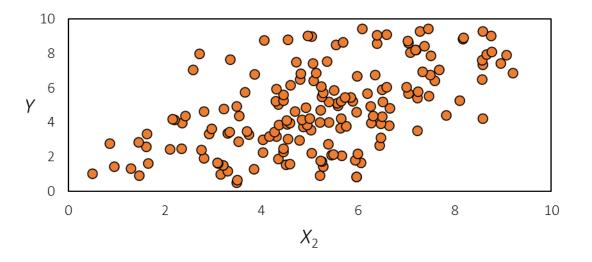
$$Y_{i} = \beta_{0} + \beta_{1} \cdot X_{1} + \beta_{2} \cdot X_{2} + ... + \beta_{k} \cdot X_{k} + e_{i}$$

Los parámetros eta que minimizan la suma cuadrática de los errores son

$$\hat{\beta} = \left(X^{T}X\right)^{-1}X^{T}Y$$

Consideremos los siguientes datos





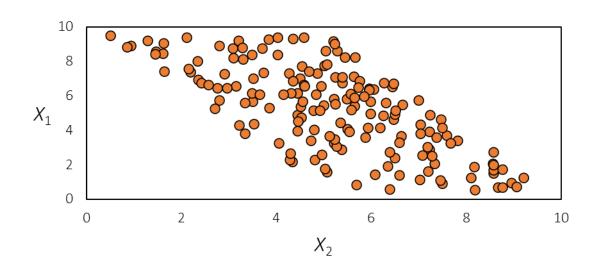
$$\rho_{Y,X_1} = -0.798$$

$$\rho_{Y,X_2} = 0.552$$

$$\rho_{Y,X_1} = -0.798$$

$$\rho_{Y,X_2} = 0.552$$

$$\rho_{X_1,X_2} = -0.704$$



Aplicando Mínimos Cuadrados

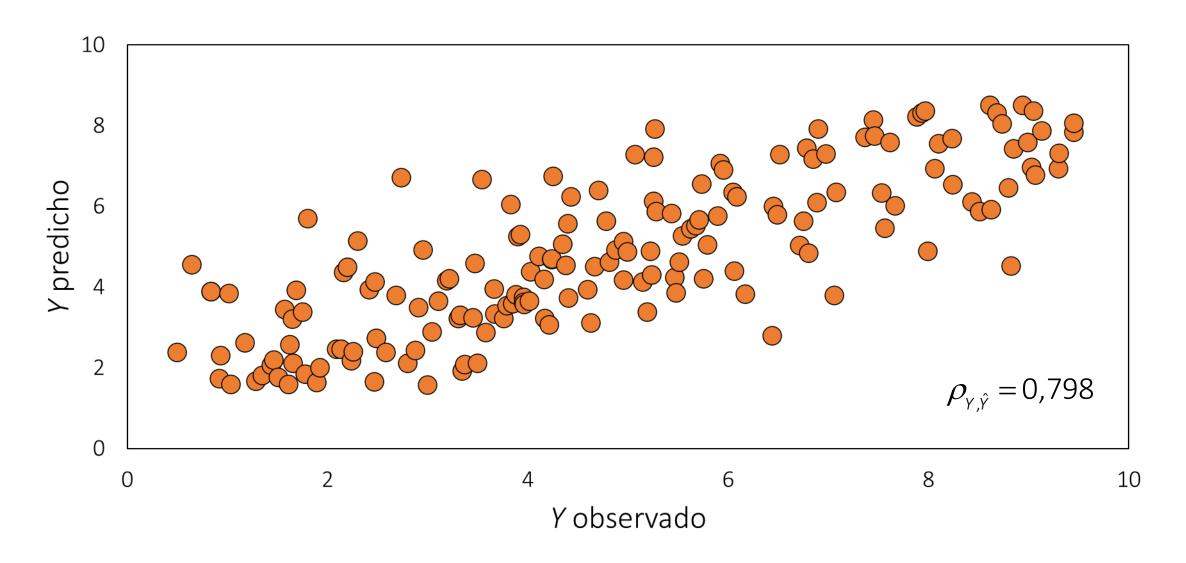
Los parámetros β que minimizan la suma cuadrática de los errores son

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y = \begin{bmatrix} 9,122 \\ -0,792 \\ -0,025 \end{bmatrix}$$

Por lo tanto la recta de regresión estimada es

$$\hat{Y}_i = 9,122 - 0,792 \cdot X_{1i} - 0,025 \cdot X_{2i}$$

Valores observados *vs* predichos



Índices de ajuste del modelo

Coeficiente de determinación R²

$$R^{2} = \frac{\sum_{i} (\hat{Y}_{i} - \overline{Y})^{2}}{\sum_{i} (Y_{i} - \overline{Y})^{2}} = \frac{\text{Variación Explicada}}{\text{Variación Total}}$$

El índice R² requiere la presencia del intercepto y está acotado entre 0 y 1

Índices de ajuste del modelo

Un problema del índice R^2 es que siempre aumenta a medida que se agregan nuevas variables explicativas

Podemos ajustar por la cantidad de variables explicativas k (sin contar el intercepto) y la cantidad de observaciones n

$$\overline{R}^2 = \left(R^2 - \frac{k}{n-1}\right)\left(\frac{n-1}{n-k-1}\right)$$

En nuestro ejemplo

Variación Total =
$$\sum_{i} (Y_i - \overline{Y})^2 = 982.8$$

Variación Explicada =
$$\sum_{i} (\hat{Y}_{i} - \overline{Y})^{2} = 625,9$$

$$R^2 = 0,637$$

$$\overline{R}^2 = \left(0,637 - \frac{2}{168 - 1}\right) \left(\frac{168 - 1}{168 - 2 - 1}\right) = 0,632$$

¿Cuánto aporta cada variable explicativa?

Los parámetros estimados también tienen varianza

$$Var(\hat{\beta}) = \frac{\sum_{i} \varepsilon_{i}^{2}}{n - (k+1)} \cdot (X^{T}X)^{-1}$$

A partir de la varianza de cada parámetro, podemos obtener una medida de significancia estadística del aporte de cada variable dentro del modelo, como por ejemplo un test-t

En nuestro ejemplo

$$\sum_{i} \varepsilon_{i} = 0$$

$$\sum_{i} \varepsilon_{i}^{2} = 356,9$$

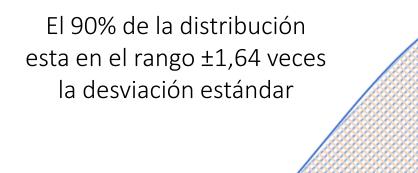
$$Var(\hat{\beta}_0) = 0.528$$

$$Var(\hat{\beta}_1) = 0.004$$

$$Var(\hat{\beta}_2) = 0.007$$

¿Cuánto aporta cada variable explicativa?

Distribución Normal:



$$\hat{eta}$$
 -1,64 \cdot $\sigma_{\hat{eta}}$ \hat{eta} -1,96 \cdot $\sigma_{\hat{eta}}$

El 95% de la distribución esta en el rango ±1,96 veces la desviación estándar

$$\hat{\beta}$$
 + 1,64 \cdot $\sigma_{\hat{\beta}}$ $\hat{\beta}$ + 1,96 \cdot $\sigma_{\hat{\beta}}$

¿Cuánto aporta cada variable explicativa?

El test-t nos permite analizar si el valor 0 pertenece al intervalo de confianza del parámetro estimado, comparando su media con su desviación estándar

$$t_{\hat{\beta}_i} = \frac{\hat{\beta}_i}{\sigma_{\hat{\beta}_i}}$$

Si está sobre 1,64 la variable es estadísticamente significativa al 90% de confianza Si está sobre 1,96 la variable es estadísticamente significativa al 95% de confianza

En nuestro ejemplo

$$\hat{\beta}_0 = 9,122$$

$$Var(\hat{\beta}_0) = 0.528$$

$$t_{\hat{\beta}_0} = 9,122/\sqrt{0,528} = 12,56$$

$$\hat{\beta}_1 = -0.792$$

$$Var(\hat{\beta}_1) = 0.004$$

$$t_{\hat{\beta}_1} = -0.792/\sqrt{0.004} = -12.29$$

$$\hat{\beta}_2 = -0.025$$

$$Var(\hat{\beta}_2) = 0.007$$

$$t_{\hat{\beta}_2} = -0.025 / \sqrt{0.007} = -0.30$$

La variable X_1 sí es estadísticamente significativa

La variable X_2 no es estadísticamente significativa

Especificación del modelo

Con X_2 en el modelo

$$\hat{\beta}_0 = 9,122$$
(12,56)

$$\hat{\beta}_1 = -0.792 \\ (-12.29)$$

$$\hat{\beta}_2 = -0.025$$
 (-0.30)

$$R^2 = 0,637$$

$$\bar{R}^2 = 0,632$$

Sin X_2 en el modelo

$$\hat{\beta}_0 = 8,918$$
(33,65)

$$\hat{\beta}_1 = -0.778 \\ (-17.05)$$

$$R^2 = 0.637$$
 (más bajo al 4° decimal)

$$\bar{R}^2 = 0.634$$

Especificación del modelo

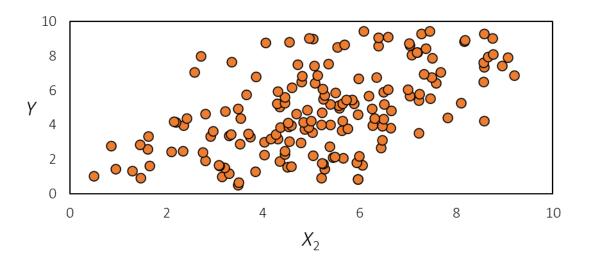
Sólo con X_2 en el modelo

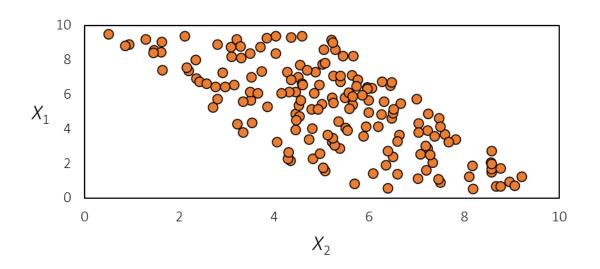
$$\hat{\beta}_0 = 1,173$$
(2,57)

$$\hat{\beta}_2 = 0.705$$
(8,52)

$$R^2 = 0.304$$

$$\bar{R}^2 = 0.300$$





Regresión Logística

Regresión logística

En esta caso la variable endógena es discreta

No podemos ajustar una ecuación lineal, pero sí ajustar una función de probabilidad

Modelamos la probabilidad de que la variable endógena tome cada uno de sus posibles valores, en función de un conjunto de variables exógenas

Caso binomial

Consideremos una variable endógena con dos niveles (1 y 0)

Definimos una "función de respuesta" R_i

$$R_i = \theta_0 + \theta_1 \cdot X_1 + \theta_2 \cdot X_2 + \ldots + \theta_k \cdot X_k$$

Y probabilidades de cada nivel son:

$$\Pr(Y_i = 1) = \frac{\exp(R_i)}{\exp(R_i) + 1}$$

$$\Pr(Y_i = 0) = \frac{1}{\exp(R_i) + 1}$$

Caso binomial

Dividiendo ambas probabilidades

$$\frac{\Pr(Y_i=1)}{\Pr(Y_i=0)} = \frac{\Pr(Y_i=1)}{1-\Pr(Y_i=1)} = \exp(R_i)$$

Y podemos obtener una relación lineal para estimar los parámetros del modelo, es por esto que se habla de "regresión" en este caso discreto

$$\ln \left[\frac{\Pr(Y_i = 1)}{1 - \Pr(Y_i = 1)} \right] = R_i = \theta_0 + \theta_1 \cdot X_1 + \theta_2 \cdot X_2 + \ldots + \theta_k \cdot X_k$$

Caso multinomial

Podemos extender este modelo a variables endógenas con más niveles

Por ejemplo, con cuatro niveles (3, 2, 1 y 0):

$$R_i^a = \theta_0^a + \theta_1^a \cdot X_1 + \theta_2^a \cdot X_2 + \ldots + \theta_k^a \cdot X_k$$

$$R_i^b = \theta_0^b + \theta_1^b \cdot X_1 + \theta_2^b \cdot X_2 + \ldots + \theta_k^b \cdot X_k$$

$$R_i^c = \theta_0^c + \theta_1^c \cdot X_1 + \theta_2^c \cdot X_2 + \ldots + \theta_k^c \cdot X_k$$

Caso multinomial

Podemos extender este modelo a variables endógenas con más niveles

Por ejemplo, con cuatro niveles (3, 2, 1 y 0):

$$\Pr(Y_i = 3) = \frac{\exp(R_i^a)}{\exp(R_i^a) + \exp(R_i^b) + \exp(R_i^c) + 1} \qquad \Pr(Y_i = 2) = \frac{\exp(R_i^b)}{\exp(R_i^a) + \exp(R_i^b) + \exp(R_i^c) + 1}$$

$$\Pr(Y_i = 1) = \frac{\exp(R_i^c)}{\exp(R_i^a) + \exp(R_i^b) + \exp(R_i^c) + 1} \qquad \Pr(Y_i = 0) = \frac{1}{\exp(R_i^a) + \exp(R_i^b) + \exp(R_i^c) + 1}$$

Máxima Verosimilitud

Como la función de respuesta R_i es función de los parámetros θ y las probabilidades de cada nivel son función de R_i , entonces las probabilidades son función de los parámetros θ

Buscamos los parámetros θ que le entregan una alta probabilidad de ocurrencia a los datos observados, $\Pr^*(Y_i)$

Máxima Verosimilitud

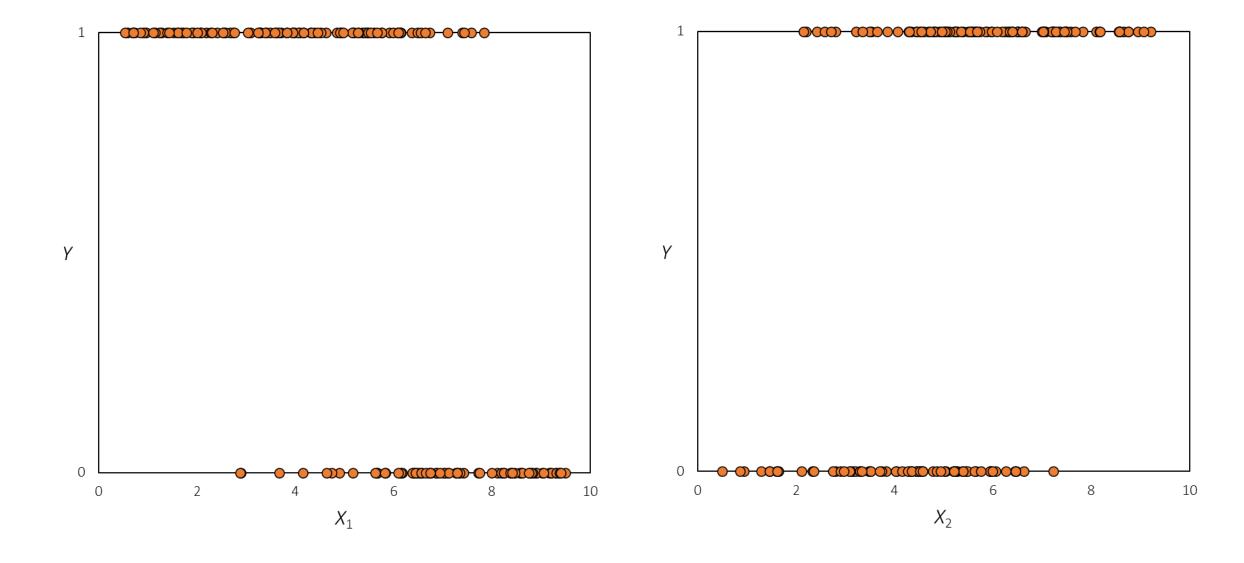
La función de verosimilitud *L* consiste en la probabilidad conjunta de ocurrencia de los datos observados

$$\mathsf{Max}_{\{\theta\}} L = \prod_{i} \mathsf{Pr}^*(Y_i)$$

Por conveniencia computacional podemos maximizar la log-verosimilitud /:

$$\mathsf{Max}_{\{\theta\}} \ I = \sum_{i} \mathsf{In} \Big[\mathsf{Pr}^* \big(Y_i \big) \Big]$$

Discretizando nuestro ejemplo anterior



Aplicando Máxima Verosimilitud

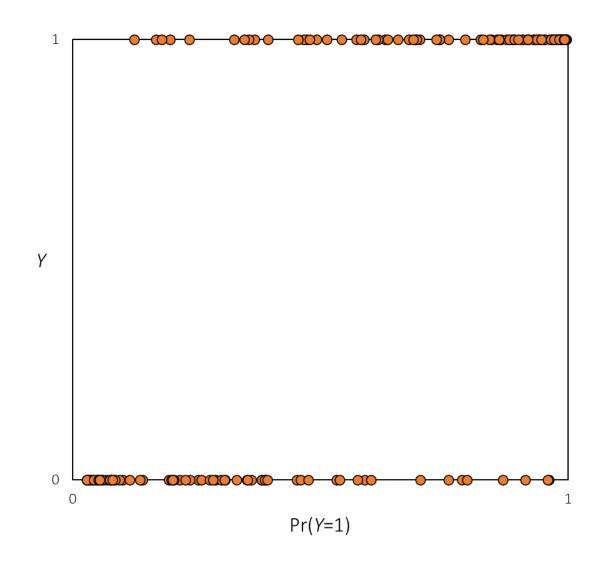
$$\hat{\theta}_0 = 6,372$$

$$\hat{\theta}_1 = -1,044$$

$$\hat{\theta}_2 = -0.026$$

$$I^* = -62,7$$

$$L^* = 5,88 \times 10^{-28}$$



Significancia estadística

No existe una expresión cerrada para los valores óptimos de los parámetros heta

Las varianzas de los parámetros se pueden obtener a partir de la matriz de segundas derivadas de la función de log-verosimilitud

$$Var(\hat{\theta}) = -\left[\frac{\partial^2 I(\theta)}{\partial \theta^2}\bigg|_{\hat{\theta}}\right]^{-1}$$

En nuestro ejemplo

$$\hat{\theta}_0 = 6,372$$

$$t_{\hat{\theta}_0} = 6,372/1,696 = 3,76$$

$$\hat{\theta}_1 = -1,044$$

$$t_{\hat{\theta}_1} = -1,044/0,183 = -5,72$$

$$\hat{\theta}_2 = -0.026$$

$$t_{\hat{\theta}_2} = -0.026/0.174 = -0.152$$

La variable X_1 sí es estadísticamente significativa

La variable X_2 no es estadísticamente significativa

Criterios de información

De todos los criterios de información, el más utilizado es el propuesto por Akaike

$$AIC = 2 \cdot k - 2 \cdot l^*$$

Para muestras pequeñas, el AIC puede presentar sesgos

En dicho caso se puede aplicar el criterio corregido:

$$CAIC = AIC + \frac{2 \cdot k^2 + 2 \cdot k}{n - k - 1}$$

En nuestro ejemplo

$$I^* = -62,7$$

$$AIC = 2 \cdot 3 - 2 \cdot (-67,7) = 131,4$$

$$CAIC = 131,4 + \frac{2 \cdot 3^2 + 2 \cdot 3}{168 - 3 - 1} = 131,5$$

Predicción

Según sea necesario, podemos utilizar las probabilidades del modelo para el análisis o transformarlas en variables discretas (i.e. clasificar)

El nivel predicho será aquel con mayor probabilidad

Al predecir niveles discretos podemos aplicar diferentes enfoques de éxito predictivo, como matrices de confusión

En nuestro ejemplo

		Observado	
		Positivo 1	Negativo 0
Predicho	Positivo 1	TP 82	FP 13
	Negativo 0	FN 15	TN 58

$$accuracy = (82 + 58)/168 = 0,833$$