# Inferență statistică în ML

## Cap 6. Corelația și regresia liniară

April 21, 2019

# Regression

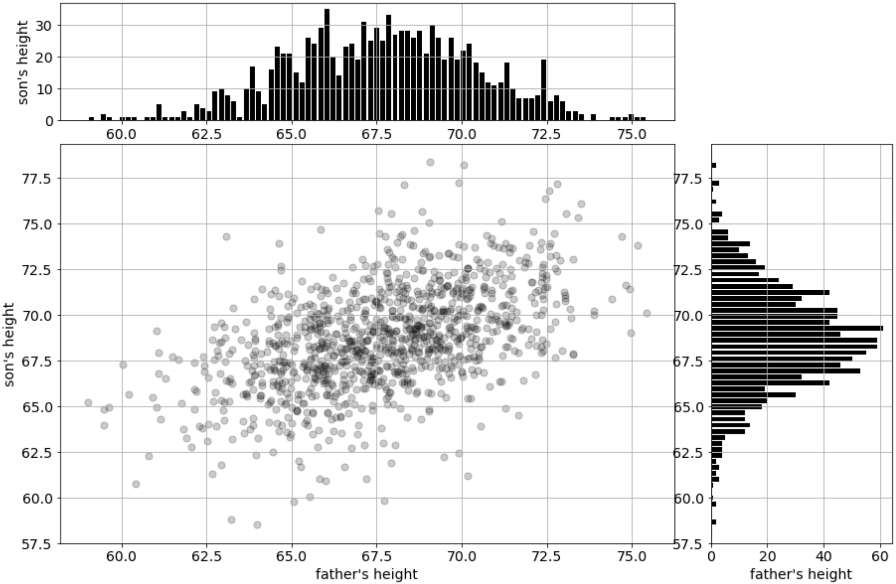
- **regresia** este unul din modelele fundamentale, primul model de machine learning care se încearcă
- generalizarea sa este modelul liniar (Generalized Linear Model)
- concept (împreună cu modelul de corelație liniară) inventat de matematicianul britanic Francis Galton (sec XIX), pentru predicția a înălțimii fiilor folosind înălțimea taților (father.son dataset)
- explică relația simplă de medie dintre înălțimile fiilor și înălțimile taților într-un mod universal valabil (model transparent vs. NN = black-box)
- investighează variația înălțimii fiilor care pare să nu fie dependentă de înălțimea taților (variația reziduală)
- cuantifică ce impact are înălțimea taților în explicarea înălțimii fiilor
- dă un set de presupuneri care trebuie să fie valabile pentru ca modelul să generalizeze bine în afara sample-ului
- principiul 'regresiei către medie' ($T \rightarrow t$ , $S \leftarrow s$)

# Galton dataset: father.son

- dataset folosit în 1885 de Francis Galton (1822 - 1911)
- Galton a inventat conceptele de regresie, corelație, deviație standard, percentile
- vărul lui Charles Darwin
- https://select-statistics.co.uk/blog/regression-to-the-mean-as-relevant-today-as-it-was-in-the

- vom vedea distribuțiile marginale ale taților - P(father), respectiv ale fiilor - P(son), respectiv cea bidimensională P(father, son)

# Distribuțiile marginale și centrală



# Găsirea mijlocului prin metoda least squares

- metoda celor mai mici pătrate (least squares)
- vom considera doar distribuția marginală a fiilor
- dacă $Y_i$ sunt valorile înălțimilor fiilor pentru $i = 1 \ldots n$, 'mijlocul' este dat de valoarea $\mu$ care minimizează:

$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \mu)^2$$

- mijlocul este centrul de masă al histogramei, respectiv valoarea medie $\mu = \bar{Y}$

# Găsirea mijlocului prin metoda least squares (2)

$$S(\mu) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \mu)^2$$

$$\min_{\mu} S(\mu) = \min_{\mu} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \mu)^2$$

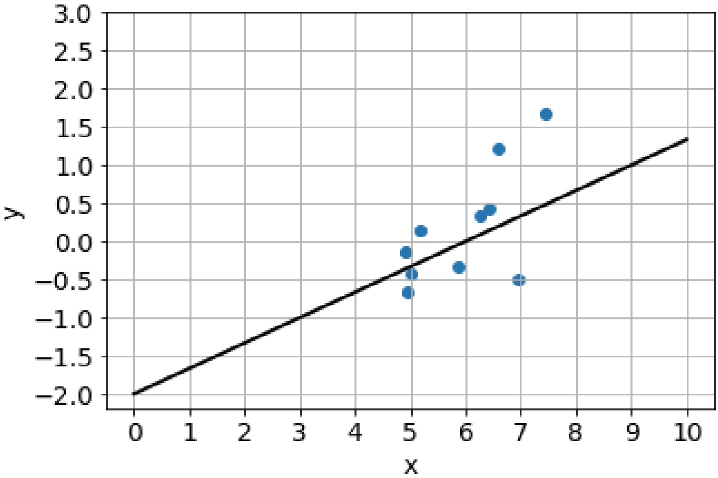
$$\frac{\partial S}{\partial \mu} = -2 \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \mu) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i - n\mu = 0 \quad \text{adică} \quad \mu = \bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Y_i$$

# Găsirea mijlocului prin metoda least squares (variantă)

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(Y_i-\mu)^2 &= \sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y}+\bar{Y}-\mu)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}\left[(Y_i-\bar{Y})^2+2(Y_i-\bar{Y})(\bar{Y}-\mu)+(\bar{Y}-\mu)^2\right] \\
&= \sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y})^2+2(\bar{Y}-\mu)\sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y})+\sum_{i=1}^{n}(\bar{Y}-\mu)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y})^2+2(\bar{Y}-\mu)\underbrace{\left(\sum_{i=1}^{n}Y_i-n\bar{Y}\right)}_{=0}+\sum_{i=1}^{n}(\bar{Y}-\mu)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y})^2+\sum_{i=1}^{n}(\bar{Y}-\mu)^2 \geq \sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y})^2 \Rightarrow \mu=\bar{Y}
\end{aligned}
$$

# Problema




- determinarea expresiei funcției $f(x) \sim y$

# Notații pentru date

- cele $n$ puncte sunt descrise ca $X_1, X_2 \dots X_n$
- de exemplu, pentru setul $X = \{4, 6, 3\}$ avem $X_1 = 4$, $X_2 = 6$, $X_3 = 3$
- putem folosi pentru puncte notații precum $X_i$, $Y_j$ etc.
- cantitățile pe care nu le cunoaștem, dar dorim să le estimăm, sunt notate cu litere grecești, de exemplu $\mu$, $\beta$ ...
- ne reamintim că o variabilă aleatoare $X \sim N(\mu, \sigma)$ se poate normaliza (standardiza sau centra): $\frac{X-\mu}{\sigma} \sim N(0, 1)$

# Deviația standard empirică

- dispersia empirică este definită ca:

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} X_i^2 - n\bar{X}^2\right)$$

- deviația standard empirică este $S = \sqrt{S^2}$; deviația standard are aceeași unitate de măsură ca a datelor
- normalizarea datelor (centrare + scalare): $Z_i = \frac{X_i - \bar{X}}{S} \sim N(0, 1)$

# Covariance

- **covariația** empirică este caracteristică perechilor de variabile aleatoare care iau același număr de valori și este descrisă de:

$$
\begin{aligned}
Cov(X, Y) &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y}) \\
&= \frac{1}{n-1} \left( \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y} \right)
\end{aligned}
$$

- covariația descrie cum variază abaterea față de media proprie sincron
- **corelația** descrie același lucru dar scalat la produsul dispersiilor variabilelor aleatoare:

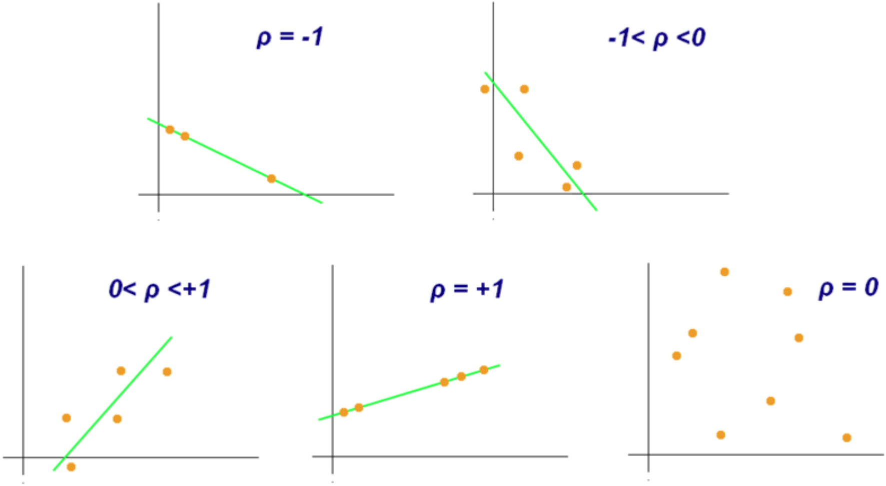
$$
Cor(X, Y) = \frac{Cov(X, Y)}{S_x S_y}
$$

- din cauza scalării, corelația are valoarea cuprinsă în intervalul $[-1, 1]$

# Proprietățile corelației

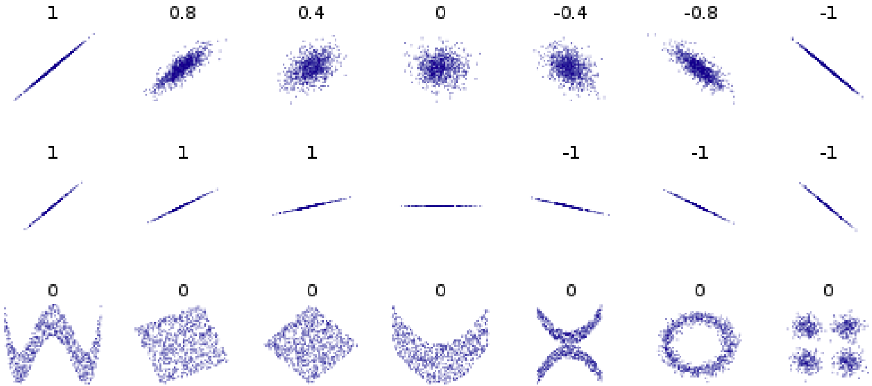
- $Cor(X, Y) = Cor(Y, X)$
- $-1 \leq Cor(X, Y) \leq 1$
- $Cor(X, Y) = 1$ și $Cor(X, Y) = -1$ doar când observațiile descrise X și Y descriu o dreaptă cu pantă pozitivă, respectiv negativă
- $Cor(X, Y)$ măsoară tăria dependenței liniare dintre X și Y; cu cât mai puternică dependența liniară, cu atât corelația se apropie de -1 sau 1
- $Cor(X, Y) = 0$ implică inexistența unei corelații liniare între X și Y

# Coeficientul de corelație[1] (Pearson)




[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Pearson_correlation_coefficient

# Coeficientul de corelație[2] nu reflectă nici panta nici forma




[2] https://en.wikipedia.org/wiki/Pearson_correlation_coefficient

# General least squares

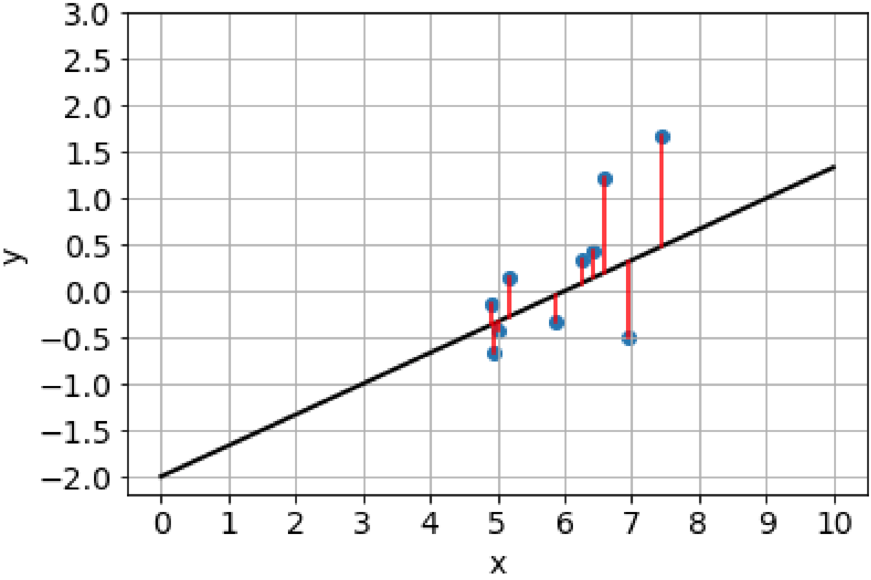
- dorim să exprimăm înălțimea copiilor în funcție de înălțimea părinților
- construim așadar predicția $y \sim x$, folosind regresia liniară
- vom construi 'cea mai potrivită' linie
- considerăm $Y_i$ înălțimile copiilor și $X_i$ înălțimile părinților
- cea mai potrivită linie presupune minimizarea erorii survenite (metoda celor mai mici pătrate):

$$\sum_{i=1}^{n} [Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)]^2$$

$$f(X_i) = \beta_0 + \beta_1 X_i$$

- parametrii regresiei sunt $\beta_1$, denumit slope, și $\beta_0$, denumit intercept

# Principiul least squares



# Principiul least squares (2)

- vom căuta soluțiile $\beta_1$, $\beta_0$ ce minimizează expresia:

$$\min_{\beta_1,\beta_0} J(\beta_1,\beta_0) = \min_{\beta_1,\beta_0} \left[Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)\right]^2 \tag{1}$$

- cum este vorba de o problemă de optim, acesta se află prin anularea derivatelor parțiale:

$$0 = \frac{\partial J}{\partial \beta_0} = 2\sum_{i=1}^{n} \left[Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)\right] \quad \text{respectiv}$$

$$0 = \frac{\partial J}{\partial \beta_1} = 2\sum_{i=1}^{n} \left[Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)\right](-X_i)$$

# Principiul least squares (3)

- din prima relație obținem:

$$
\begin{aligned}
0 &= \sum_{i=1}^{n} [Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)] \\
&= \sum_{i=1}^{n} Y_i - n\beta_0 - \beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_i \\
&= n\bar{Y} - n\beta_0 - n\beta_1 \bar{X} \\
&= n\left(\bar{Y} - \beta_0 - \beta_1 \bar{X}\right)
\end{aligned}
$$

- adică:

$$
\boxed{\beta_0 = \bar{Y} - \beta_1 \bar{X}} \tag{2}
$$

# Principiul least squares (4)

- din a doua relație obținem (am redus cu -2):

$$
\begin{aligned}
0 &= \sum_{i=1}^{n} \left[Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)\right] X_i \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i - \beta_0 \sum_{i=1}^{n} X_i - \beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_i^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i - n\beta_0 \bar{X} - \beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_i^2 \quad \text{, introducem relația pentru } \beta_0\text{:} \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i - n\left(\bar{Y} - \beta_1 \bar{X}\right) \bar{X} - \beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_i^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y} + n\beta_1 \bar{X}^2 - \beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_i^2
\end{aligned}
$$

# Principiul least squares (5)

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{i=1,n} X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y} + n\beta_1 \bar{X}^2 - \beta_1 \sum_{i=1,n} X_i^2 \\
&= \sum_{i=1,n} X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y} - n\beta_1 \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1,n} X_i^2 - \bar{X}^2 \right) \\
&= \sum_{i=1,n} X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y} + n\bar{X}\bar{Y} - n\bar{X}\bar{Y} - n\beta_1 Var(X) \\
&= \sum_{i=1,n} X_i Y_i - \sum_{i=1,n} \bar{X} Y_i + \sum_{i=1,n} \bar{X}\bar{Y} - \sum_{i=1,n} X_i \bar{Y} - n\beta_1 Var(X) \\
&= \sum_{i=1,n} (X_i - \bar{X}) Y_i - \sum_{i=1,n} (X_i - \bar{X}) \bar{Y} - n\beta_1 Var(X) \\
&= \sum_{i=1,n} (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y}) - n\beta_1 Var(X) = nCov(X, Y) - n\beta_1 Var(X)
\end{aligned}
$$

# Principiul least squares (6)

- adică:

$$nCov(X,Y) - n\beta_1 Var(X) = 0$$
$$\beta_1 Var(X) = Cov(X,Y)$$
$$\beta_1 Std(X)Std(X) = Cor(X,Y)Std(X)Std(Y)$$

- sau:

$$\boxed{\beta_1 = Cor(X,Y)\frac{Std(Y)}{Std(X)}}$$

# Least squares - sumar

- modelul realizează potrivirea (fit) funcției liniare $Y \sim \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X$, unde:

$$\hat{\beta}_1 = Cor(X, Y)\frac{Std(Y)}{Std(X)} \quad \text{și} \quad \hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \beta_1 \bar{X}$$

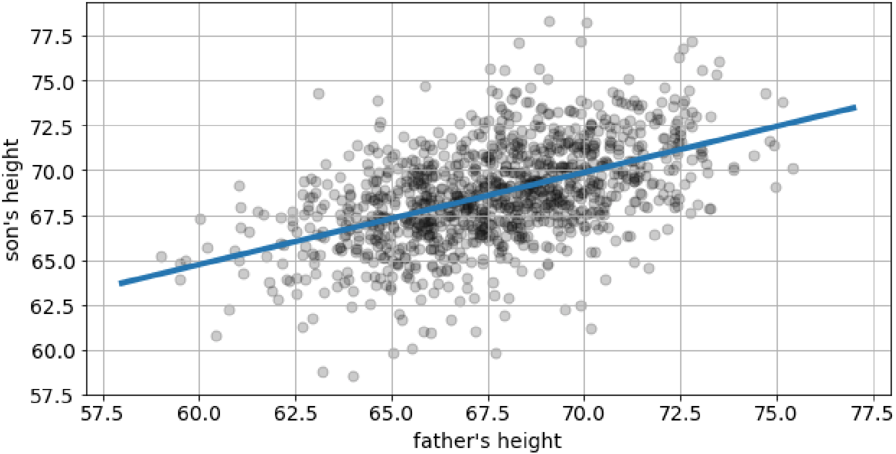
- coeficienții $\beta_0$ și $\beta_1$ nu sunt cei exacți, ci doar niște estimatori calculați pe sample-ul nostru
- $\hat{\beta}_1$ este în unități de $Y/X$, iar $\hat{\beta}_0$ are unitatea de măsură a lui $Y$
- deoarece $\bar{Y} = \hat{\beta}_0 + \beta_1 \bar{X}$, dreapta de regresie trece prin punctul $(\bar{X}, \bar{Y})$
- panta regresiei este aceeași cu cea obținută dacă am standardiza centra datele, $(X_i - \bar{X}, Y_i - \bar{Y})$, dreapta regresiei trece prin origine
- dacă am și standardiza datele, panta regresiei devine $Cor(X, Y)$

# Codul pentru regresia liniară

```
# see https://machinelearningmastery.com/introduction-to-expected-value-variance-and-covariance/

x, y = np.array(fheight), np.array(sheight)
beta1 = np.corrcoef(x, y)[0, 1] * np.std(y)/np.std(x)
beta0 = np.mean(y) - beta1 * np.mean(x)
print('beta0:', beta0, 'beta1:', beta1)

xext = sm.add_constant(x)

lm = sm.OLS(y, xext).fit()
print('intercept:', lm.params[0], 'coefficient:', lm.params[1])

x1 = np.linspace(58, 77, 100)
y1 = beta1 * x1 + beta0

fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(10, 5))
ax.scatter(x, y, c='k', alpha = .2, s=50)
ax.plot(x1, y1, lw=4)
ax.set(xlabel="father's height", ylabel="son's height")
ax.grid(True)
plt.show()
```

```
beta0: 33.88660435407794 beta1: 0.5140930386233075
intercept: 33.88660435407793 coefficient: 0.514093038623308
```

# Dreapta de regresie



# Regresia către medie

- idee faimoasă avansată de Francis Galton

- de ce copiii părinților înalți tind să fie înalți, dar nu la fel de înalți ca și părinții lor?
- de ce copiii părinților scunzi sunt și ei scunzi, dar totuși mai înalți decât părinții lor?
- de ce părinții copiilor înalți sunt și ei înalți, dar nu așa înalți ca și copiii lor?
- de ce Simona Halep, care a ajuns top1 mondial, tinde să joace mai prost anul ăsta?
- de ce prețurile unor acțiuni, care au mers așa bine, acum scad?

- este un motiv intrinsec sau este doar regresia către mediocritate?

# Regresia către medie (2)

- toate sunt exemple de fenomene de tip 'regresie către medie'

```
x = np.random.randn(10)
ordered = np.argsort(x)[::-1]

y = np.random.randn(10)

# doar in 1 caz din 11 vom obtine un numar mai mic
print(x[ordered[0]], '>', y[ordered[0]])
```

```
1.6560722892507018 > -2.3249257309267626
```

```
# verificare
n = 10000000
x = np.random.randn(n, 10)
ordered = np.argsort(x, axis=1)
for i in range(x.shape[0]):
    x[i, :] = x[i, ordered[i][::-1]]

y = np.random.randn(n, 10)
print(np.sum(x[:, 0] < y[:, 0]) / n, 'vs. 1/11 =', 1/11)
```

```
0.0909046 vs. 1/11 = 0.09090909090909091
```

- maximul dintr-un set de 10 numere are o șansă de 10 din 11 să fie mai mare decât numărul de pe aceeași poziție din al doilea set

# Regresia către medie (3)

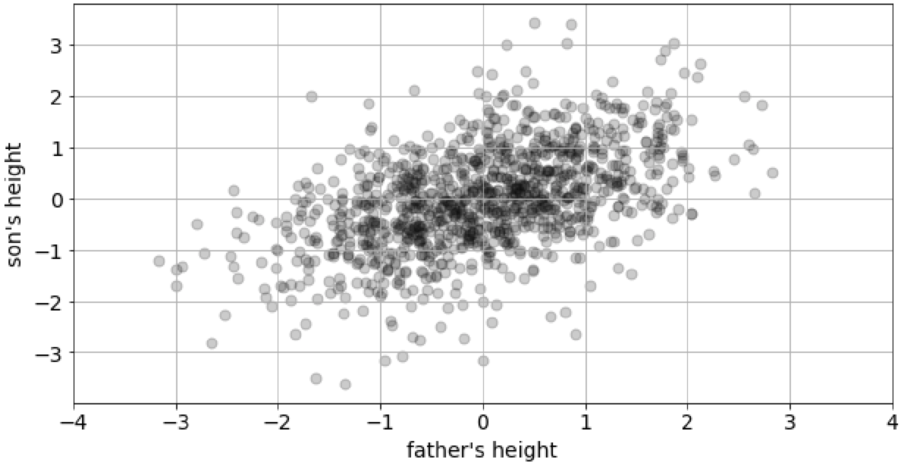
- pentru două seturi de numere extrase aleator, cel mai mare număr din primul set va fi mai mare din pură întâmplare
- probabilitatea ca în al doilea set să fie altele mai mici decât acest maxim este mare
- adică $P(Y < X|X = x)$ crește atunci când $x$ merge spre valori mari
- similar, $P(Y > X|X = x)$ crește pe măsură ce $x$ merge spre valori mai mici

- ne putem gândi la dreapta de regresie ca la un instrument care indică dependența liniară de valorile anterioare
- în cazul $Cor(Y, X) = 1$, atunci $Y$ se comportă la fel ca $X$, altfel, substratul nu e identic

# Regresia către medie (4)

- presupunem că normalizăm atât X (înălțimea părinților) precum și înlălțimea copiilor (X), astfel ca ambele să aibă media 0 și deviația standard 1
- în aceste condiții dreapta de regresie trece prin origine $(\bar{X}, \bar{Y})$
- panta dreptei de regresie este atunci $Cor(Y, X)$

# Regresia către medie (5)



# Regresia către medie (6)

```
# originea este acum (Xbar, Ybar)
x, y = np.array(fheight), np.array(sheight)
x, y = (x - np.mean(x))/np.std(x), (y - np.mean(y))/np.std(y)
rho = np.corrcoef(x, y)[0, 1]
print('rho:', rho)

x1 = np.linspace(-4, 4, 100)

fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(10, 5))
ax.scatter(x, y, c='k', alpha = .2, s=50)
ax.plot(x1, rho * x1, lw=4)
ax.plot([2, 2, -4], [0, 2, 2], 'g', lw=2)
ax.plot([2, 2, -4], [0, 1, 1], 'r', lw=2)
ax.plot(x1, x1, lw=1, c='k')
ax.plot(x1, [0] * len(x1), lw=1, c='k')
ax.legend(['dreapta de regresie', 'fără zgomot,\ncorelație perfectă', 'regresia către medie',
           'doar zgomot,\n nicio corelație'])
ax.set(xlabel="father's height", ylabel="son's height", xlim=(-4, 4))
ax.grid(True)
plt.show()
```

```
rho: 0.5013383111723431
```

# Regresia către medie (7)