Laboratorio de Datos

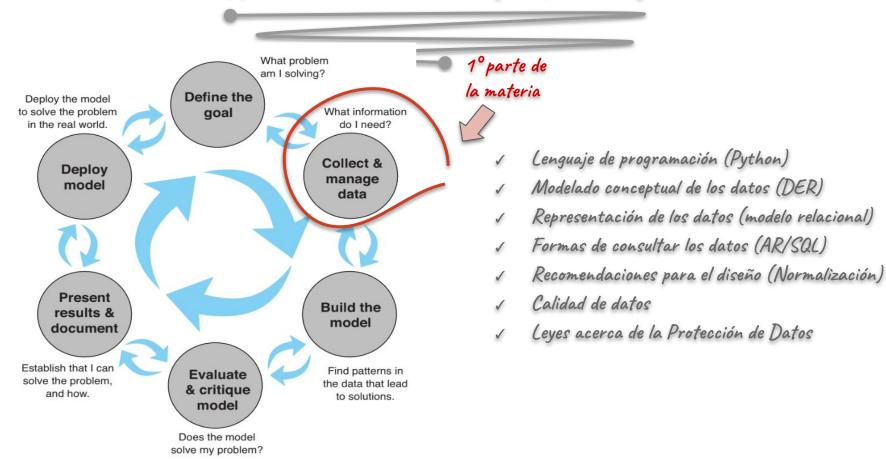
Regresión



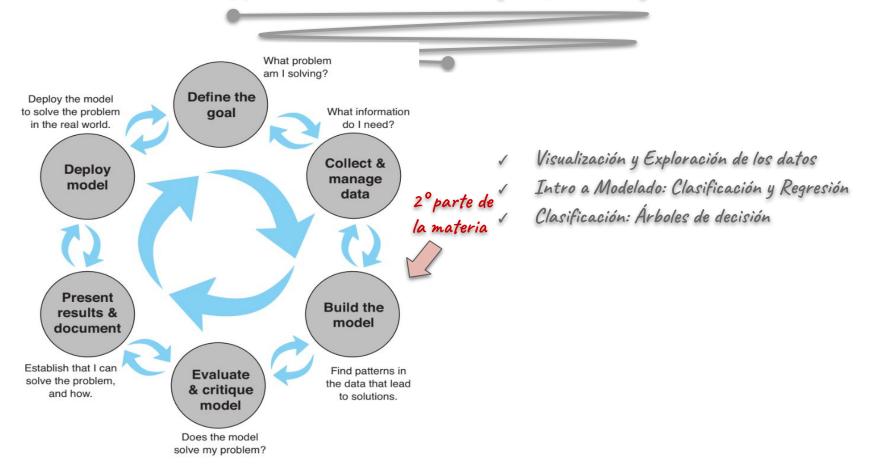




Recorrido de la materia (hasta ahora)



Recorrido de la materia (hasta ahora)



Regresión



Laboratorio de datos - 2023

Objetivos de la clase

- ✓ Presentar el modelo estadístico de Regresión Lineal Simple (RLS)
- ✓ Conocer (algunas de) sus potenciales aplicaciones
- ✓ Aplicar e interpretar los resultados de un modelo de RLS con fines explicativos
- ✓ Comprender la naturaleza aleatoria de los estimadores de los parámetros del modelo

Introducción - Uso de pesticidas

El daño al material de los pesticidas preocupación a escala global



Introducción - Uso de pesticidas

- En particular, el glifosato es un herbicida utilizado para el control de malezas, inhibiendo el crecimiento de las plantas
- ✓ Las formulaciones comerciales (ej Roundup®) incluyen mezclas para mejorar la eficacia de la acción del herbicida

El estudio

Se llevó a cabo un estudio para evaluar los efectos genotóxicos de Roundup®

("RU") en embriones de *Caiman latirostris* con el fin de evaluar el riesgo potencial asociado a la exposición sufrida en el medio natural de esta especie



El estudio

El estudio plantea un experimento con el principal

objetivo de relacionar el daño en el material genético de embriones de yacaré con la dosis de RU





Obtener una función (modelo) que relacione:

- la concentración de herbicida (X)
- el índice de daño al material genético (Y)

... y analizar los parámetros de dicho modelo

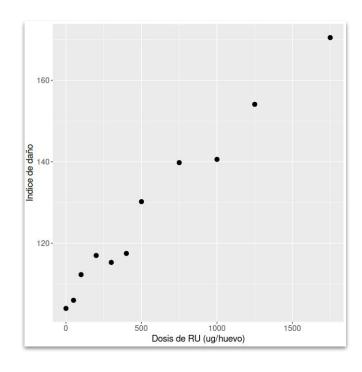
El experimento

- En condiciones de laboratorio, se expuso a 11 huevos de yacaré a distintas concentraciones de RU entre 0 y 1.750 ug/huevo
 - → Huevos asignados al azar a las concentraciones de RU
 - →Dosis de RU fijada por el investigador
- Al momento de la eclosión se tomaron muestras de sangre y se calculó el daño en el ADN mediante un índice de daño ("DI" debido a su traducción al inglés, Damage Index)

Los datos

¿Qué observan de los datos?

| ^ | RU ÷ | DI ÷ |
|----|------|--------|
| 1 | 0 | 104.00 |
| 2 | 50 | 106.00 |
| 3 | 100 | 112.30 |
| 4 | 200 | 117.00 |
| 5 | 300 | 115.30 |
| 6 | 400 | 117.50 |
| 7 | 500 | 130.22 |
| 8 | 750 | 139.80 |
| 9 | 1000 | 140.60 |
| 10 | 1250 | 154.12 |
| 11 | 1750 | 170.50 |

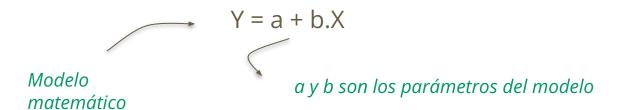


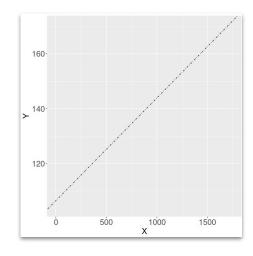
Formalizando - Análisis de regresión

- □ OBJETIVOS (muchos y variados), acá algunos:
 - ✓ Describir la relación funcional entre Y y X
 - ✓ Determinar cuánta de la variación en Y puede ser explicada por la variación de X y cuánto permanece sin explicar
 - ✓ Predecir nuevos valores de Y para valores específicos de X en el dominio estudiado
 - \checkmark Relación funcional: puede ser de cualquier tipo. En RLS \rightarrow lineal

Repaso: función lineal

Es una de las funciones más simples para describir la relación entre dos variables



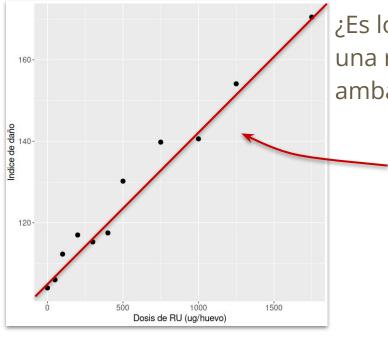


a = ordenada al origen ("intercept") (el punto donde la recta intercepta al eje Y)

b = pendiente de la recta (mide el cambio en Y por cada unidad de cambio en X)

Volviendo al ejemplo: gráfico de dispersión

| ^ | RU ÷ | DI ÷ |
|----|------|--------|
| 1 | 0 | 104.00 |
| 2 | 50 | 106.00 |
| 3 | 100 | 112.30 |
| 4 | 200 | 117.00 |
| 5 | 300 | 115.30 |
| 6 | 400 | 117.50 |
| 7 | 500 | 130.22 |
| 8 | 750 | 139.80 |
| 9 | 1000 | 140.60 |
| 10 | 1250 | 154.12 |
| 11 | 1750 | 170.50 |



¿Es lógico suponer que existe una relación lineal entre ambas variables?

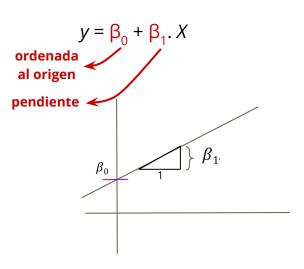
$$DI = a + b \cdot RU$$



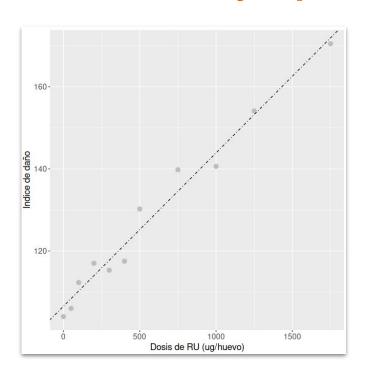
Modelo de Regresión Lineal Simple (RLS)

Sabemos que el comportamiento de la función lineal es **determinístico** ...

"El comportamiento de Y puede ser descrito por una función SIN ERROR"



Volviendo al ejemplo



- Los datos (observaciones) ¿están exactamente sobre la recta?
- Si repetimos el experimento ¿los puntos se ubicarán exactamente en el mismo lugar?
- Entonces, dado un valor de X ¿siempre se va a obtener el mismo valor de Y?

Modelo de Regresión Lineal Simple (RLS)

Modelo de Regresión Lineal Simple

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot x_i + \varepsilon_i$$

Y_i es la i-ésima observación de la <u>variable dependiente</u> Y

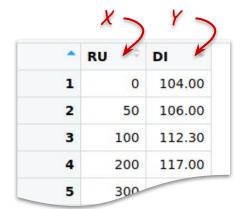
x, es el i-ésimo valor de la variable predictora X

 β_0 y β_1 **parámetros** del modelo: ordenada al origen y pendiente

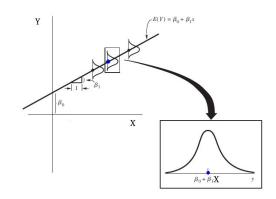
 ε_i es el error aleatorio, variación de Y no explicada por X;

Recta de regresión Poblacional

$$\beta_0 + \beta_1 \cdot x$$



Estadístico: permite la incorporación de un componente **ALEATORIO**

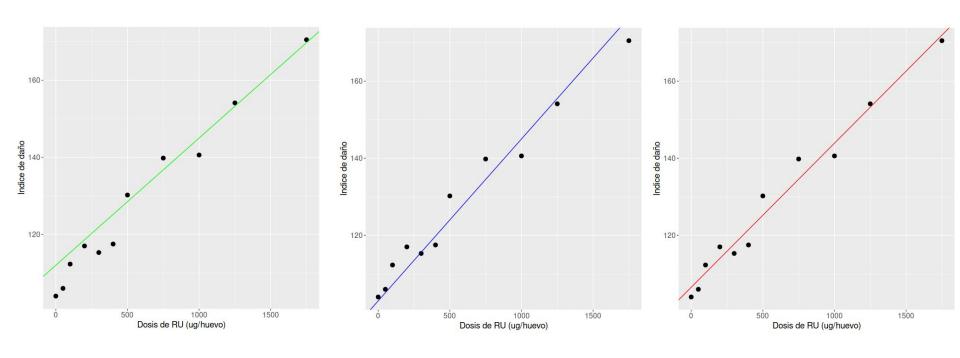


Modelo de Regresión Lineal Simple (RLS)

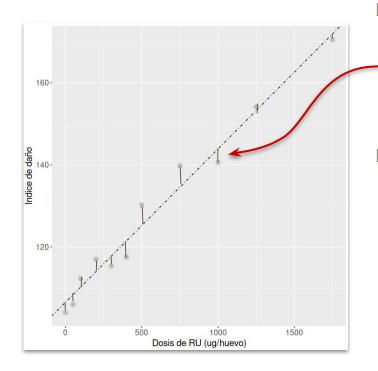
- **Parámetros** La función
- $Y = \beta_0 + \beta_1$. x no es observable directamente Se estima a través de una muestra como $Y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot x$ **Estimadores**
- β_0 y β_1 : Estimadores de los parámetros del modelo obtenidos a partir de los pares de datos
- Vamos a ESTIMAR UNA ecuación de la recta a partir de nuestros (11) datos ¿Cómo? → la que mejor se ajusta a nuestros datos

¿Cómo encontramos la recta que mejor se ajusta?





¿La verde? ¿La azul? ¿La roja?



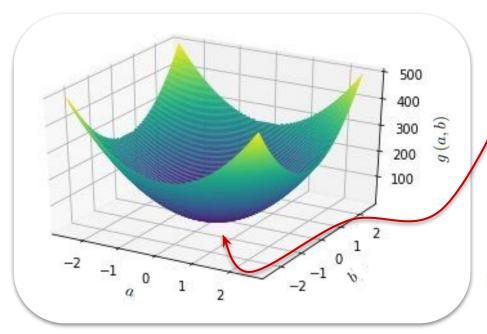
Residuo. Es la diferencia entre el valor observado (y_i) y el predicho por la recta propuesta a + b.x_i

$$- y_{i}$$
- ($a + b.x_{i}$)

La "mejor recta" será aquella que minimice la suma de los residuos al cuadrado

$$g\left(a,b\right) = \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \left(a + bX_i\right)\right)^2,$$

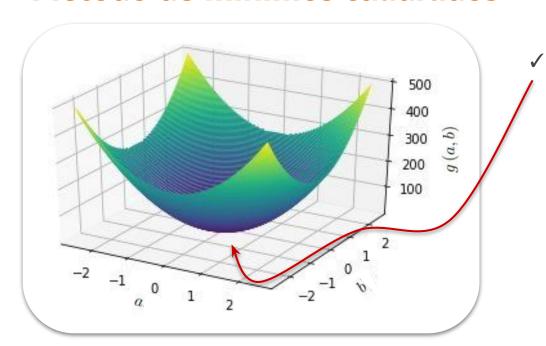
Función que mide el desajuste a la recta



- Al ser una <u>función cuadrática</u> de los parámetros, tiene un mínimo global que además es el <u>único mínimo local</u>
- ✓ Lo podemos hallar buscando donde se anula el gradiente:
 gradiente g(a,b) = o.

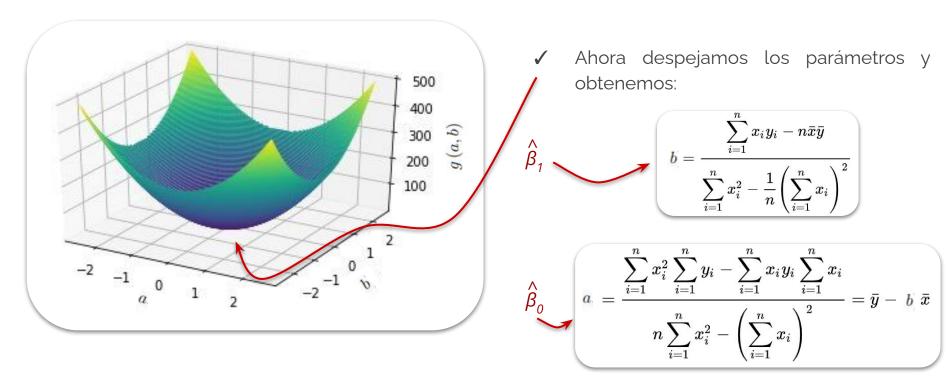
$$g(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - (a + bX_i))^2,$$

Función que mide el desajuste a la recta



Entonces, buscamos los parámetros que minimizan g(a,b) derivándola respecto de uno de los parámetros, y luego respecto del otro. Igualamos ambas ecuaciones a cero y obtenemos:

$$egin{cases} -2\sum_{i=1}^n \left(y_i-oldsymbol{a} &-oldsymbol{b} & x_i
ight) = 0 \ -2\sum_{i=1}^n \left(y_i-oldsymbol{a} &-oldsymbol{b} & x_i
ight) x_i = 0 \end{cases}$$



Misma ecuación anterior, pero reescrita

Nuestro ejemplo

Insumos

- n pares de observaciones (X_i , Y_i)
- \bar{X} = promedio de las X_i
- \overline{Y} = promedio de las Y_i

| ^ | RU | DI ÷ |
|---|-----|--------|
| 1 | 0 | 104.00 |
| 2 | 50 | 106.00 |
| 3 | 100 | 112.30 |
| 4 | 200 | 117.00 |
| 5 | 300 | |

| _ | $\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}$ | _ |
|---|---|---|
| | $\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2$ | |



$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \hat{\beta}_1 \cdot \overline{X}$$



| $\hat{\beta}_0 = Y - \hat{\beta}_1 \cdot X$ | = | |
|---|---|---|
| | | 1 |
| | | |
| | | |

Nuestro ejemplo

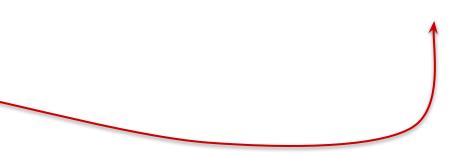
Insumos

- n pares de observaciones (X_i, Y_i)
- \bar{X} = promedio de las X_i
- \overline{Y} = promedio de las Y_i

| ^ | RU ÷ | DI ÷ |
|---|------|--------|
| 1 | 0 | 104.00 |
| 2 | 50 | 106.00 |
| 3 | 100 | 112.30 |
| 4 | 200 | 117.00 |
| 5 | 300 | |

| $^{n} \sum_{i=1}^{n} (X_{i} - \overline{X})(Y_{i} - \overline{Y})$ | | |
|--|---|-------|
| $\beta_1 = \frac{i=1}{n}$ | = | 0.037 |
| $\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2$ | | |

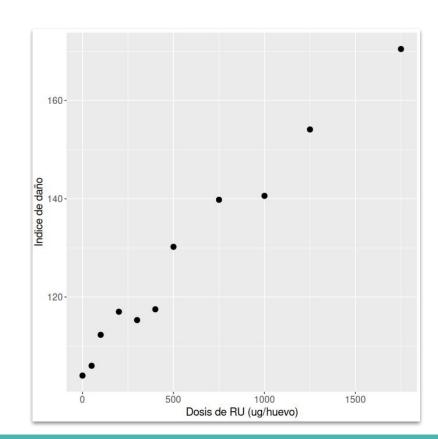
$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \hat{\beta}_1 \cdot \overline{X} = 106.5$$



La recta ajustada

$$\stackrel{\wedge}{y} = \hat{eta}_0 + \hat{eta}_1 * DosisRU$$

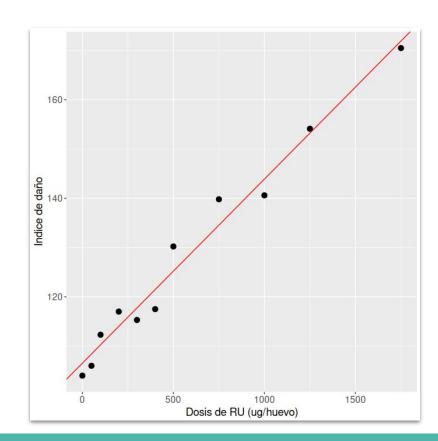
$$\hat{y}=106.5+0.037*DosisRU$$



La recta ajustada

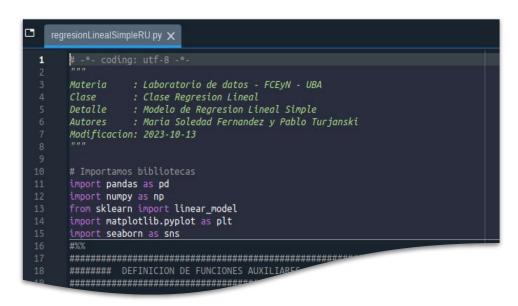
$$\stackrel{\wedge}{y} = \hat{eta}_0 + \hat{eta}_1 * DosisRU$$

$$\hat{y}=106.5+0.037*DosisRU$$



Estimación de la recta

¡Pueden usar el software / la herramienta que quieran ! (veamos con python el ejemplo subido al campus)



| ⟨□ □ | | | |
|------|------|--------|--|
| _ | RU ‡ | DI ÷ | |
| 1 | 0 | 104.00 | |
| 2 | 50 | 106.00 | |
| 3 | 100 | 112.30 | |
| 4 | 200 | 117.00 | |
| 5 | 300 | 115.30 | |
| 6 | 400 | 117.50 | |
| 7 | 500 | 130.22 | |
| 8 | 750 | 139.80 | |
| 9 | 1000 | 140.60 | |
| 10 | 1250 | 154.12 | |
| 11 | 1750 | 170.50 | |







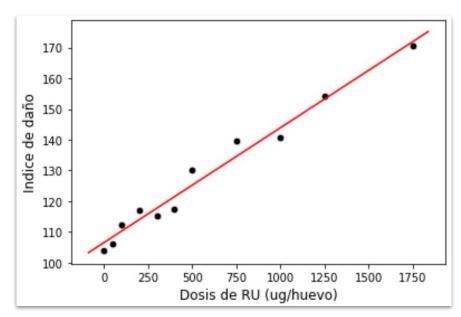


Interpretación de los coeficientes

$$\hat{y} = \hat{eta}_0 + \hat{eta}_1 * DosisRU$$

$$\stackrel{\wedge}{y} = 106.5 + 0.037*DosisRU$$

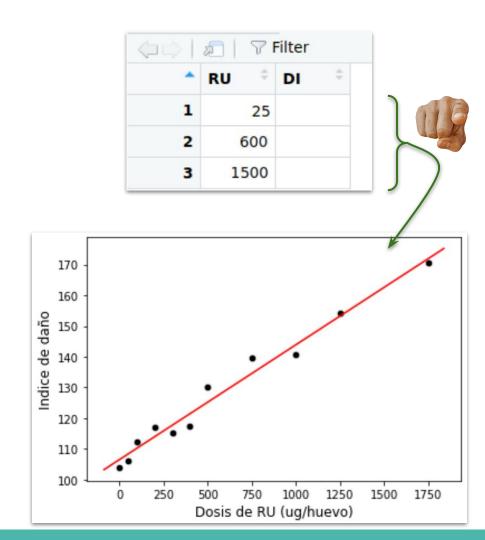
- ☐ Ordenada al origen (intercept). Es el valor medio de ID cuando la dosis de RU es 0 (sin herbicida), en este caso 106.5
- Pendiente. Por cada unidad adicional de Dosis de RU (ug/huevo), se observa un incremento medio en el índice de daño de 0.037 unidades (de ID...)



Predicción

$$\hat{y} = \hat{eta}_0 + \hat{eta}_1 * DosisRU$$

$$\hat{y} = 106.5 + 0.037*DosisRU$$



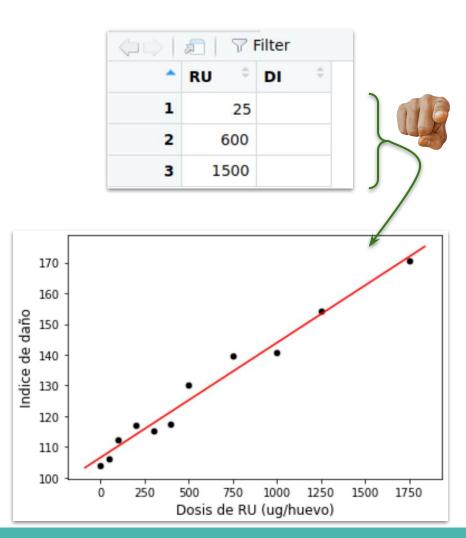
Predicción

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 * DosisRU$$

$$\hat{y}=106.5+0.037*DosisRU$$

¡Podemos también usar software! (veamos con python el ejemplo subido al campus)





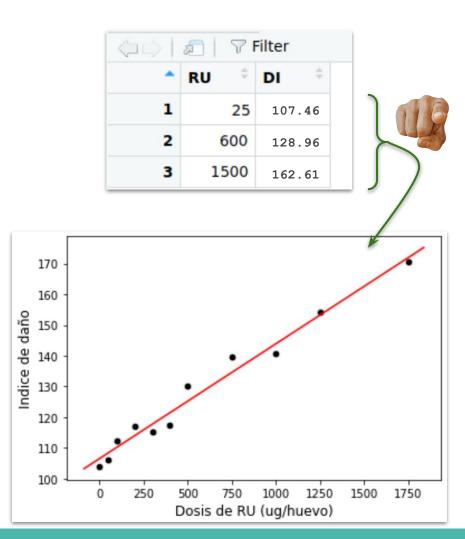
Predicción

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 * DosisRU$$

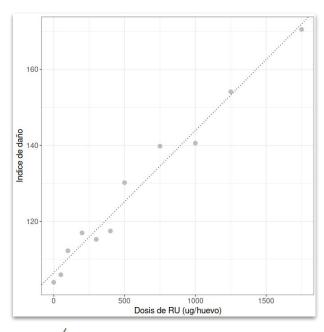
$$\stackrel{\wedge}{y}=106.5+0.037*DosisRU$$

¡Podemos también usar software! (veamos con python el ejemplo subido al campus)



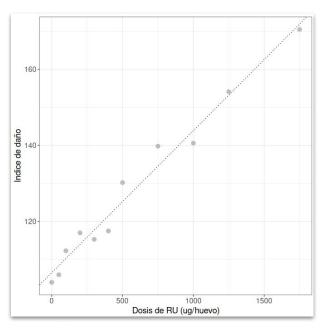


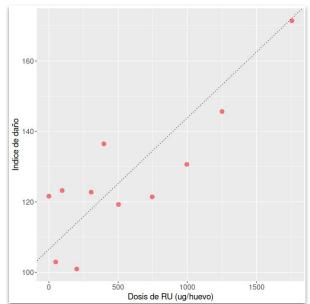
Varianza del modelo

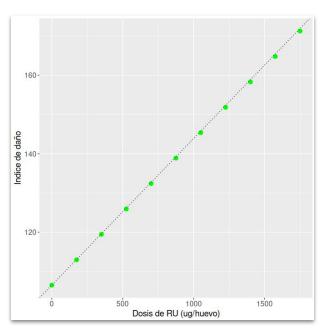




Varianza del modelo



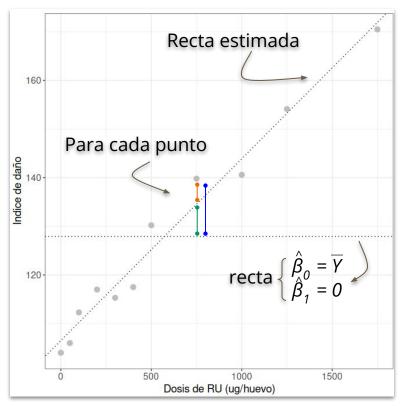




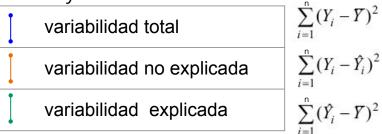
Nuestros datos

Otros escenarios

Cuantificando la variabilidad del modelo



- Si no hay relación entre la $\begin{cases} \hat{\beta}_0 = \overline{Y} \\ \hat{\beta}_1 = 0 \end{cases}$ dosis de RU y el ID entonces
- ☐ La variabilidad TOTAL del modelo puede separarse en EXPLICADA y NO EXPLICADA



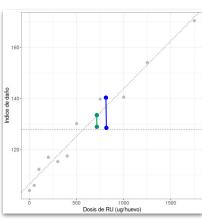
☐ Coeficiente de determinación (R²): Mide la proporción de variabilidad de la variable respuesta explicada por variaciones en x, es decir por el modelo de regresión

$$R^2 = \frac{SC \exp lic}{SCtotal}$$

Coeficiente de determinación R²

- Es una medida de la capacidad predictiva del modelo (de RLS)
- Mide la "proporción de la variabilidad en Y explicada por el modelo" (de RLS)
- No depende de las unidades de medición
- **□** Toma valores entre 0 y 1: $0 \le R^2 \le 1$
- A mayor R²: más cercanos los puntos a la recta,
- \Box A mayor R^2 , mayor "fuerza" para predecir (dentro del rango)





Coeficiente de determinación R²



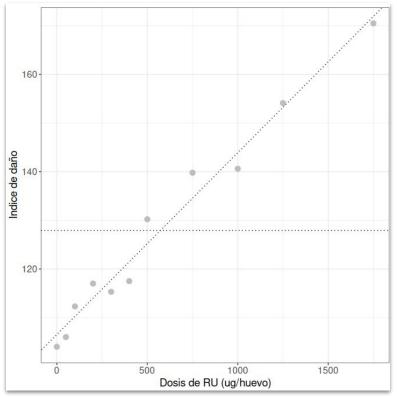


Coeficiente de determinación R²



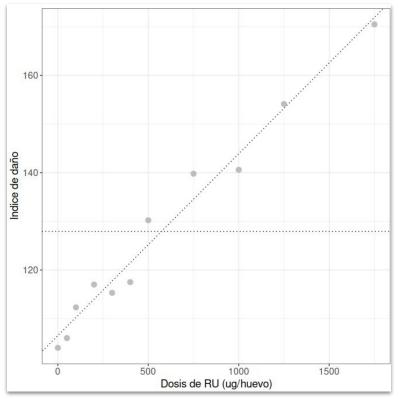
$$R^2 = 0.97$$

Resumiendo, en <u>nuestro</u> experimento



Ecuación estimada = $\stackrel{\wedge}{y} = 106.5 + 0.037 * Dosis RU$ $R^2 = 0.97$

Resumiendo, en <u>nuestro</u> experimento



Ecuación estimada =
$$\hat{y} = 106.5 + 0.037 * Dosis RU$$

R² = 0.97

Si repetimos el experimento, ¿obtendremos los mismos valores de $\overset{\wedge}{\beta}_0$ y $\overset{\wedge}{\beta}_1$? y R²? \rightarrow seguimos en el TP



TP - Regresión y variabilidad de los estimadores

Imaginemos que a cada uno de nosotros nos encargan la realización de un experimento similar al que vimos. Para ello vamos a:

- 1. Obtener una muestra. En https://msfernandez.shinyapps.io/applabodatos/ seguir las instrucciones para obtener una muestra. (*)
- 2. Realizar un gráfico de dispersión de ID en función de la concentración de RU.



3. Estimar la recta de regresión. Interpretar los coeficientes. Escribir la ecuación estimada del modelo.



4. Calcular e interpretar el coeficiente de determinación R²



5. En la planilla compartida (<u>link</u>) escribir el valor estimado para β0 , β1 , y el R², para cada una de las muestras obtenidas 🛆





TP - Regresión y variabilidad de los estimadores

Imaginemos que a cada uno de nosotros nos encargan la realización de un experimento similar al que vimos. Para ello vamos a:

- 1. Obtener una muestra. En https://msfernandez.shinyapps.io/applabodatos/ seguir las instrucciones para obtener una muestra. (*)
- 2. Realizar un gráfico de dispersión de ID en función de la concentración de RU.



3. Estimar la recta de regresión. Interpretar los coeficientes. Escribir la ecuación estimada del modelo.



- 4. Calcular e interpretar el coeficiente de determinación R²
- 5. En la planilla compartida (<u>link</u>) escribir el valor estimado para β0 , β1 , y el R², para cada una de las muestras obtenidas 🛆



- 6. Comparar los resultados obtenidos en las distintas muestras.
- 7. Construir un histograma con los valores estimados de β0 y β1.



(*) el modelo poblacional (a partir del cual se obtienen los datos) es desconocido para ustedes.

TP - Regresión y variabilidad de los estimadores

Imaginemos que a cada uno de nosotros nos encargan la realización de un experimento similar al que vimos. Para ello vamos a:

- 1. Obtener una muestra. En https://msfernandez.shinyapps.io/applabodatos/ seguir las instrucciones para obtener una muestra. (*)
- 2. Realizar un gráfico de dispersión de ID en función de la concentración de RU.



3. Estimar la recta de regresión. Interpretar los coeficientes. Escribir la ecuación estimada del modelo.



- 4. Calcular e interpretar el coeficiente de determinación R²
- 5. En la planilla compartida (<u>link</u>) escribir el valor estimado para β0 , β1 , y el R², para cada una de las muestras obtenidas 🛆



- 6. Comparar los resultados obtenidos en las distintas muestras.
- 7. Construir un histograma con los valores estimados de β0 y β1.



8. Sabiendo que los parámetros poblacionales son β 0=106.5 y β 1=0.037 relacionar los conceptos de estimadores y parámetros

(*) el modelo poblacional (a partir del cual se obtienen los datos) es desconocido para ustedes.

Ejemplo adaptado de Poletta y cols (2009)



Mutation Research/Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis Volume 672, Issue 2, 31 January 2009, Pages 95-102



Genotoxicity of the herbicide formulation Roundup® (glyphosate) in broad-snouted caiman (*Caiman latirostris*) evidenced by the Comet assay and the Micronucleus test

G.L. Poletta a b c ≥ ⋈, A. Larriera a d, E. Kleinsorge b, M.D. Mudry c

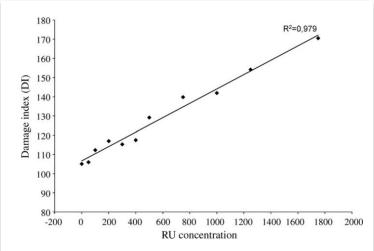


Fig. 3. RU concentration dependent effect for E_1 and E_2 DI mean data. R^2 = 0.979, p < 0.001.

https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138357180800301X

- Estudio experimental: posibilidad de establecer relación causal
- No extrapolar
- ☐ Hay que tener cuidado con observaciones atípicas e influyentes

- Estudio experimental: posibilidad de establecer relación causal
- No extrapolar
- ☐ Hay que tener cuidado con observaciones atípicas e influyentes

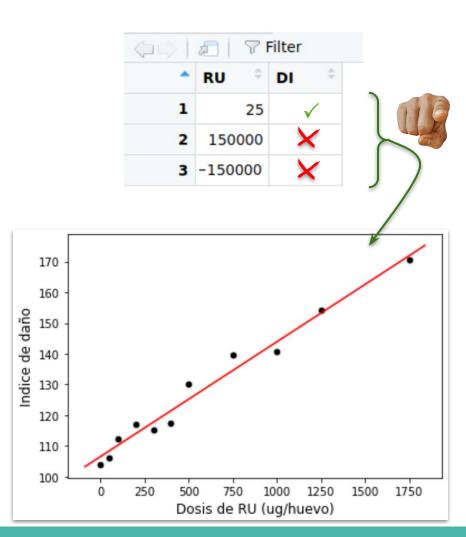
Predicción

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 * DosisRU$$

$$\stackrel{\wedge}{y}=106.5+0.037*DosisRU$$

¡Podemos también usar software! (veamos con python el ejemplo subido al campus)



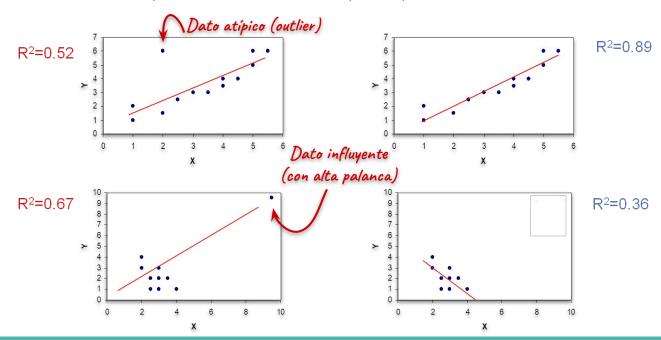


- Estudio experimental: posibilidad de establecer relación causal
- No extrapolar
- ☐ Hay que tener cuidado con observaciones atípicas e influyentes

- Estudio experimental: posibilidad de establecer relación causal
- No extrapolar
- ☐ Hay que tener cuidado con observaciones atípicas e influyentes.

Observaciones atípica e influyentes

- Atípicas (outliers en Y): Observaciones con un patrón distinto al resto de los datos, que producen un residuo grande
- Influyentes (con alta palanca): Observaciones cuyo valor de X se encuentra alejado del promedio y que tienen mucho peso en las estimaciones de los parámetros. Al ser eliminadas pueden provocan cambios sustanciales en las estimaciones



Dataset "Anscombe"

- Dataset "Anscombe" (1973, Francis Anscombe)
- Muestra la importancia de graficar para visualizar el efecto de datos atípicos y observaciones influyentes sobre las propiedades estadísticas

| | 1 | - 1 | I | | Ш | | IV |
|------|-------|------|------|------|-------|------|-------|
| X | У | X | у | Х | у | х | у |
| 10.0 | 8.04 | 10.0 | 9.14 | 10.0 | 7.46 | 8.0 | 6.58 |
| 8.0 | 6.95 | 8.0 | 8.14 | 8.0 | 6.77 | 8.0 | 5.76 |
| 13.0 | 7.58 | 13.0 | 8.74 | 13.0 | 12.74 | 8.0 | 7.71 |
| 9.0 | 8.81 | 9.0 | 8.77 | 9.0 | 7.11 | 8.0 | 8.84 |
| 11.0 | 8.33 | 11.0 | 9.26 | 11.0 | 7.81 | 8.0 | 8.47 |
| 14.0 | 9.96 | 14.0 | 8.10 | 14.0 | 8.84 | 8.0 | 7.04 |
| 6.0 | 7.24 | 6.0 | 6.13 | 6.0 | 6.08 | 8.0 | 5.25 |
| 4.0 | 4.26 | 4.0 | 3.10 | 4.0 | 5.39 | 19.0 | 12.50 |
| 12.0 | 10.84 | 12.0 | 9.13 | 12.0 | 8.15 | 8.0 | 5.56 |
| 7.0 | 4.82 | 7.0 | 7.26 | 7.0 | 6.42 | 8.0 | 7.91 |
| 5.0 | 5.68 | 5.0 | 4.74 | 5.0 | 5.73 | 8.0 | 6.89 |



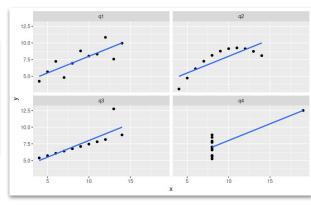
Para cada dataset:

- 1. Generar el modelo de RLS y reportar
 - a. intercept
 - b. pendiente
 - c. R2
- Realizar el gráfico de dispersión y la recta estimada por el RLS

Dataset "Anscombe"

| 1 | | II | | Ш | | IV | |
|------|-------|------|------|------|-------|------|-------|
| X | у | Х | у | X | у | Х | у |
| 10.0 | 8.04 | 10.0 | 9.14 | 10.0 | 7.46 | 8.0 | 6.58 |
| 8.0 | 6.95 | 8.0 | 8.14 | 8.0 | 6.77 | 8.0 | 5.76 |
| 13.0 | 7.58 | 13.0 | 8.74 | 13.0 | 12.74 | 8.0 | 7.71 |
| 9.0 | 8.81 | 9.0 | 8.77 | 9.0 | 7.11 | 8.0 | 8.84 |
| 11.0 | 8.33 | 11.0 | 9.26 | 11.0 | 7.81 | 8.0 | 8.47 |
| 14.0 | 9.96 | 14.0 | 8.10 | 14.0 | 8.84 | 8.0 | 7.04 |
| 6.0 | 7.24 | 6.0 | 6.13 | 6.0 | 6.08 | 8.0 | 5.25 |
| 4.0 | 4.26 | 4.0 | 3.10 | 4.0 | 5.39 | 19.0 | 12.50 |
| 12.0 | 10.84 | 12.0 | 9.13 | 12.0 | 8.15 | 8.0 | 5.56 |
| 7.0 | 4.82 | 7.0 | 7.26 | 7.0 | 6.42 | 8.0 | 7.91 |
| 5.0 | 5.68 | 5.0 | 4.74 | 5.0 | 5.73 | 8.0 | 6.89 |

| - | intercept | pendiente | R2 ÷ |
|----|-----------|-----------|-----------|
| x1 | 3.000091 | 0.5000909 | 0.6665425 |
| x2 | 3.000909 | 0.5000000 | 0.6662420 |
| хЗ | 3.002455 | 0.4997273 | 0.6663240 |
| x4 | 3.001727 | 0.4999091 | 0.6667073 |





Vimos la punta del iceberg de RLS.

Estadística. Permite sacar conclusiones sobre la población (parámetros del modelo) a partir de una muestra (estimadores) cuantificando el grado de incertidumbre asociado

SUPUESTOS acerca de la relación entre las variables, sobre los "errores" del modelo, etc. → validación del modelo, análisis de supuestos, etc.



- 1. Presentamos el modelo estadístico de Regresión Lineal Simple (RLS)
- 2. Vimos potenciales aplicaciones
- 3. RLS nos permite predecir e interpretar los resultados de un modelo de RLS con fines explicativos

4. Observamos la naturaleza aleatoria de los estimadores de los parámetros del modelo