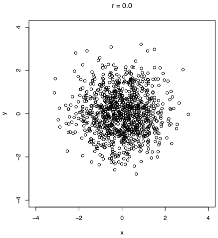
MAT-032: Correlación y Regresión lineal

Felipe Osorio

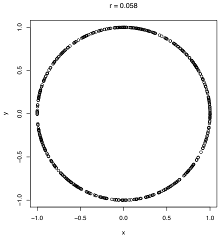
fosorios.mat.utfsm.cl

Departamento de Matemática, UTFSM

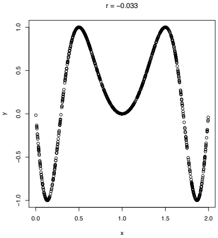
Correlación: Midiendo asociación lineal



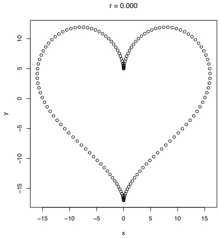
(a) $r = 0.000$



(b) $r = 0.058$

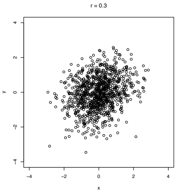


(c) $r = -0.033$

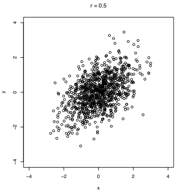


(d) $r = 0.000$

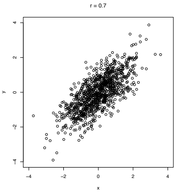
Correlación: Midiendo asociación lineal



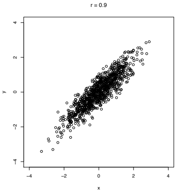
(a) $r = 0.30$



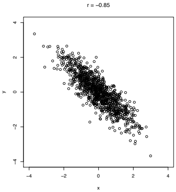
(b) $r = 0.50$



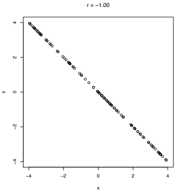
(c) $r = 0.70$



(d) $r = 0.90$



(e) $r = -0.85$



(f) $r = -1.00$

Definición 1 (Covarianza):

Para el conjunto $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, se define la covarianza como una medida de variabilidad conjunta de dos variables cuantitativas, como:

$$\mathsf{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y}).$$

Observación:

Evidentemente, $\mathsf{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \mathsf{var}(\boldsymbol{x}) = s_x^2$.

Propiedades de la covarianza

Propiedades:

(a)

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y}.$$

(b)

$$\mathsf{cov}(a\boldsymbol{x} + b, c\boldsymbol{y} + d) = ac\,\mathsf{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}).$$

EX UMBRA IN SOLEM

Definición 2 (Correlación):

La correlación entre $\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top$ e $\boldsymbol{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ es la covarianza de sus versiones estandarizadas. Es decir,

$$
\begin{aligned}
\operatorname{cor}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \Big(\frac{x_i - \overline{x}}{s_x}\Big)\Big(\frac{y_i - \overline{y}}{s_y}\Big) \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2}} \\
&= \frac{\operatorname{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})}{\sqrt{\operatorname{var}(\boldsymbol{x}) \operatorname{var}(\boldsymbol{y})}}.
\end{aligned}
$$

Observación:

$\operatorname{cor}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ es una medida adimensional.

Propiedades de la correlación

Propiedades:

(a)
$$\mathsf{cor}(a\boldsymbol{x} + b, c\boldsymbol{y} + d) = \pm\,\mathsf{cor}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}).$$

(b)
$$\mathsf{var}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = \mathsf{var}(\boldsymbol{x}) + \mathsf{var}(\boldsymbol{y}) + 2\,\mathsf{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}).$$

(c)
$$\{\mathsf{cor}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\}^2 \leq 1.$$

Observación:

- Evidentemente, $-1 \leq \mathsf{cor}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \leq 1$.
- Cuando $\mathsf{cor}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 0$, diremos que $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$ son no correlacionados.

Definición 3 (Coeficiente de correlación de Spearman):

Suponga los datos pareados $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$. Sea R_i, S_i los rangos de x_i e y_i, respectivamente $(i = 1, \ldots, n)$. Entonces el coeficiente de correlación de Spearman es dado por

$$r_{\mathsf{S}} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})(S_i - \overline{S})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(R_i - \overline{R})^2 \sum_{i=1}^{n}(S_i - \overline{S})^2}}.$$

Observación:

Sea

$$D = \sum_{i=1}^{n}(R_i - S_i)^2,$$

y suponga que no existen empates entre los x's e y's, entonces podemos escribir

$$r_{\mathsf{S}} = 1 - \frac{6D}{n^2 - 1}.$$

EX UMBRA IN SOLEM

Ejemplo: Distorsiones de Lenna[1]

(a) $r = 1.000$

(b) $r = 0.903$

(c) $r = 0.991$

(d) $r = 0.915$

(e) $r = 0.983$

(f) $r = 0.799$

[1] (a) Original, (b) sal y pimienta, (c) filtro mediana, (d) ruido speckle, (e) filtro Lee, (f) imagen saturada.

Ejemplo: Distorsiones de Lenna

```
> library(SpatialPack)
# https://github.com/faosorios/SSIM/blob/master/data/lena.rda
> load("lena.rda") # carga datos de Lena

# aplica distorsiones y filtros
> lena.05 <- clipping(lena, low = 0.5) # saturación
> lena.sp <- imnoise(lena, type = "saltnpepper")
> lena.speckle <- imnoise(lena, type = "speckle")
> lena.med <- denoise(lena.sp, type = "median") # filtro mediana
> lena.lee <- denoise(lena.speckle, type = "Lee") # filtro de Lee

# calculando correlaciones
> x <- as.vector(lena) # 262144 observaciones
> cor(x, x)
[1] 1
> cor(x, as.vector(lena.05))
[1] 0.7997093
> cor(x, as.vector(lena.sp))
[1] 0.9028631
> cor(x, as.vector(lena.med))
[1] 0.9907281
> cor(x, as.vector(lena.speckle))
[1] 0.9154696
> cor(x, as.vector(lena.lee))
[1] 0.9829129
```

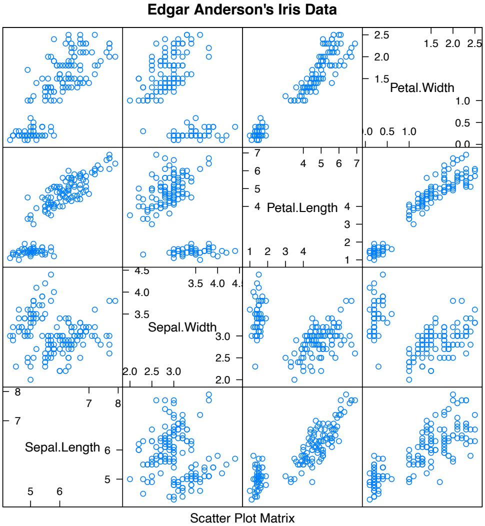
Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)

(a) setosa

(b) versicolor

(c) virginica

Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)



Deseamos estudiar p variables (características) de interés asociadas a una muestra aleatoria $\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n$ donde cada $\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^\top$ es un vector p-dimensional.

Podemos disponer la información en una matriz

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top \\ \boldsymbol{x}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^\top \end{pmatrix}.$$

Análogamente a la media y varianza muestrales $\overline{x}$ y s^2, podemos definir sus contrapartes multivariadas como:

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i,$$

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^\top.$$

que representan el vector de medias y la matriz de covarianza, respectivamente.

Observación:

En este caso, tenemos $\boldsymbol{S} = (s_{ij})$, donde

$$s_{ij} = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}(x_{ki} - \overline{x}_i)(x_{kj} - \overline{x}_j),$$

con $\overline{x}_i = \big(\sum_{k=1}^{n} x_{ki}\big)/n$.

Los elementos anteriores permiten definir la matriz de correlación entre las p variables, como:

$$\boldsymbol{R} = (r_{ij})$$

donde

$$r_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n}(x_{ki} - \overline{x}_i)(x_{kj} - \overline{x}_j)}{\sqrt{\sum_{k=1}^{n}(x_{ki} - \overline{x}_i)^2 \sum_{k=1}^{n}(x_{kj} - \overline{x}_j)^2}} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}s_{jj}}}.$$

Observación:

Defina $\boldsymbol{D} = \operatorname{diag}(s_{11}, s_{22}, \dots, s_{pp})$, de este modo, podemos definir

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}^{-1/2}.$$

Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)

Datos observados:

Mediciones (cm) del largo y ancho de los sépalos y el largo y ancho de pétalos para 50 flores desde 3 especies de Iris (setosa, virginica y versicolor).

Base de datos:

```
# Datos de flores Iris
> iris
    Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width   Species
1            5.1         3.5          1.4         0.2    setosa
2            4.9         3.0          1.4         0.2    setosa
3            4.7         3.2          1.3         0.2    setosa
4            4.6         3.1          1.5         0.2    setosa
5            5.0         3.6          1.4         0.2    setosa
...

149          6.2         3.4          5.4         2.3 virginica
150          5.9         3.0          5.1         1.8 virginica
```

Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)

Matriz de Correlación ($\boldsymbol{R}$):

	Largo Sépalo	Ancho Sépalo	Largo Pétalo	Ancho Pétalo
Largo Sépalo	1.000	-0.118	0.872	0.818
Ancho Sépalo	-0.118	1.000	-0.428	-0.366
Largo Pétalo	0.872	-0.428	1.000	0.963
Ancho Pétalo	0.818	-0.366	0.963	1.000

Cálculo en **R**:

```
> cor(iris[,1:4])
             Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length       1.0000     -0.1176       0.8718      0.8179
Sepal.Width       -0.1176      1.0000      -0.4284     -0.3661
Petal.Length       0.8718     -0.4284       1.0000      0.9629
Petal.Width        0.8179     -0.3661       0.9629      1.0000
```

Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)

Se obtuvo además el vector de medias ($\overline{\boldsymbol{x}}$) y la matriz de Covarianza ($\boldsymbol{S}$):[2]

```
> z <- cov.wt(iris[,1:4])
> z
$cov
             Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length    0.6856935  -0.0424340    1.2743154   0.5162707
Sepal.Width    -0.0424340   0.1899794   -0.3296564  -0.1216394
Petal.Length    1.2743154  -0.3296564    3.1162779   1.2956094
Petal.Width     0.5162707  -0.1216394    1.2956094   0.5810063

$center
Sepal.Length  Sepal.Width Petal.Length  Petal.Width
    5.843333     3.057333     3.758000     1.199333

$n.obs
[1] 150
```

[2] Análogamente podemos usar `cov(iris[,1:4])`.

Objetivo del análisis de regresión

Estudiar una variable de respuesta, y [asuminda continua] como función de una variable explicativa o regresor, x [puede ser discreta y/o continua].

Entrada $\rightarrow$ **Proceso** $\rightarrow$ **Salida**

En ocasiones la relación funcional es conocida salvo algunos coeficientes (parámetros).

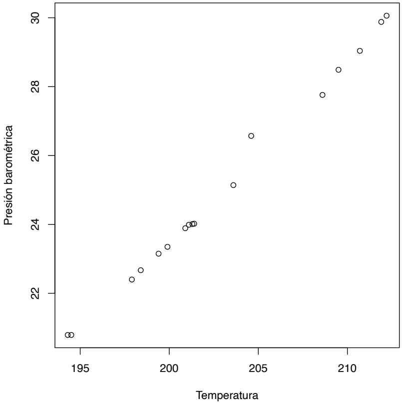
Es decir, la relación es gobernada por un proceso físico o por leyes bien aceptadas

$$y \approx f(x; \boldsymbol{\theta}),$$

en cuyo caso, el interés recae en estimar el vector de parámetros $\boldsymbol{\theta} = (\alpha, \beta)^\top$.

Datos de Forbes

Presión barométrica en pulgadas de mercurio y temperatura de ebullición del agua en grados Fahrenheit para 17 diferentes altitudes.



Datos de Forbes

Para describir la relación entre la temperatura y la media de la presión barométrica, podemos considerar

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i, \qquad i = 1, \dots, n,$$

El conjunto de datos consiste del vector de respuestas.

$$\boldsymbol{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top,$$

y una matriz de diseño $n \times 2$

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}.$$

Deseamos hallar α y β tal que produzcan el mejor ajuste a los datos[3]. En este curso usaremos el método de mínimos cuadrados ordinarios, dado por

$$\min_{\theta} S(\boldsymbol{\theta}),$$

con $\boldsymbol{\theta} = (\alpha, \beta)^\top$ y

$$S(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2$$

Observación:

La función $S(\boldsymbol{\theta})$ es conocida como suma de cuadrados de los errores.

[3] Es decir, deseamos obtener estimadores para α y β

Usando el método de minimos cuadrados obtenemos:

$$\widehat{\alpha} = \overline{y} - \widehat{\beta}\overline{x},$$

$$\widehat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2} = \frac{\mathsf{cov}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})}{\mathsf{var}(\boldsymbol{x})}.$$

La recta de regresión es dada por:

$$\widehat{y}_i = \widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_i, \qquad i = 1, \dots, n,$$

y llamamos a $\widehat{y}_i$ es valor predicho (o valor ajustado). Además,

$$e_i = y_i - \widehat{y}_i = y_i - \widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_i, \qquad i = 1, \dots, n,$$

es conocido como el i-ésimo residuo.

Una medida de variabilidad es dada por:

$$s^2 = \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \widehat{\alpha} - \widehat{\beta}x_i)^2 = \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \widehat{y}_i)^2.$$

Mientras que

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\widehat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2},$$

se denomina coeficiente de determinación.[4]

Interpretación:

R^2 es la varianza de los datos que puede ser explicada por el modelo.

[4]permite medir la calidad (bondad) del ajuste

Es posible notar que (cuando el modelo tiene intercepto):

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{s^2_{\textsf{DATOS}}},$$

con

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \widehat{y}_i)^2, \qquad s^2_{\textsf{DATOS}} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2.$$

Interpretación:

En efecto, $0 \leq R^2 \leq 1$ permite medir la calidad (o bondad) del ajuste.

Datos de Forbes

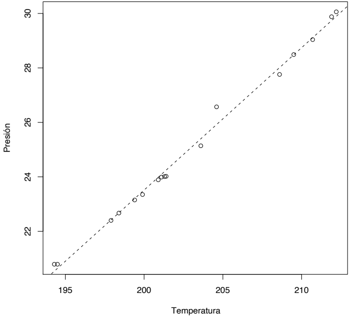
```
> library(MASS)
> data(forbes) # disponibiliza los datos en la sesión

> forbes
      bp  pres
1  194.5 20.79
2  194.3 20.79
3  197.9 22.40
4  198.4 22.67
5  199.4 23.15
6  199.9 23.35
7  200.9 23.89
8  201.1 23.99
9  201.4 24.02
10 201.3 24.01
11 203.6 25.14
12 204.6 26.57
13 209.5 28.49
14 208.6 27.76
15 210.7 29.04
16 211.9 29.88
17 212.2 30.06
```

```
# ajuste de un modelo de regresión
> fm <- lm(pres ~ bp, data = forbes)

# salida:
> fm

Call:
lm(formula = pres ~ bp, data = forbes)

Coefficients:
(Intercept)           bp
   -81.0637       0.5229

# residuos y valores ajustados
> res <- residuals(fm)
> fit <- fitted(fm)

# otra forma de calcular R^2
> cor(fit, forbes$pres)^2
[1] 0.9944282
```

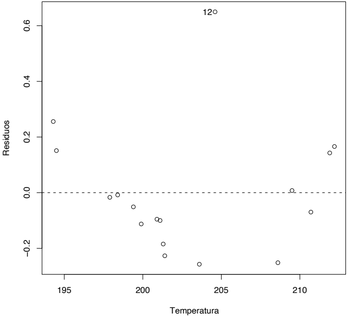
Datos de Forbes

```
# salida un poco más extensa
> summary(fm)

Call:
lm(formula = pres ~ bp, data = forbes)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.25717 -0.11246 -0.05102  0.14283  0.64994

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -81.06373    2.05182  -39.51   <2e-16 ***
bp            0.52289    0.01011   51.74   <2e-16 ***

Residual standard error: 0.2328 on 15 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9944,    Adjusted R-squared:  0.9941
F-statistic:  2677 on 1 and 15 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Datos de Forbes



(a) recta ajustada



(b) residuos vs. ajuste

Ahora consideramos el modelo

$$100 \times \log_{10}(\text{Presión}_i) = \alpha + \beta\,\text{Temperatura}_i + \epsilon_i,$$

para $i = 1, \dots, n$.

Se obtuvo (usando función `lm` de **R**)

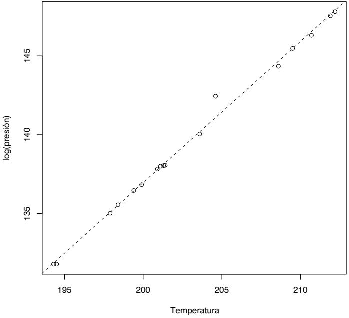
$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (-42.1378, 0.8955)^\top \quad \text{y} \quad s^2 = 0.1438$$

Además, $R^2 = 0.9950$.

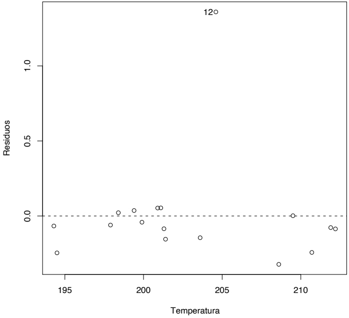
```
# modelo con datos transformados
> f1 <- lm(100 * log10(pres) ~ bp, data = forbes)

> summary(f1)

Call:
lm(formula = 100 * log10(pres) ~ bp, data = forbes)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.31974 -0.14707 -0.06890  0.01877  1.35994

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -42.16418    3.34136  -12.62 2.17e-09 ***
bp            0.89562    0.01646   54.42  < 2e-16 ***

Residual standard error: 0.3792 on 15 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.995,     Adjusted R-squared:  0.9946
F-statistic:  2962 on 1 and 15 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Datos de Forbes

Recta de regresión y gráfico de residuos para los datos de Forbes[5].



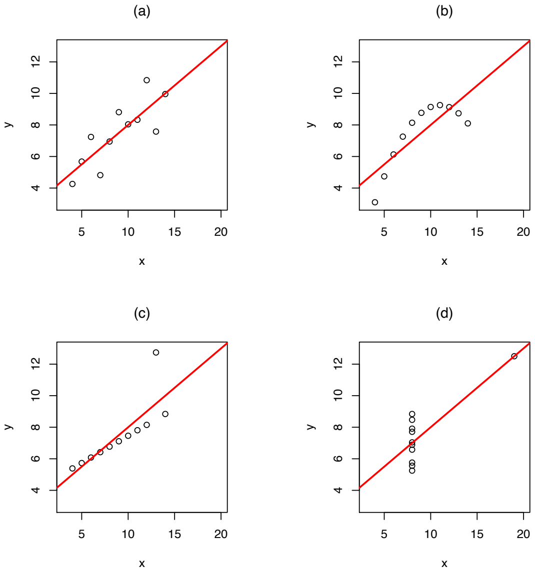
(a) recta ajustada



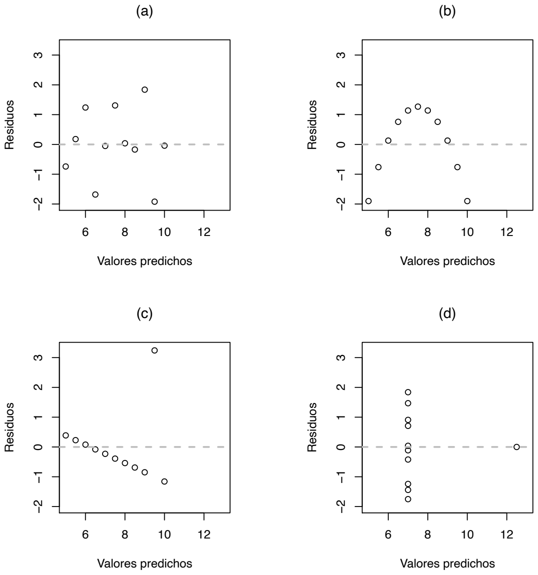
(b) residuos vs. ajuste

[5] datos transformados

Cuarteto de regresiones “idénticas” de Anscombe (1973)



Cuarteto de regresiones “idénticas” de Anscombe (1973)



Observaciones:

- Para el cuarteto de regresiones de Anscombe se obtiene (para todos los modelos):

  $\widehat{\alpha} = 3.001, \quad \widehat{\beta} = 0.500, \quad s^2 = 1.528, \quad R^2 = 0.666, \quad F = 17.97, \quad p = 0.002$

  confiar solamente en medidas globales puede ser engañoso.

- En efecto, note que

$$\sum_{i=1}^{n} e_i = 0, \qquad \sum_{i=1}^{n} e_i \widehat{y}_i = 0,$$

  de modo que el gráfico de dispersión de residuos vs. valores predichos no debería presentar algún comportamiento sistemático.

- Es recomendable realizar un análisis de residuos o de diagnóstico.[6]

[6] Cook, R.D., Weisberg, S. (1982). *Residuals and Influence in Regression*, Chapman and Hall, New York.