Regresión

Lección 15

Dr. Pablo Alvarado Moya

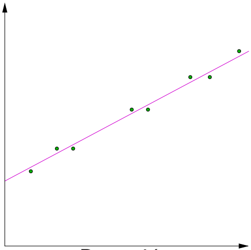
CE3102 Análisis Numérico para Ingeniería
Área de Ingeniería en Computadores
Tecnológico de Costa Rica

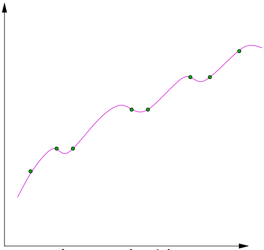
II Semestre 2017

Contenido

Regresión

- **Interpolación** encuentra función que "pasa" por un número dado de puntos
- **Regresión** ajusta una función o modelo previamente conocido a un número de datos.
- Idea básica es minimizar distancia entre los puntos y el modelo.


Regresión


Interpolación

Regresión Lineal

- Sea una línea recta con modelo

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + e_i$$

con e_i el error entre el modelo y la i-ésima observación.

- Se ajustará dicho modelo al conjunto de observaciones (x_i, y_i) $i = 1 \ldots n$
- Así, se minimizará el error por medio de **mínimos cuadrados**

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (a_0 + a_1 x_i)\right)^2$$

- Este criterio es derivable, lo que permite su minimización analítica.

Ajuste de línea por mínimos cuadráticos (1)

- Derivando el error con respecto a a_0 e igualando a cero:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} a_0 - \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i = 0$$

$$n a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_1 = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

Ajuste de línea por mínimos cuadráticos (2)

- Derivando el error con respecto a a_1 e igualando a cero:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i)x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \sum_{i=1}^{n} a_0 x_i - \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^2 = 0$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_1^2\right) a_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

Ajuste de línea por mínimos cuadráticos (3)

- Las ecuaciones anteriores reciben el nombre de **ecuaciones normales**:

$$na_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_1 = \sum_{i=1}^{n} y_i$$
$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

o en forma matricial

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste de línea por mínimos cuadráticos (4)

- El sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas se resuelve con:

$$a_1 = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

$$a_0 = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} y_i - a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i\right)$$

que minimiza la varianza del error.

Medición del error (1)

- El error estándar de la estimación de línea de regresión es:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} \qquad S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 \qquad e_i = (y_i - (a_0 + a_1 x_i))$$

que cuantifica la dispersión de los datos alrededor de la línea de regresión.

Medición del error (2)

- El coeficiente de determinación r^2 se define como

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

donde S_t es la varianza los datos

$$S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2 \qquad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum y_i$$

y S_r la suma de cuadrados de resíduos descrita anteriormente.

- $r = \sqrt{r^2}$ es el coeficiente de correlación
- r^2 cuantifica la mejora o reducción del error entre describir los datos por su media y utilizar la línea de regresión.

Linealización de relaciones no lineales

- Método anterior asume dependencia lineal entre las variables independientes x_i y el valor de las funciones $f(x_i)$
- Si relación lineal no describe correctamente la relación, hay dos opciones:
  1. Regresión con otros modelos (p.ej. regresión polinomial)
  2. Transformar los datos para aplicar regresión lineal

Linealización de exponencial

- Si los datos siguen la tendencia exponencial

$$y = \alpha e^{\beta x}$$

  se aplica el logaritmo natural a ambos lados para obtener

$$\ln y = \ln \alpha + \beta x$$

- La gráfica de $\ln y$ contra x es una línea recta de pendiende β y corte de ordenadas en $\ln \alpha$.
- Ejemplos: crecimiento poblacional, decaimiento radiactivo

Linealización de ecuación de potencias

- Si los datos siguen la tendencia de potencias

$$y = \alpha x^{\beta}$$

se aplica el logaritmo natural a ambos lados para obtener

$$\ln y = \ln \alpha + \beta \ln x$$

- La gráfica de $\ln y$ contra $\ln x$ es una línea recta de pendiende β y corte de ordenadas en $\ln \alpha$.

Linealización de ecuación de razón de crecimiento

- Si los datos siguen la tendencia de razón de crecimiento

$$y = \alpha \frac{x}{\beta + x}$$

se invierte a ambos lados

$$\frac{1}{y} = \frac{\beta}{\alpha}\frac{1}{x} + \frac{1}{\alpha}$$

- La gráfica de $1/y$ contra $1/x$ es una línea recta de pendiende β/α y corte de ordenadas en $1/\alpha$.

Suposiciones sobre regresión lineal

- Los valores x no son aleatorios y se conocen sin error
- El error en la medición de y tiene distribución normal y es independiente de x.
- En aplicaciones prácticas hay otros aspectos a considerar en la regresión lineal, relacionados con los *outliers* (valores atípicos)

Regresión curvilínea

- Anteriormente se ajustaron datos no lineales por medio de su transformación
- Otra alternativa es ajustar polinomios de grado conocido a los datos
- Procedimiento de mínimos cuadrados se extiende a polinomios de grado superior a 1.

Ajuste cuadrático (1)

- Asúmase que se va a ajustar un polinomio de segundo grado

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$$

- El error es

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2$$

- ¿Cuáles son las derivadas respecto a a_0, a_1 y a_2?

Ajuste cuadrático (2)

- Derivando con respecto a cada coeficiente

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}x_i(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum_{i=1}^{n}x_i^2(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)$$

Planteamiento de sistema de ecuaciones

- Igualando las derivadas a cero y reagrupando se obtiene

$$\begin{aligned} na_0 + \left(\sum x_i\right)a_1 + \left(\sum x_i^2\right)a_2 &= \sum y_i \\ \left(\sum x_i\right)a_0 + \left(\sum x_i^2\right)a_1 + \left(\sum x_i^3\right)a_2 &= \sum x_i y_i \\ \left(\sum x_i^2\right)a_0 + \left(\sum x_i^3\right)a_1 + \left(\sum x_i^4\right)a_2 &= \sum x_i^2 y_i \end{aligned}$$

  que es un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas de la forma $\mathbf{A}\underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{b}}$.

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

- La matriz $\mathbf{A}$ se denomina **matriz normal**

Generalización

- Para hacer la regresión a un polinomio de orden m se planteará un sistema de $m+1$ incógnitas con $m+1$ ecuaciones.
- La sistema de ecuaciones normales tiene la forma

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^m \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{m+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \cdots & \sum x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \sum x_i^{m+2} & \cdots & \sum x_i^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^m y_i \end{bmatrix}$$

- Note que la matriz es simétrica, por lo que se puede utilizar la descomposición de Cholesky para solucionar el sistema.
- El sistema es **mal** condicionado, por diferencias de valores debido a potencias, particularmente si $m \gg 1$

Cálculo del error

- En el caso de polinomios de orden m y n datos, la desviación estándar es

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-(m+1)}}$$

- El coeficiente de determinación r^2 del mismo modo que en el caso de regresión lineal:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

donde S_t es la varianza los datos

$$S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2 \qquad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum y_i$$

y S_r la suma de cuadrados de resíduos descrita anteriormente.

Algoritmo en versión ingenua

```
// int n          : número de datos
// vector<T> x: datos x
// vector<T> y: datos y
// matrix<T> a: matriz normal aumentada
T sum();
for (int i=0;i<=orden;++i) {
  for (int j=0;j<=i;++j) {
    int k=i+j;
    sum = 0;
    for (l=0;l<n;++l) {
      sum+=pow(x[l],k);
    }
    a[i][j] = a[j][i] = sum;
  }
  sum=T(0);
  for (int l=0;l<n;++l) {
    sum+= y[l] * pow(x[l],i);
  }
  a[i][orden+1] = sum;
}
```

Nuevo algoritmo

Nótese que las anti-diagonales comparten el mismo valor $\sum x_i^n$ con $n = 0 \ldots 2m$, que pueden precalcularse.

```
// int n         : número de datos
// vector<T> x: datos x
// vector<T> y: datos y
// matrix<T> a: matriz normal aumentada
T sum();
vector<T> acc(2*n,0);
for (int l=0;l<n;++l) {
  tmp=1;
  for (int o=1;o<=2*n;++o) {
    tmp*=x[l];
    acc[o]+=tmp;
  }
}
acc[0]=n;
for (int i=0;i<n;++i) {
  a[i][i]=acc[i+i];
  for (int j=i+1;i<n;++j) {
    a[j][i]=a[i][j]=acc[i+j];
  }
}
```

Regresión lineal múltiple (1)

- Conceptos anteriores se generalizan para ajustar los parámetros de un **plano** parametrizado con a_0, a_1 y a_2, con variables independientes x_1, x_2

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + e$$

- En este caso el error a minimizar es

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_{1i} - a_2 x_{2i})^2$$

Regresión lineal múltiple (2)

- Derivando e igualando a cero las derivadas se obtiene el sistema

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} \\ \sum x_{1i} & \sum x_{1i}^2 & \sum x_{1i}x_{2i} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{1i}x_{2i} & \sum x_{2i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1i}y_i \\ \sum x_{2i}y_i \end{bmatrix}$$

- Concepto es fácilmente extendible a hiperplanos en espacios m-dimensionales:

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + \cdots a_mx_m + e$$

Algoritmo de regresión *m*-dimensional

```
// entrada: matrix<T> x: con primera fila y columna nulas
//                       (indices 0).
//                       Cada fila es un vector de entrada
//          vector<T> y: valores y para cada vector de entrada
//          int n: número de datos
//          int orden: dimensión del espacio del dominio
// salida:  matrix<T> a: matriz de sistema normal
T sum(0);
for (int i=1;i<=orden+1;++i) {
  for (int j=1;j<=i;++j) {
    for (int l=1;l<=n;++l) {
      sum += x[i-1][l]*x[j-1][l];
    }
    a[i][j] = sum;
    a[j][i] = sum;
  }
  sum = T(0);
  for (l=1;l<=n;++l) {
    sum += y[l]*x[i-1][l];
  }
  a[i][orden+2] = sum;
}
```

Linealización en múltiples dimensiones

Del mismo modo que se linealizaron relaciones para usar regresión lineal, para relaciones de la forma:

$$y = a_0 x_1^{a_1} x_2^{a_2} \cdots x_m^{a_m}$$

se aplican logaritmos a ambos lados para obtener

$$\ln y = \ln a_0 + a_1 \ln x_1 + a_2 \ln x_2 + \cdots + a_m \ln x_m$$

que se resuelve entonces como problema de regresión lineal múltiple

Resumen

Este documento ha sido elaborado con software libre incluyendo LaTeX, Beamer, GNUPlot, GNU/Octave, XFig, Inkscape, LTI-Lib-2, GNU-Make y Subversion en GNU/Linux