Statistica I

Unità K: regressione lineare semplice

Tommaso Rigon

Università Milano-Bicocca

Anno Accademico 2020-2021

Unità K

Argomenti affrontati

- Modello di regressione lineare semplice
- Minimi quadrati
- Media e varianza residua, coefficiente di determinazione (R²)

Riferimenti al libro di testo

- §22.1 §22.4
- §22.8
- Nota. Alcuni paragrafi richiedono la conoscenza di nozioni di calcolo delle probabilità.
 Tali passaggi non sono materia d'esame.

Descrizione del problema

- Per n = 31 alberi di ciliegio nero sono disponibili le misure del diametro del tronco (misurato a circa 1m dal suolo) ed il volume ricavato dall'albero dopo l'abbattimento.
- Si vogliono utilizzare i dati per ottenere un'equazione che permetta di prevedere il volume, ottenibile solo dopo l'abbattimento dell'albero, avendo a disposizione il diametro, che è invece facilmente misurabile.
- lacksquare In altri termini, stiamo cercando una qualche funzione $f(\cdot)$ tale che

(volume)
$$\approx f$$
 (diametro).

- Una simile equazione ha differenti utilizzi.
- Ad esempio, può essere utilizzata per decidere quanti e quali alberi tagliare per ricavare un certo ammontare di legno, oppure per determinare il "prezzo" di un bosco.

I dati grezzi

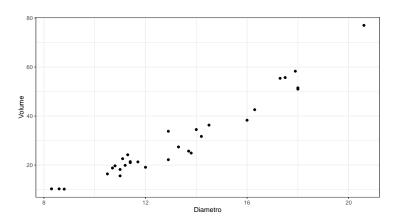
Diametro

```
[1] 8.3 8.6 8.8 10.5 10.7 10.8 11.0 11.0 11.1 11.2 20.6 11.3 [13] 11.4 11.4 11.7 12.0 12.9 12.9 13.3 13.7 13.8 14.0 14.2 14.5 [25] 16.0 16.3 17.3 17.5 17.9 18.0 18.0
```

Volume

```
[1] 10.3 10.3 10.2 16.4 18.8 19.7 15.6 18.2 22.6 19.9 77.0 24.2 [13] 21.0 21.4 21.3 19.1 22.2 33.8 27.4 25.7 24.9 34.5 31.7 36.3 [25] 38.3 42.6 55.4 55.7 58.3 51.5 51.0
```

Diagramma di dispersione



■ Possiamo quindi calcolare la correlazione:

$$cor(diametro, volume) = 0.967.$$

■ È quindi evidente una forte relazione di tipo sostanzialmente lineare.

Un primo modello

- Adottiamo per il momento l'ipotesi di una relazione lineare.
- Possiamo allora definire un modello lineare del tipo

(volume) =
$$\alpha + \beta$$
 (diametro) + (errore).

- L'ultima componente esprime la parte delle oscillazioni del volume non legate al diametro o che non è catturata dalla relazione lineare.
- Se y_1, \ldots, y_n rappresentano i volumi e x_1, \ldots, x_n rappresentano i diametri, allora scriveremo:

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

dove $\epsilon_1, \ldots, \epsilon_n$ rappresentano invece gli errori.

Modello di regressione lineare: terminologia

- Il modello che abbiamo appena descritto viene tipicamente chiamato modello di regressione lineare semplice.
- In generale, vogliamo spiegare una variabile y utilizzando un'altra variabile x, mediante un modello del tipo

$$y = \alpha + \beta x + \epsilon.$$

- La variabile y viene tipicamente chiamata variabile risposta o variabile dipendente.
- La variabile x viene chiamata variabile esplicativa, regressore oppure variabile indipendente.
- \blacksquare I valori $\alpha,\beta\in\mathbb{R}$ sono i parametri del modello.

Regressione lineare: cenni storici

 Il termine regressione deriva dalla famosa applicazione compiuta nel 1886 dal biologo e statistico Francis Galton.



- Galton esaminò le altezze dei figli (variabile risposta y) in funzione delle altezze dei genitori (variabile esplicativa x).
- Nella sua analisi, figli alti provenivano da genitori alti e viceversa figli bassi provenivano da genitori bassi.
- Galton notò inoltre una tendenza nelle altezze dei genitori a spostarsi verso l'altezza media nella generazione successiva.
- Galton chiamò questo fenomeno "regression towards mediocrity".

Metodo dei minimi quadrati: idea

- lacksquare In pratica, è necessario determinare il valore dei parametri lpha e eta.
- Se avessimo a disposizione un valore ragionevole dei parametri, diciamo $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$, potremmo prevedere il volume del legno usando

(volume)
$$\approx \hat{\alpha} + \hat{\beta}$$
 (diametro).

- Sembra ragionevole cercare di determinare $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ in modo tale da ottenere buone previsioni sull'insieme di dati osservato.
- Vogliamo quindi trovare dei valori per i parametri tali che

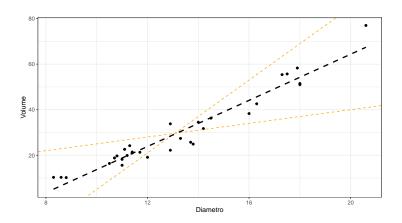
$$y_{1} \approx \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_{1},$$

$$y_{2} \approx \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_{2},$$

$$\vdots$$

$$y_{n} \approx \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_{n}.$$

Differenti scelte dei parametri



- Le linee arancioni rappresentano delle scelte non ottimali a fini previsivi.
- Viceversa, la linea nera attraversa la nuvola di punti e sembra una scelta appropriata.

Metodo dei minimi quadrati: la funzione di perdita

 Per rendere operativa la precedente intuizione, dobbiamo decidere cosa si intende precisamente per

$$y_i \approx \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i, \qquad i = 1, \dots, n.$$

■ Una possibile soluzione, è scegliere i parametri che minimizzano la funzione di perdita

$$\ell(\alpha,\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2,$$

ovvero scegliendo $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ tali che

$$(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) = \arg\min_{\alpha, \beta} \ell(\alpha, \beta).$$

 Questo criterio viene detto il metodo dei minimi quadrati, poiché minimizza la somma degli scarti al quadrato, ovvero la somma degli errori al quadrato.

Minimi quadrati: determinazione dei parametri

 Il criterio dei minimi quadrati è molto popolare perché la soluzione del problema di minimizzazione è semplice da calcolare.

Minimi quadrati

L'unica soluzione al problema

$$(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) = \arg\min_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_i)^2$$

è pari a

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta}\bar{x}, \qquad \hat{\beta} = \frac{\mathsf{cov}(x,y)}{\mathsf{var}(x)}.$$

- La soluzione del problema è ben definita solamente se var(x) > 0.
- **Q**uesto è molto ragionevole: il parametro β indica quanto varia la risposta al variare della esplicativa, ma se var(x) = 0 allora l'esplicativa non varia affatto.

Dimostrazione I

lacksquare Per ogni prefissato eta, conosciamo già la soluzione del seguente problema

$$\arg\min_{\alpha\in\mathbb{R}}\sum_{i=1}^n(y_i-\alpha-\beta x_i)^2=\arg\min_{\alpha\in\mathbb{R}}\sum_{i=1}^n(w_i-\alpha)^2,$$

avendo posto $w_i = y_i - \beta x_i$ per ogni i = 1, ..., n. Infatti, dall'unità C sappiamo che il valore che minimizza tale funzione è la media aritmetica.

■ Pertanto per qualsiasi valore di β , otteniamo che

$$\hat{\alpha}(\beta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} w_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta x_i) = \bar{y} - \bar{x}\beta.$$

■ Dalla definizione di $\hat{\alpha}(\beta)$ segue che per ogni α, β

$$\ell(\alpha,\beta) \geq \ell(\hat{\alpha}(\beta),\beta).$$

Dimostrazione II

Abbiamo quindi ridotto il problema iniziale al seguente sotto-problema

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}} \ell(\hat{\alpha}(\beta), \beta) = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^{n} [(y_i - \bar{y}) - \beta(x_i - \bar{x})]^2$$

e ovviamente porremo $\hat{\alpha} = \hat{\alpha}(\hat{\beta}) = \bar{y} - \hat{\beta}\bar{x}$.

ullet Prendendo la derivata rispetto a eta e ponendola pari a 0, si ottiene che

$$-2\sum_{i=1}^{n}(x_{i}-\bar{x})[(y_{i}-\bar{y})-\beta(x_{i}-\bar{x})]=0,$$

che possiamo riscrivere come

$$\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \beta \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2.$$

Dimostrazione III

• Quindi, se $\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 > 0$ la soluzione al problema è pari a

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\text{cov}(x, y)}{\text{var}(x)},$$

dove l'ultimo passaggio si ottiene moltiplicando numeratore e denominatore per n.

- Nota matematica. Per concludere la dimostrazione bisogna infine verificare che la soluzione trovata è un punto di minimo e non, ad esempio, un massimo.
- **E**sercizio. Si verifichi che la soluzione è effettivamente un punto di minimo, ad esempio valutando il segno della derivata seconda di $\ell(\hat{\alpha}(\beta), \beta)$.

Calcolo dei parametri: gli alberi di ciliegio

■ In questo caso abbiamo che

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = 935.3, \qquad \sum_{i=1}^{n} x_i = 410.7,$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 5736.55, \qquad \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 13887.86.$$

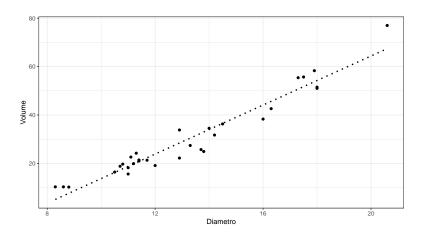
■ Perciò possiamo calcolare medie, varianza e covarianza

$$\bar{y} = \frac{935.5}{31} = 30.17,$$
 $\bar{x} = \frac{410.7}{31} = 13.25,$ $var(x) = \frac{5736.55}{31} - 13.25^2 = 9.53,$ $cov(x, y) = \frac{13887.86}{31} - 13.25 \times 30.17 = 48.24.$

Possiamo quindi determinare i parametri

$$\hat{\beta} = \frac{48.24}{9.53} = 5.06,$$
 $\hat{\alpha} = 30.17 - 5.06 \times 13.25 = -36.88.$

Diagramma di dispersione con retta di regressione



■ La capacità di descrivere le variazione del volume sembra buona, con l'eccezione forse delle osservazioni più esterne.

l residui: media e varianza

 Le differenze tra i valori osservati della variabile risposta ed i valori previsti dal modello, ovvero

$$r_i = y_i - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i), \qquad i = 1, \dots, n,$$

vengono spesso chiamati residui.

■ Proprietà. La media dei residui è nulla, infatti:

$$\sum_{i=1}^{n} r_{i} = \sum_{i=1}^{n} y_{i} - n\hat{\alpha} - \hat{\beta} \sum_{i=1}^{n} x_{i} = n\bar{y} - n(\bar{y} - \hat{\beta}\bar{x}) - n\hat{\beta}\bar{x} = 0.$$

- La varianza dei residui essere utilizzata per valutare la bontà di adattamento del modello ai dati.
- Infatti, quanto più la varianza dei residui è piccola, tanto più la retta di regressione è vicina alle osservazioni.

l residui: media e varianza

Proprietà. La varianza dei residui è sempre minore di quella della variabile risposta. Infatti:

$$\mathsf{var}(y) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha)^2 \ge \min_{(\alpha,\beta) \in \mathbb{R}^2} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 = \mathsf{var}(r).$$

Proprietà. La varianza dei residui è pari a

$$var(r) = var(y) - \frac{cov(x, y)^2}{var(x)}.$$

Infatti, usando le proprietà della varianza, otteniamo che

$$var(r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} [(y_i - \hat{\beta}x_i) - (\bar{y} - \hat{\beta}\bar{x})]^2 = var(y - \hat{\beta}x)$$

$$= var(y) + \hat{\beta}^2 var(x) - 2\hat{\beta}cov(x, y)$$

$$= var(y) + \frac{cov(x, y)^2}{var(x)} - 2\frac{cov(x, y)^2}{var(x)} = var(y) - \frac{cov(x, y)^2}{var(x)}.$$

Coefficiente di determinazione R^2

- La varianza dei residui dipende dalla scala del fenomeno osservato. Pertanto per valutare la bontà di adattamento si utilizza spesso l'indice R^2 .
- Coefficiente di determinazione R^2 . Il coefficiente R^2 per un modello di regressione lineare semplice è definito come:

$$R^2 = 1 - \frac{\operatorname{var}(r)}{\operatorname{var}(y)}.$$

- L'indice R^2 misura la frazione di varianza della variabile risposta (varianza totale) spiegata dal modello. Si ha pertanto che $0 \le R^2 \le 1$.
- Si ha che $R^2 = 0$ se var(r) = var(y), ovvero quando il modello non "spiega" la risposta.
- Viceversa, si ha che $R^2 = 1$ quando var(r) = 0, ovvero quando il modello "spiega" perfettamente la risposta.

Coefficiente di determinazione: gli alberi di ciliegio

Abbiamo calcolato in precedenza le seguenti quantità:

$$ar{y} = 30.17, \qquad \quad ar{x} = 13.25, \\ {\sf var}(x) = 9.53, \qquad {\sf cov}(x,y) = 48.24. \label{eq:var_var_var}$$

È inoltre noto che $\sum_{i=1}^{n} y_i^2 = 36324.99$.

Pertanto possiamo ottenere

$$var(y) = \frac{36324.99}{31} - 30.17^2 = 261.54, var(r) = 261.54 - \frac{48.24^2}{9.53} = 17.35.$$

■ Pertanto, il coefficiente di determinazione vale circa

$$R^2 = 1 - \frac{17.35}{261.54} = 0.934,$$

ovvero il modello spiega poco meno del 95% della varianza spiegata.

Correlazione e coefficiente di determinazione

Proprietà. Il coefficiente di determinazione è pari al coefficiente di correlazione al quadrato, infatti:

$$R^2 = 1 - \frac{\text{var}(r)}{\text{var}(y)} = \frac{\text{cov}(x, y)^2}{\text{var}(x)\text{var}(y)} = \text{cor}(x, y)^2.$$

- Questa equivalenza chiarisce che il coefficiente di correlazione (e quindi la covarianza) misura una relazione di tipo lineare.
- Infatti, il coefficiente R^2 e quindi cor(x, y) catturano la vicinanza dei dati ad una retta.
- Nota. Nel caso dei ciliegi, abbiamo ottenuto $R^2 = 0.934$ e $cor(x, y) = 0.967^2 = 0.935$. Questa leggera discrepanza è dovuta alle varie approssimazioni numeriche effettuate.
- Se avessimo tenuto traccia di un maggior numero di decimali, avremmo ottenuto

$$cor(x, y) = 0.9671194, \qquad R^2 = 0.9353199.$$

Regressione e correlazione

- Le analogie con l'unità J, dove abbiamo introdotto la covarianza e la correlazione, sono molte.
- Il problema di base è lo stesso (studio delle relazioni tra variabili) e gli "ingredienti" che abbiamo maneggiato pure (medie, varianze e covarianze).
- Nonostante ciò, si noti che esiste una importante differenza.
- In questa unità abbiamo considerato l'effetto di una variabile esplicativa su una variabile risposta. Le variabili erano poste in maniera asimmetrica, poichè eravamo interessati ad una relazione del tipo diametro → volume.
- Viceversa nell'unità J ci siamo posti in maniera simmetrica rispetto alle variabili. Non abbiamo cercato di spiegarne una sulla base di un altra ma abbiamo semplicemente valutato le relazioni intercorrenti.