universidad de buenos aires - exactas
departamento de física

2do C 2020

Laboratorio 1 (Físicos)

REGRESIÓN LINEAL

Cátedra Goyanes

Repasemos…

- Definimos un sistema físico a partir de parámetros y variables.

  Medimos de manera sistemática

- Expresamos resultados como un intervalo → $x = (x_0 \pm \Delta x)$
- Utilizamos herramientas e indicadores estadísticos

- El error (o incerteza) absoluta $\boxed{\Delta x = \sqrt{\sigma_N^2 + \sigma_e^2}}$

- Mediciones indirectas → $y = f(x_i)$

- Propagación de errores: $\Delta y^2 = \sum \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \Delta x_i \right)^2$

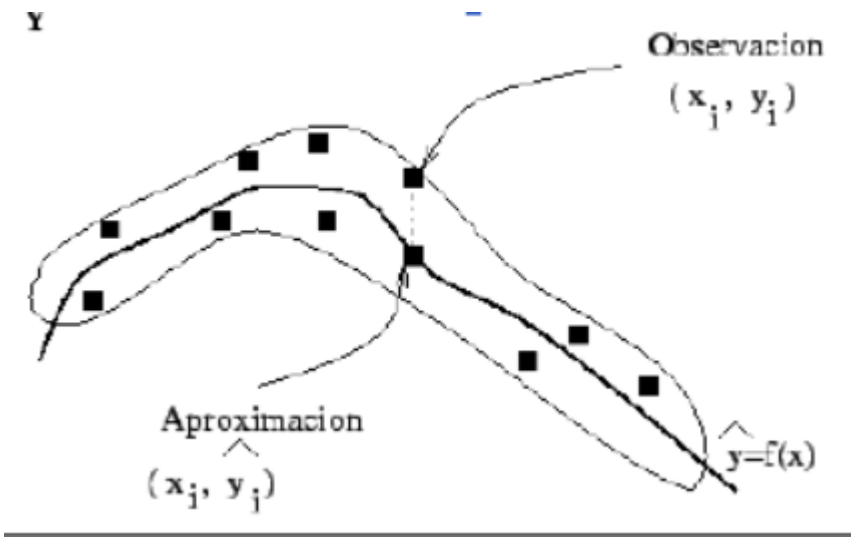
  (variables independientes)

Modelo de Regresión

El objetivo de un **modelo de regresión** es tratar de explicar la relación que existe entre una variable dependiente (Y) y un conjunto de variables independientes (X1,..., Xn).

En un **modelo de regresión simple** hay 1 sola variable independiente X_i

Mediante las técnicas de regresión de una variable Y sobre una variable X, buscamos una función que sea una buena aproximación de una nube de puntos (x_i, y_i), mediante una curva del tipo:



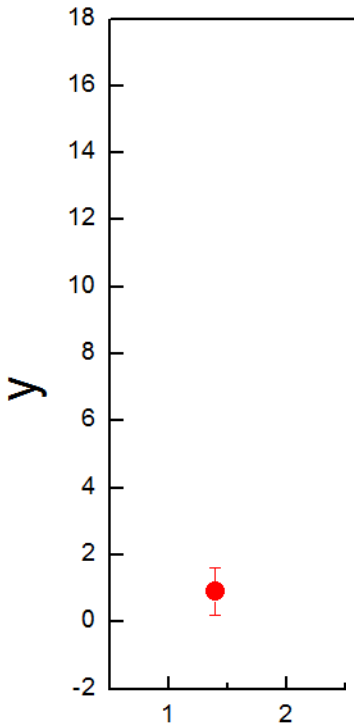
$$\hat{Y} = f(X)$$

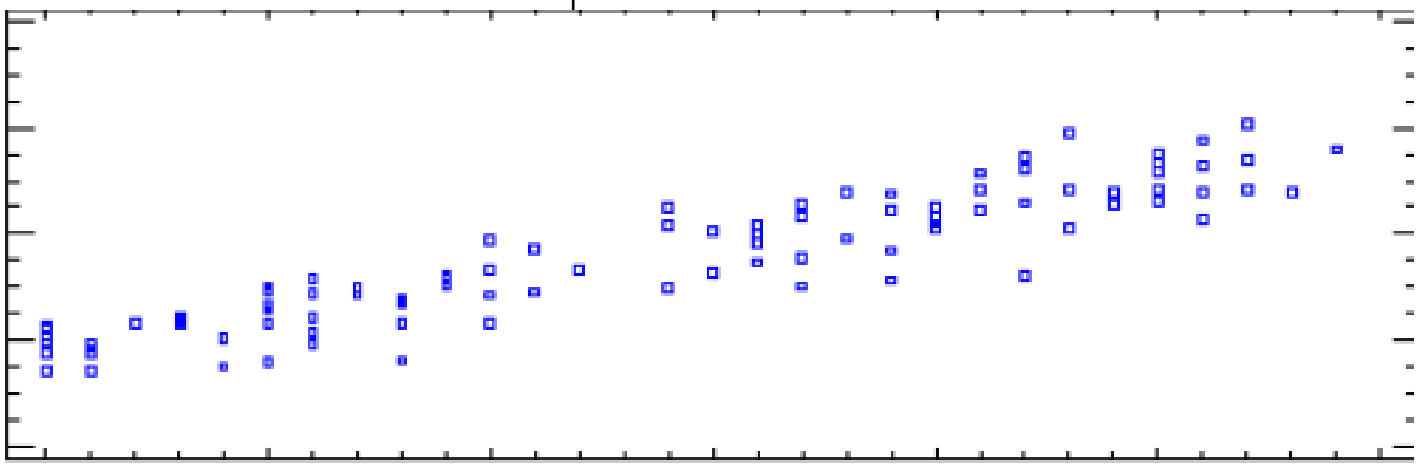
Regresión Lineal (x_i, y_i)

No determinista: Conocido el valor de X, el valor de Y no queda perfectamente establecido. Son del tipo:

$$y = f(x) + u$$

donde u es una perturbación desconocida (variable aleatoria).



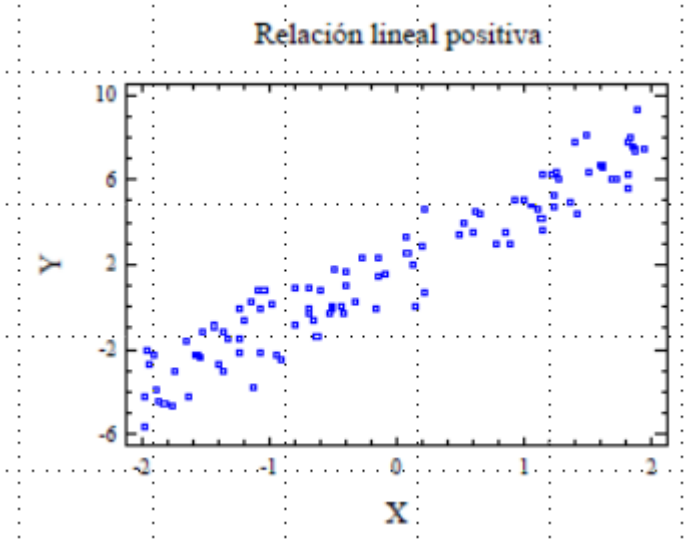


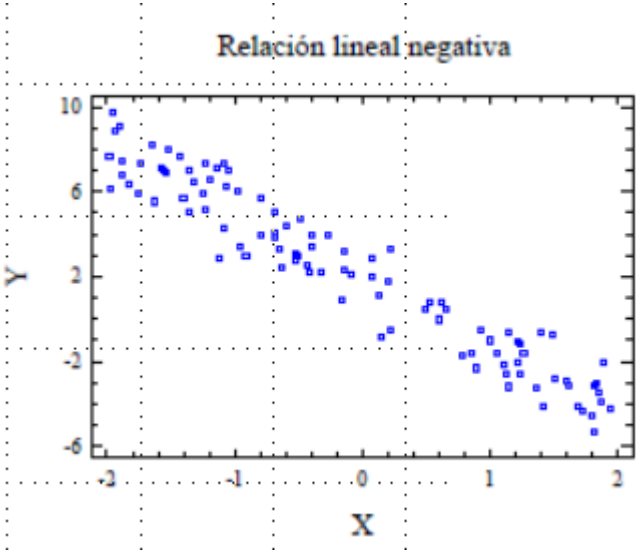
Tipos de relación

- Lineal: Cuando la función $f(x)$ es lineal,

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

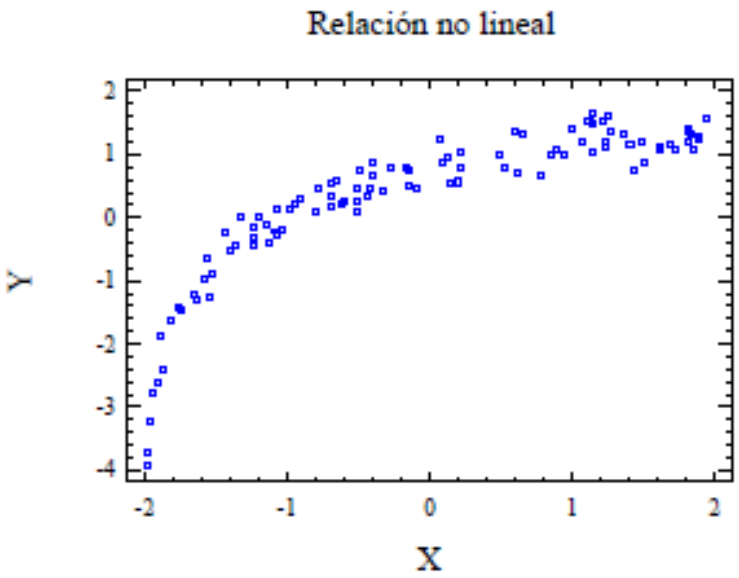
- Si $\beta_1 > 0$ hay relación lineal positiva.
- Si $\beta_1 < 0$ hay relación lineal negativa.





Tipos de relación

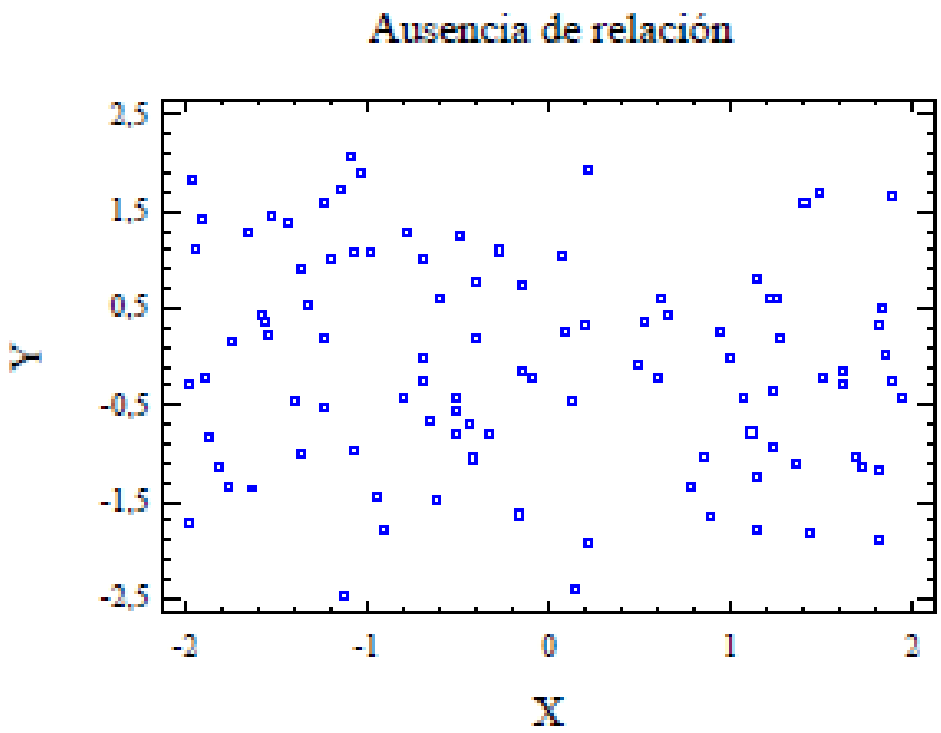
- No lineal: Cuando la función $f(x)$ no es lineal. Por ejemplo, $f(x) = log(x)$, $f(x) = x^2 + 3, \ldots$



Los datos no tienen un aspecto recto.

Tipos de relación

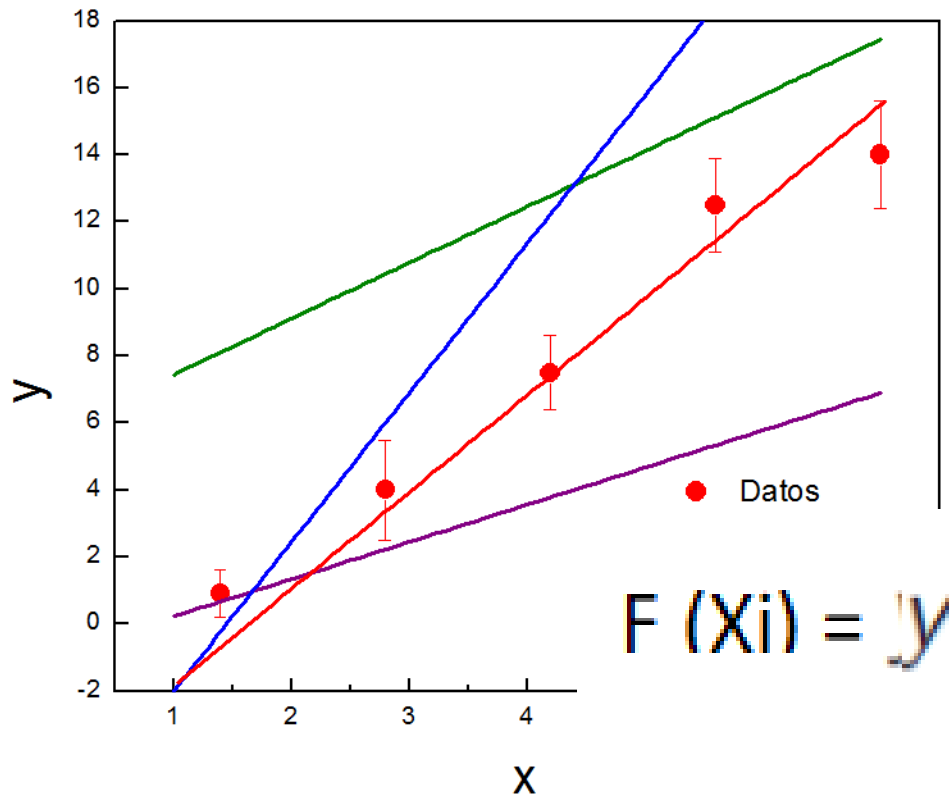
- Ausencia de relación: Cuando $f(x) = 0$.



Regresión Lineal

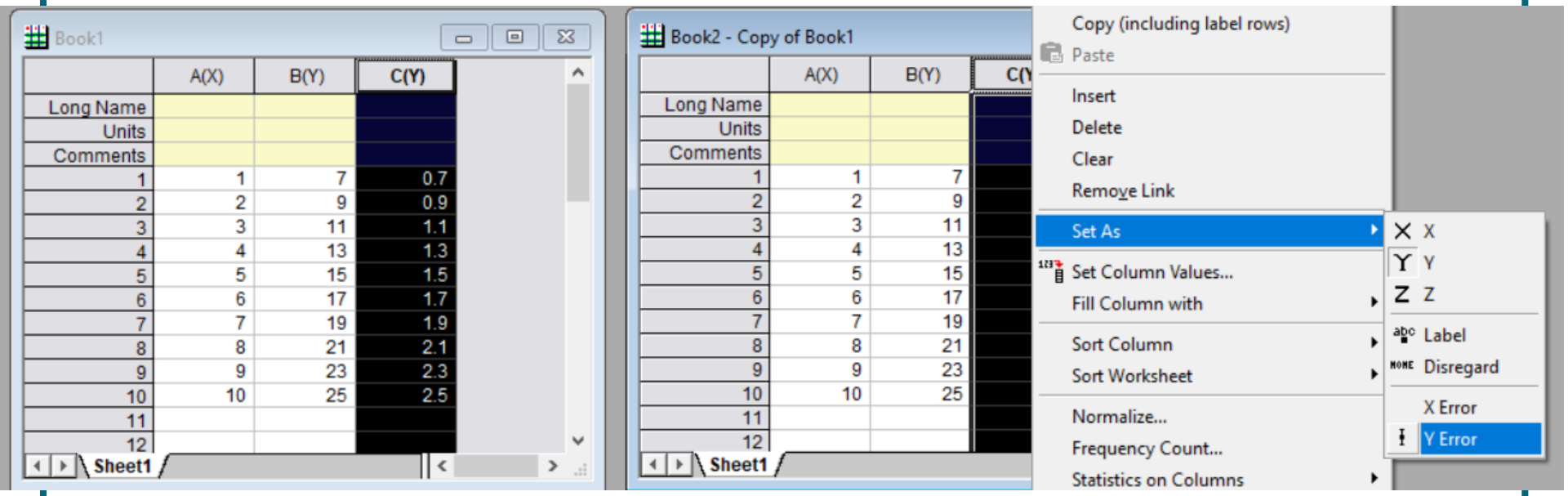
(x_i, y_i)

Para hacer una estimación del modelo de regresión lineal simple, trataremos de buscar una recta de la forma



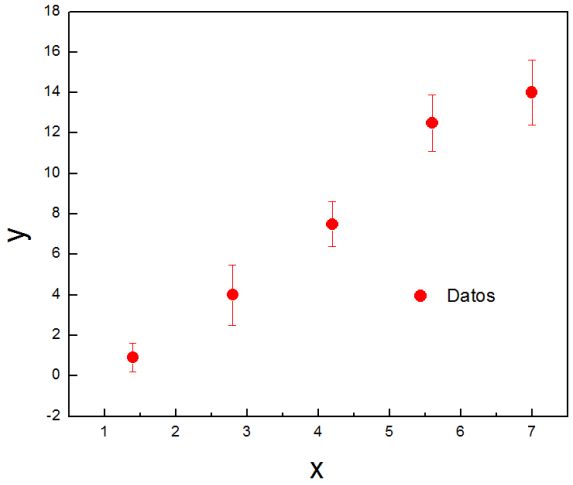
F (Xi) = $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + u_i$

¿Cómo se grafica? ¿Cómo le digo que columna es el error?



¿ Qué error tengo que graficar? El ABSOLUTO

El modelo de regresión lineal simple



El modelo de regresión lineal simple supone que,

$$\boxed{y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + u_i}$$

donde:

- y_i representa el valor de la variable respuesta para la observación i-ésima.
- x_i representa el valor de la variable explicativa para la observación i-ésima.
- u_i representa el error para la observación i-ésima que se asume normal,

$$u_i \sim N(0, \sigma)$$

- β_0 y β_1 son los coeficientes de regresión:
  - β_0 : intercepto
  - β_1 : pendiente

Los parámetros que hay que estimar son: β_0, β_1 y σ.

Hipótesis del modelo de regresión lineal simple

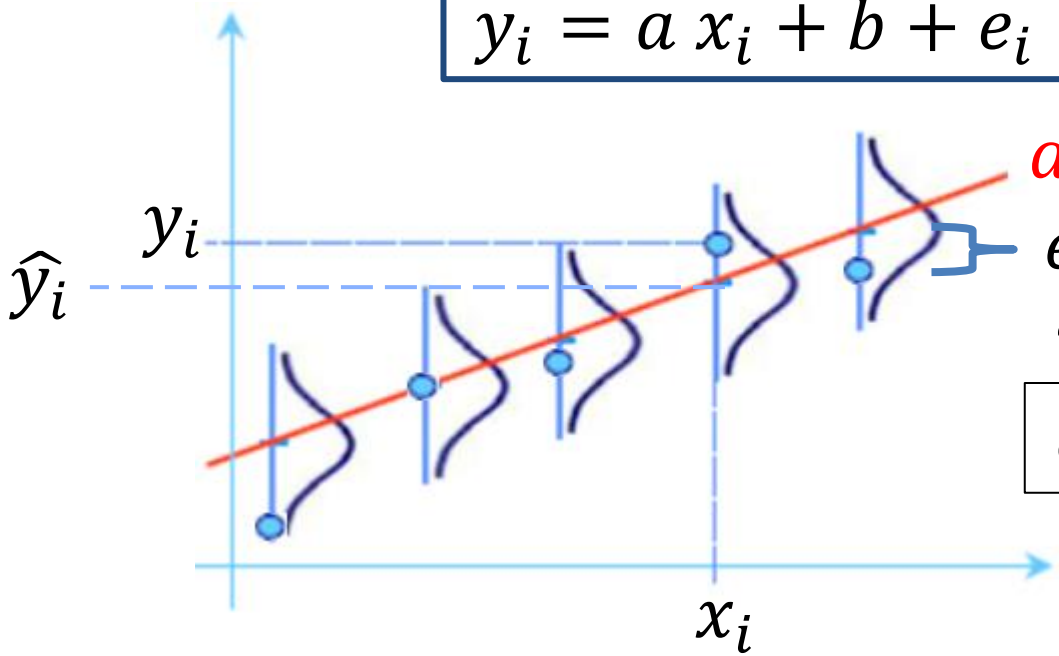
Independencia

- Los datos deben ser independientes.
- Una observación no debe dar información sobre las demás.

Normalidad

- Se asume que los datos son normales a priori.

$$y_i = a\,x_i + b + e_i$$



$$a\,x_i + b = \widehat{y}_i$$

$$e_i \sim N(0, \sigma^2)$$

"Residuos"

$$e_i \equiv y_i - \widehat{y}_i$$

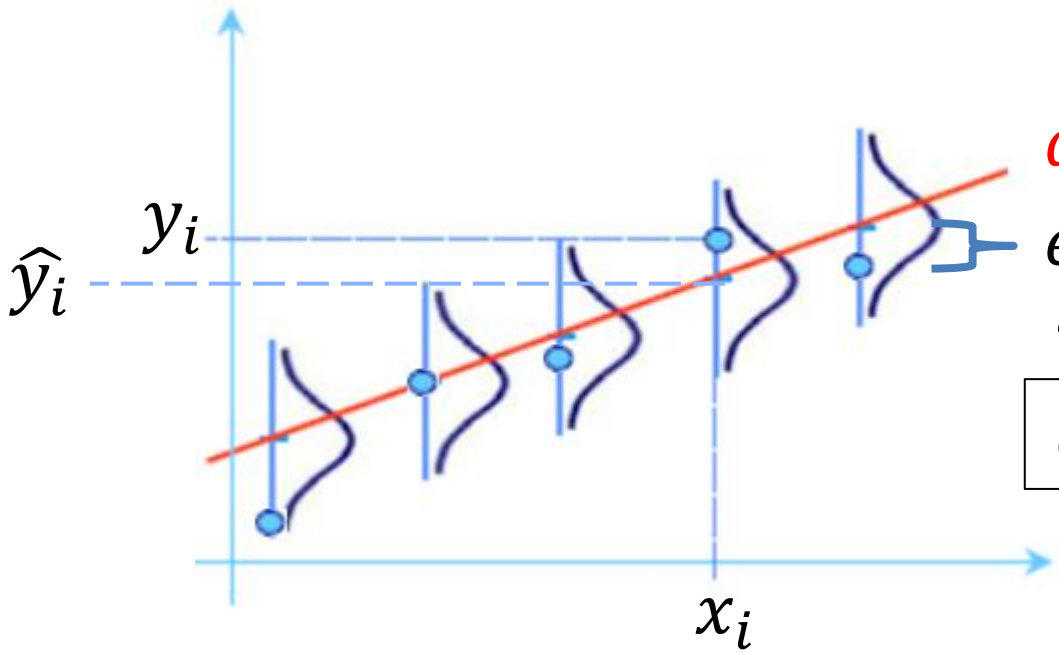
Estimadores de mínimos cuadrados

Gauss propuso en 1809 el método de mínimos cuadrados para obtener los valores ***a*** y **b** que mejor se ajustan a los datos:

$$\widehat{y_i} = a\, x_i + b$$

El método consiste en minimizar la suma de los residuos al cuadrado (S^2):

$$S^2 = \sum_i^N e_i^2 = \sum_i^N (y_i - \widehat{y_i})^2 = \sum_i^N [y_i - (a\, x_i + b)\,]^2$$



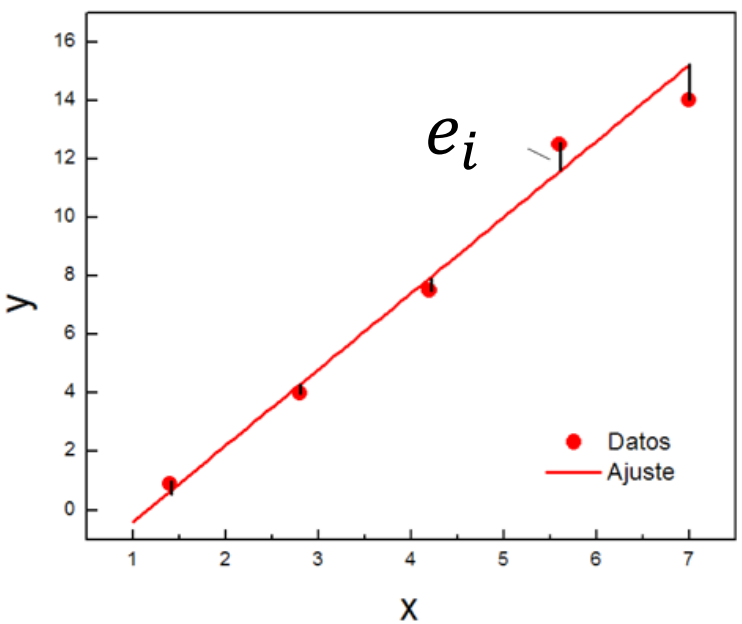
$$a\, x_i + b = \widehat{y_i}$$

$$e_i \sim N(0, \sigma^2)$$

"Residuos"

$$\boxed{e_i \equiv y_i - \widehat{y_i}}$$

Es decir, minimizar la suma de los cuadrados de las diferencias entre los <u>valores reales observados</u> (y_i) y los <u>valores estimados</u> $(\hat{y}_i)$.



$$S^2 = \sum_i^N e_i^2 = \sum_i^N [y_i - (a.x_i + b)\,]^2$$

Debo minimizar $S^2(a, b)$

Incógnitas: a y b

¿Cómo cálculo a y b en el ajuste?
Minimizo S^2

$$\frac{\partial S^2}{\partial a}(a,b) = 0$$

$$\frac{\partial S^2}{\partial b}(a,b) = 0$$

...

$$a = \frac{N\sum(x_i\, y_i) - (\sum x_i).(\sum y_i)}{N\sum {x_i}^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$b = \frac{(\sum {x_i}^2).(\sum y_i) - (\sum x_i).(\sum x_i y_i)}{N\sum {x_i}^2 - (\sum x_i)^2}$$

¿Cuáles son los errores de los parámetros obtenidos a y b?

Propagamos errores:

$$\sigma_a^2 = \sum \left(\frac{\partial a}{\partial y_i} \sigma_y \right)^2 \qquad \sigma_b^2 = \sum \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \sigma_y \right)^2$$

Si $\sigma_{y_1} = \sigma_{y_2} = \ldots\ldots = \sigma_{yN} = \sigma_y$

$$\boxed{\sigma_A = \sigma_y \sqrt{\frac{\sum x^2}{\Delta}}} \qquad \boxed{\sigma_B = \sigma_y \sqrt{\frac{N}{\Delta}}}$$

Donde: $\Delta = N \sum x^2 - (\sum x)^2$

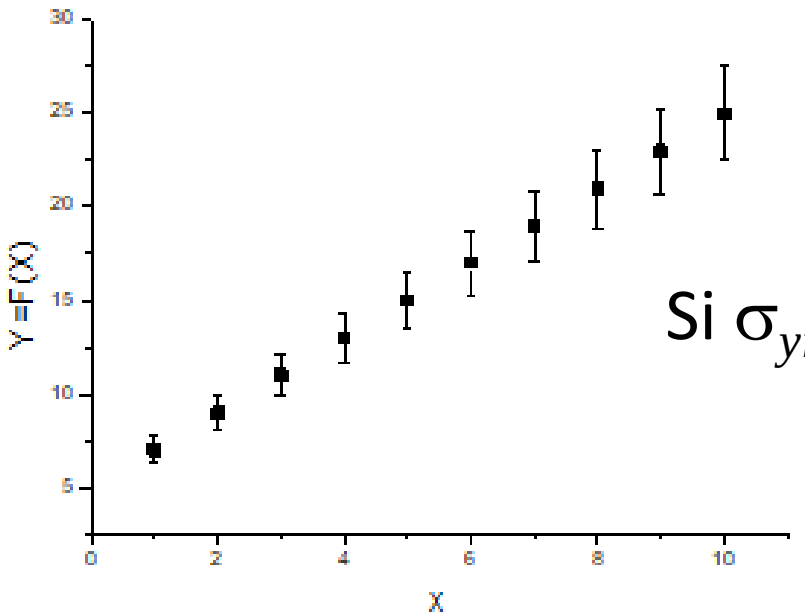
Estimación del σ_y

- Asumimos que todos lo y_i tienen la misma función distribución normal con el mismo σ_y

- La dispersión de los datos alrededor de la recta estimada tendrá la misma desviación estándar

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{N-2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - A - Bx_i)^2},$$

Hasta acá no tuvimos en cuenta el error de los datos. Algunos datos podrían ser más confiables que otros, y queremos que “pesen” más.



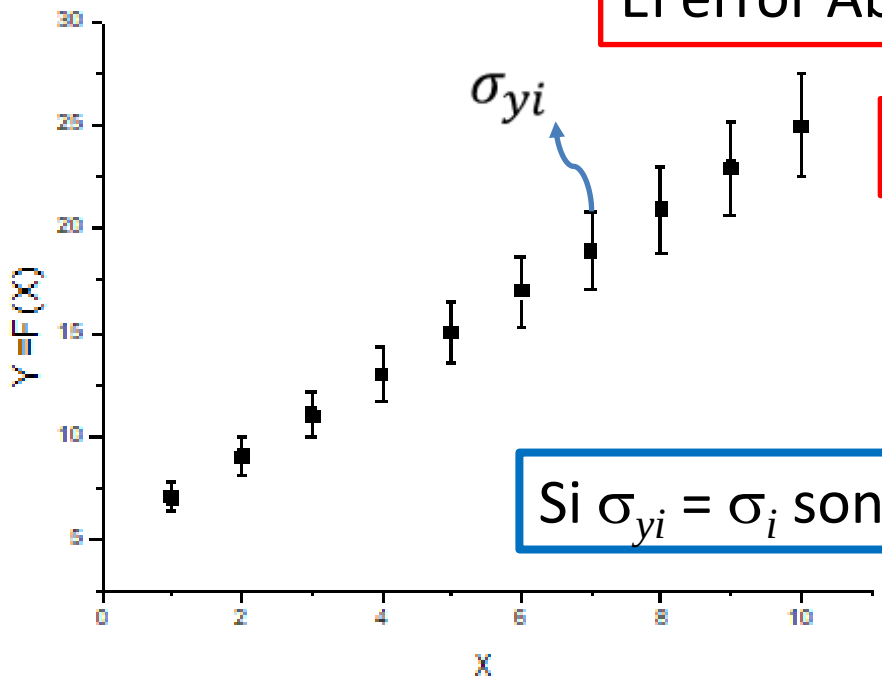
Si $\sigma_{yi} = \sigma_i$ son distintos:

Peso

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^{\,2}}$$

Ajuste de cuadrados mínimos pesado con la incertidumbre

El error Absoluto cambia de dato a dato



¿Cómo tengo en cuenta eso?

CM PONDERADOS

Si $\sigma_{yi} = \sigma_i$ son distintos

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^{\,2}}$$

CM sin ponderar

$$S^2 = \sum_i^N e_i^2 = \sum_i^N [y_i - f(x_i)]^2$$

CM PONDERADOS

$$S^2 = \sum_i^N \left[\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_{yi}}\right]^2 = \sum_i^N \frac{[y_i - f(x_i)]^2}{\sigma_{yi}^{\,2}}$$

$$S^2 = \sum_i^N \left[\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_{yi}}\right]^2$$

$$= \sum_i^N \frac{[y_i - f(x_i)]^2}{{\sigma_{yi}}^2}$$

$$a = \frac{1}{\Delta}\left[\sum \frac{1}{{\sigma_{yi}}^2} \sum \frac{x_i y_i}{{\sigma_{yi}}^2} - \sum \frac{x_i}{{\sigma_{yi}}^2} \sum \frac{y_i}{{\sigma_{yi}}^2}\right]$$

$$b = \frac{1}{\Delta}\left[\sum \frac{{x_i}^2}{{\sigma_{yi}}^2} \sum \frac{y_i}{{\sigma_{yi}}^2} - \sum \frac{x_i}{{\sigma_{yi}}^2} \sum \frac{x_i y_i}{{\sigma_{yi}}^2}\right]$$

$$\Delta = \sum \frac{1}{{\sigma_{yi}}^2} \sum \frac{{x_i}^2}{{\sigma_{yi}}^2} - \left(\sum \frac{x_i}{{\sigma_{yi}}^2}\right)^2$$

Cuadrados mínimos solo considera errores en eje Y

- Se debe cumplir que:

$$\boxed{\Delta x \frac{dy}{dx} \ll \Delta y}$$

En caso contrario, debemos **invertir los ejes**.

- Si los dos términos son del **mismo orden**, podemos "trasladar" el error en x al error en y:

$$\Delta y_{\text{nuevo}}^2 = \left(\Delta x \frac{dy}{dx}\right)^2 + \Delta y_{original}^2$$

- Si aproximamos por una recta y **pasa por el origen**, entonces el criterio se puede expresar como: $\varepsilon_x \ll \varepsilon_y$

Ajuste de cuadrados mínimos pesado con la incertidumbre

Si $\sigma_{yi} = \sigma_i$ son distintos

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^{\,2}}$$

$$\Delta = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

$$\Delta = N\sum x^2 - (\sum x)^2$$

$$\sigma_A = \sigma_y \sqrt{\frac{\sum x^2}{\Delta}}$$

$$\sigma_B = \sigma_y \sqrt{\frac{N}{\Delta}}$$

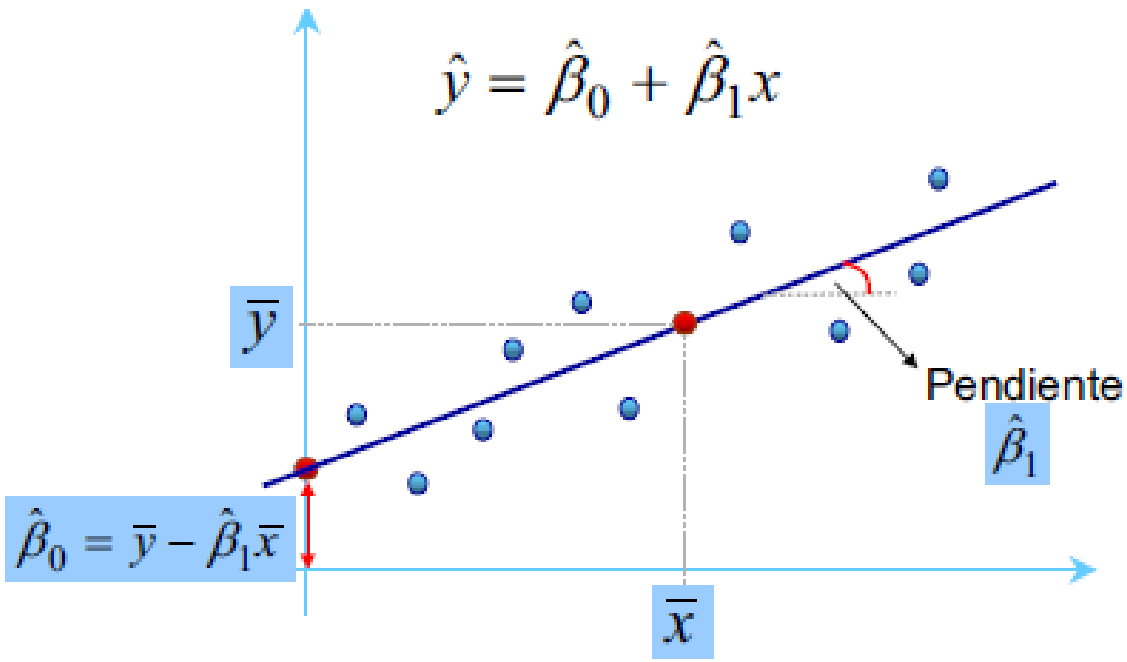
$$\sigma_A = \sigma_y \sqrt{\frac{\sum wx^2}{\Delta}}$$

$$\sigma_B = \sigma_y \sqrt{\frac{\sum w}{\Delta}}$$

Estimadores de mínimos cuadrados

$$\hat{\beta}_1 = \frac{cov(x,y)}{s_x^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$



Covarianza

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}, \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}, \quad S_X^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{n}, \quad S_Y^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}{n}, \quad S_{XY} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n}.$$

Observación: La recta de regresión pasa siempre por el centro de gravedad de la nube de puntos, es decir por el punto . $(\bar{X}, \bar{Y})$

S_{XY} es la **covarianza muestral** entre *X* e *Y*.

$$Cov(X,Y) = \frac{\sum_1^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n}$$

La covarianza es un valor que indica el grado de interralación entre dos variables respecto de sus propias medias o promedios.

Dicho de otra forma, la covarianza, como la misma expresión lo indica, nos dice si dos variables tienen que ver, de alguna manera, la una con la otra

S_X^2 es la **varianza muestral** de *X*

Coeficiente de Correlación Lineal r

El coeficiente de correlación lineal entre *X* e *Y* viene dado por

$$r = \frac{S_{XY}}{S_X S_Y},$$

$$r = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}}.$$

Mide la dependencia lineal que existe entre las dos variables.

Propiedades del coeficiente de correlación:

a) No tiene dimensión, y siempre toma valores en [-1,1].
b) Si las variables son independientes, entonces r=0, pero el inverso no tiene por qué ser cierto.
c) Si existe una relación lineal exacta entre *X* e *Y*, entonces *r* valdría 1 (relación directa) ó -1 (relación inversa).
d) Si $r > 0$, esto indica una relación directa entre las variables (es decir, que si aumentamos *X*, también aumenta *Y*).
e) Si $r < 0$, la correlación entre las variables es inversa (si aumentamos una, la otra disminuye).

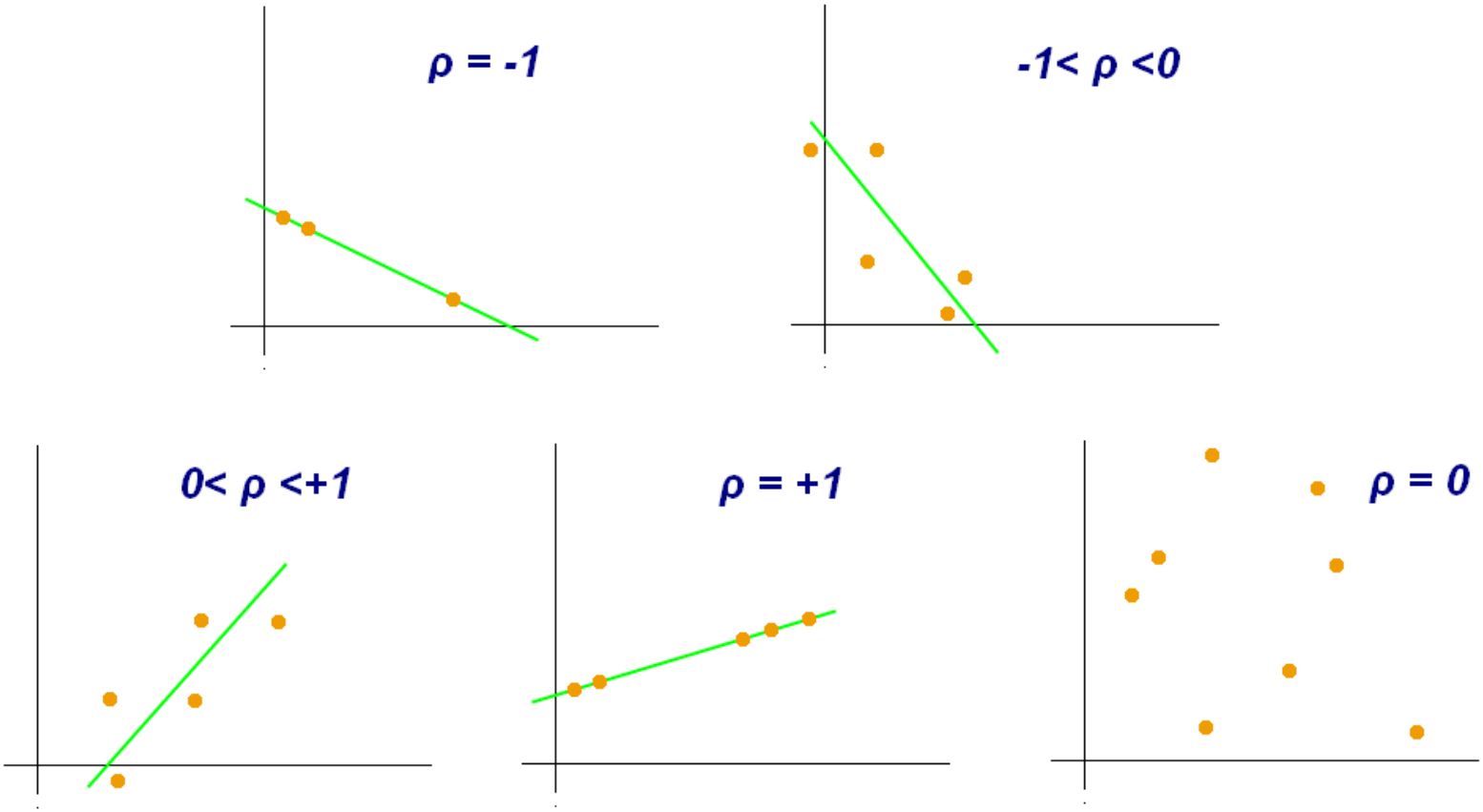
Coeficiente de Correlación de Pearson ρ

Mide el grado de correlación lineal entre dos variables

$$-1 < \rho < 1$$

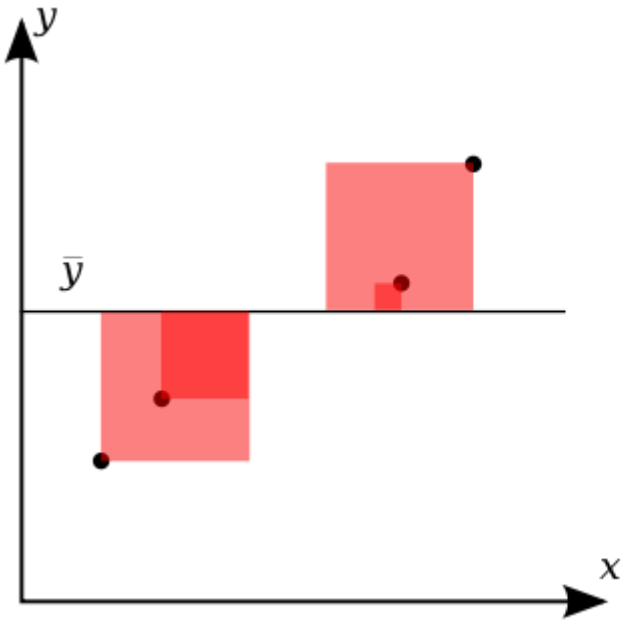
$\rho = |1|$ indica que los datos están perfectamente alineados

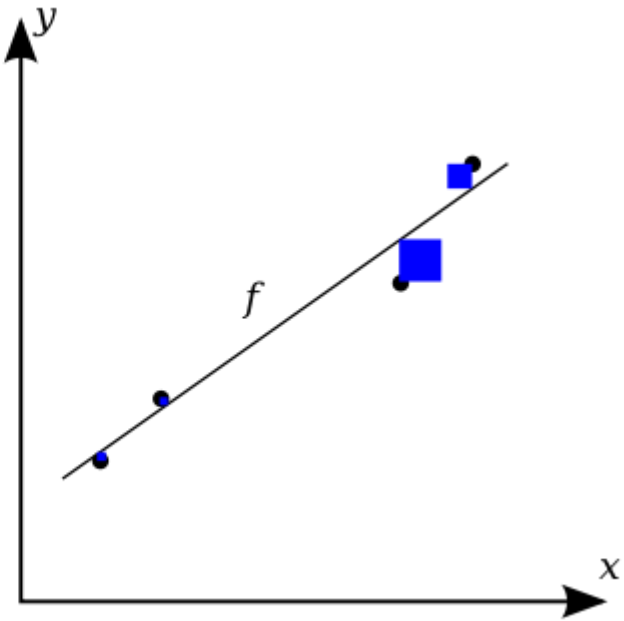
$\rho = 0$ indica que no hay correlación lineal entre las variables



Coeficiente de Determinación R^2 (r-squared)

Mientras más cercano a 1 mejor es el ajuste ($R^2 = r^2$)



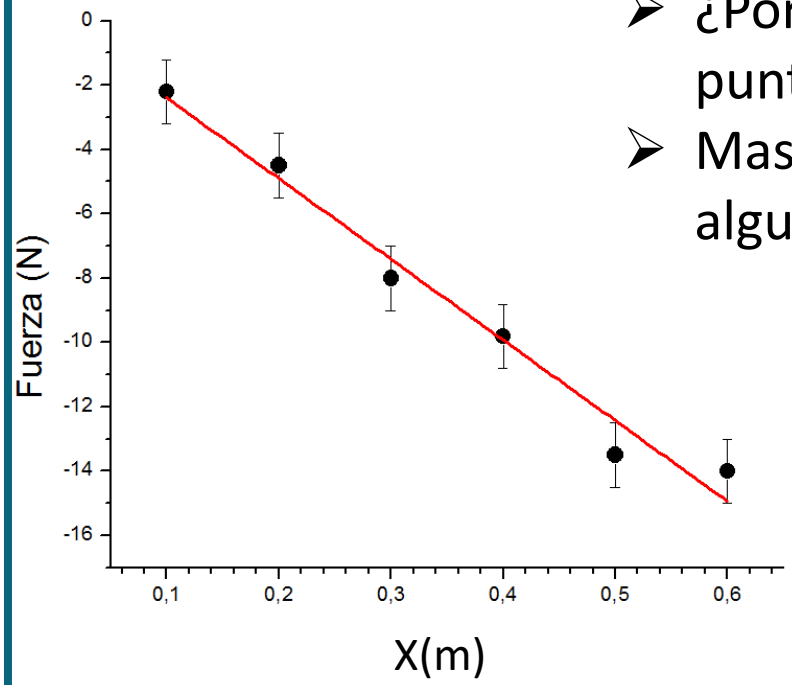


$$SS_{\text{tot}} = \sum_i (y_i - \bar{y})^2 \qquad SS_{\text{res}} = \sum_i (y_i - f_i)^2 = \sum_i e_i^2$$

$$\boxed{R^2 = 1 - \frac{SS_{\text{res}}}{SS_{\text{tot}}}}$$

PARA PENSAR y CONTESTAR LA PROXIMA

Supongamos que quiero sacar la constante elástica de un resorte



- ¿Tiene sentido hacer tantas mediciones?
- ¿Por qué no la saco directamente de un punto?
- Mas allá de determinar el rango lineal, ¿tiene alguna otra ventaja?

- En el caso, ¿estaría bien sacar K como el cociente?
- ¿Qué pasa con los errores a medida que aumento el numero de mediciones?

¿Y si el modelo no es lineal?

Muchas veces puede linealizarse la ecuación

$$y = a.x^3$$

Se grafica $y\ vs\ x^3$

$$\Delta(x_i{}^3) = \sqrt{\left(\frac{\partial(x^3)}{\partial x}\Delta x_i\right)^2}$$

$$y = a.b^x$$

$$\ln(y) = \ln(a.b^x)$$

$$\ln(y) = \ln(a) + x.ln(b)$$

Se grafica $\ln(y)\ vs\ x$

Δ (a) = ?????

Δ (b) = ?????

¿Qué se obtiene de CM????

$$y(x) = a.x^b$$

$$\ln(y) = \ln\left(a.x^b\right)$$

$$\ln(y) = \ln(a) + b.\ln(x)$$

Se grafica $\ln(y)$ vs $\ln(x)$

Parte de esta presentación fue adaptada de presentaciones de:

Dra. Adriana Márquez
Lic. Santiago Estévez Areco

Gracias a ella/él por compartir la información

Justificación del principio de cuadrados mínimos

$$Prob_{A,B}(y_i) \propto \frac{1}{\sigma_y} e^{-(y_i - A - Bx_i)^2/2\sigma_y^2}$$

$$Prob_{A,B}(y_1, \ldots, y_N) = Prob_{A,B}(y_1) \cdots Prob_{A,B}(y_N)$$
$$\propto \frac{1}{\sigma_y^N} e^{-\chi^2/2},$$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - A - Bx_i)^2}{\sigma_y^2}.$$

El máximo de probabilidad corresponde al mínimo de χ^2