11 La regressione

11.1 Introduzione

Molti problemi dell'ingegneria sono collegati alla determinazione delle relazioni tra due o più insiemi di variabili.
Y: variabile di risposta (variabile dipendente),
$x_1, ..., x_r$: variabili di ingresso (variabili indipendenti).

È ragionevole supporre che per opportune costanti β_k, $k = 0, ..., r$, possa valere la relazione

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + ... + \beta_r x_r.$$

Tuttavia, questo livello di precisione nella pratica non è raggiungibile essendo una relazione deterministica e quindi la relazione viene trasformata in

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + ... + \beta_r x_r + \varepsilon \qquad (1)$$

dove
ε = errore casuale, è una variabile casuale con
$\mathrm{E}(\varepsilon) = 0$ e $\mathrm{var}[\varepsilon] = \sigma^2$ (costante)
σ^2 = varianza dell'errore, riflette la variabilità dell'errore sperimentale.

La relazione (1) può essere scritta nella forma equivalente:

$$\mu_{Y|x} = \mathrm{E}[Y|x] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_r x_r \qquad (2)$$

con $x = (x_1, \ldots, x_r)$.
Se $r \neq 1 \Rightarrow$ regressione lineare multipla

$$(\beta_0, \ldots, \beta_r) := \text{coefficienti di regressione};$$

Se $r = 1 \Rightarrow$ regressione lineare semplice e le equazioni (1), (2) assumono la forma:

$$Y = \alpha + \beta x + \varepsilon \quad \text{o} \quad \mathrm{E}[Y|x] = \alpha + \beta x.$$

(1), (2) sono dette equazioni di regressione lineare.
Nel caso $r = 1$:

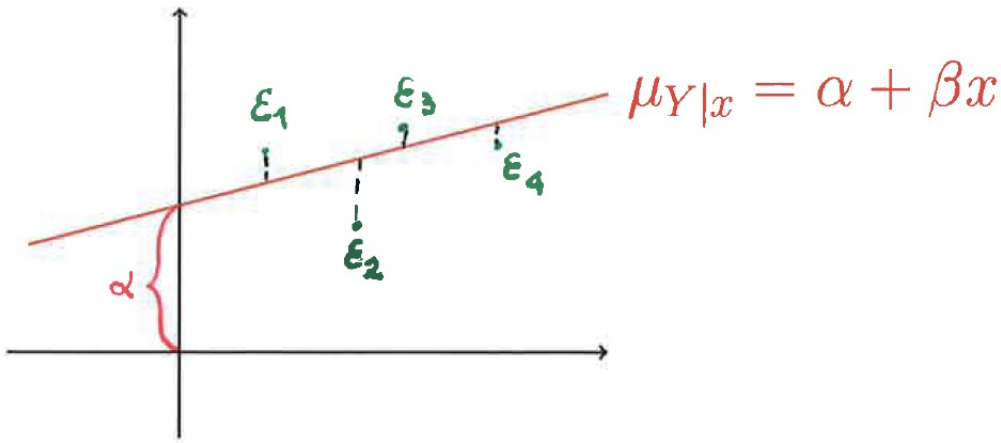

Figura 1: Dati ipotetici (x, y) disposti attorno alla vera retta di regressione per $n = 4$ (α intercetta, β coefficiente angolare).

11.2 Stima dei coefficienti α, β

Problema: stimare i coefficienti di regressione α, β attraverso i dati.

Supponiamo che A, B siano gli stimatori di α, β.

$$\Rightarrow \hat{y} = A + Bx$$

sarà la retta di regressione stimata.

Per una grande quantità di dati ci si aspetta che la retta di regressione stimata $\hat{y}$ sia più vicina alla "vera" retta di regressione $\mu_{Y|x} = \alpha + \beta x$.

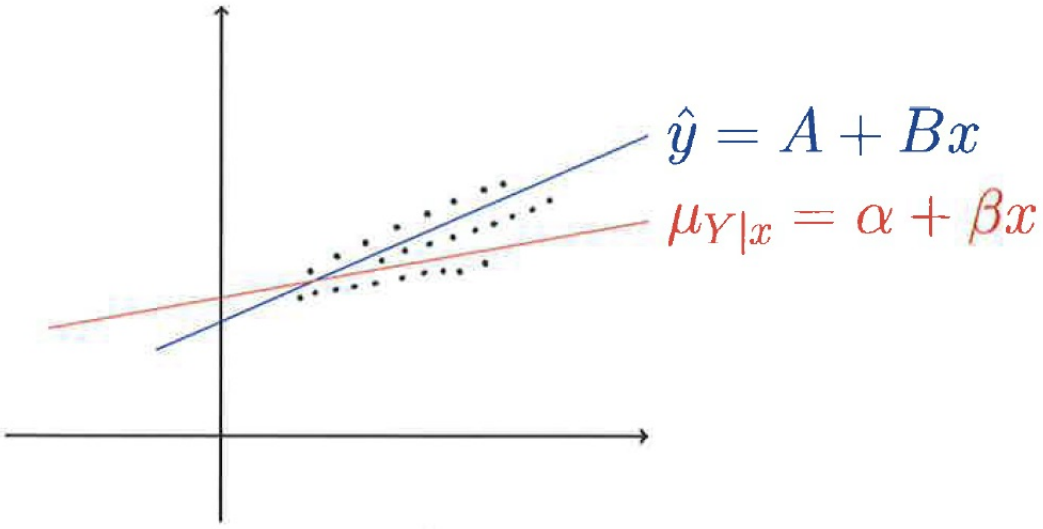

Figura 2: Diagramma a dispersione attorno alle rette di regressione vera e stimata.

Al variare di x_i per $i = 1, ..., n$, $Y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$ con $\mathrm{E}[Y_i] = \alpha + \beta x_i$ si ha:

$$y_i - \mathrm{E}[Y_i] = \varepsilon_i.$$

11.3 Metodo di stima

È fondamentale introdurre il concetto di residuo. Un residuo è essenzialmente un errore nella stima del modello $\hat{y} = A + Bx$.

Residuo = errore di stima

Dati $(x_i, y_i)\,, i = 1, ..., n$ e un modello stimato $\hat{y}_i = A + Bx_i$, il residuo i-esimo e_i è definito da:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i\,,\ i = 1, ..., n$$

ovvero

$$y_i = A + Bx_i + e_i\,.$$

Nota bene

e_i: residui (osservati)

ε_i: errori del modello concettuale (non osservati).

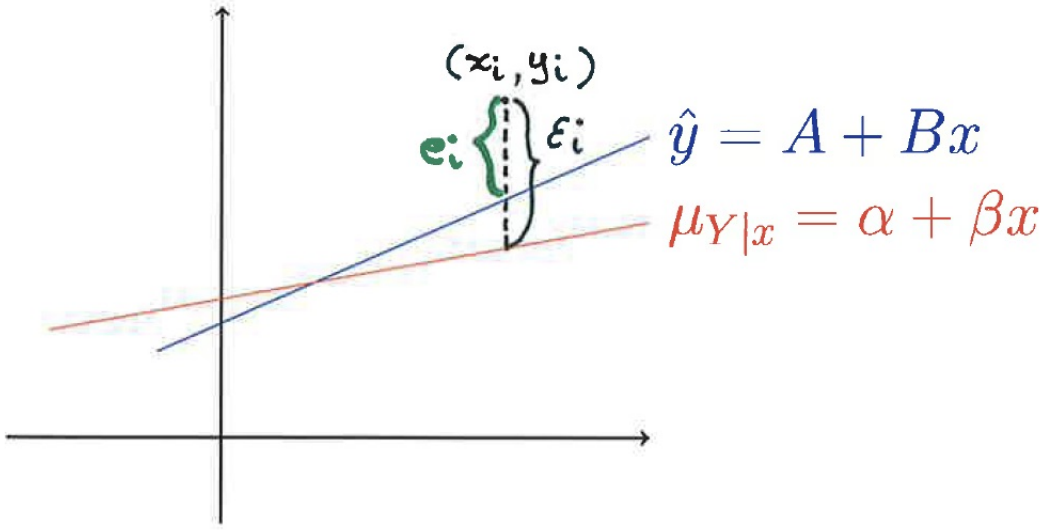

Figura 3: Confronto di ε_i con il residuo e_i.

I valori A, B quali stime di α, β devono essere tali che la somma dei quadrati dei residui sia minima (somma dei quadrati delle differenze tra predizione e valore osservato).

$$SS_R = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - A - Bx_i)^2$$

11.3.1 Metodo dei minimi quadrati

Derivando SS_R rispetto ad A e a B si ottengono le seguenti relazioni:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial A} SS_R = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - A - Bx_i) \\ \frac{\partial}{\partial B} SS_R = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i (y_i - A - Bx_i) \end{cases} \tag{3}$$

(A, B) è il punto di stazionarietà del sistema (3) se:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial A} SS_R = 0 \\ \frac{\partial}{\partial B} SS_R = 0, \end{cases}$$

da cui si ottengono:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} y_i = nA + B \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = A \sum_{i=1}^{n} x_i + B \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{cases} \tag{4}$$

chiamate equazioni normali.

Poniamo $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i$ e $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$

$$\Rightarrow n\bar{y} = nA + nB\bar{x} \Rightarrow A = \bar{y} - B\bar{x}$$

(stimatore di α)

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = nA\bar{x} + B\sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

$$= n\bar{x}(\bar{y} - B\bar{x}) + B\sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

$$= n\bar{x}\bar{y} + B[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2]$$

$$\Rightarrow B = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2} \qquad \text{(stimatore di } \beta\text{)}$$

Alternativamente

$$\begin{cases} A = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i - B\bar{x} \\ B = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x} \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2} \end{cases}$$

Questo metodo è stato utilizzato per stimare una retta ($\hat{y}$) la cui peculiarità è quella di essere "vicina" alle coppie (x_i, y_i) di dati osservati.

Osservazione: La stima ai minimi quadrati determina una retta che minimizza la somma dei quadrati degli scostamenti verticali dei punti rispetto alla retta.

11.4 Proprietà degli stimatori

A, B sono stimatori corretti di α, β.
Infatti:

$$\mathrm{E}[B] = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})\,\mathrm{E}[y_i]}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(\alpha + \beta x_i)}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

$$\text{ma } \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i - n\bar{x} \equiv 0 \Rightarrow$$

$$\mathrm{E}[B] = \frac{\beta(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \bar{x}\sum_{i=1}^{n} x_i)}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2} \equiv \beta$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}[A] &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathrm{E}[y_i] - \mathrm{E}[B]\bar{x} \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\alpha + \beta x_i) - \beta\bar{x} \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\alpha + \beta\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i - \beta\bar{x} \\
&= \frac{1}{n}n\alpha \equiv \alpha
\end{aligned}$$

Si può provare che:

$$\mathrm{var}[B] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}x_i^2 - n\bar{x}^2}, \quad \mathrm{var}[A] = \frac{\sigma^2\sum_{i=1}^{n}x_i^2}{n(\sum_{i=1}^{n}x_i^2 - n\bar{x}^2)}.$$

Poichè per ipotesi le variabili y_i sono indipendenti, normali, con media $E[y_i] = \alpha + \beta x_i$ e con varianza $\sigma^2 \Rightarrow A, B$ sono variabili casuali NORMALI (perchè combinazioni lineari di v.c. normali).

11.5 Stima di σ^2

La quantità SS_R può essere usata per stimare la varianza σ^2 degli errori casuali.

Una stima corretta di σ^2 è data da:

$$S^2 = \frac{SS_R}{n-2}$$

cioè si può dimostrare che

$$\mathrm{E}[S^2] \equiv \sigma^2$$

Notazioni sintetiche:

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2$$

$$S_{yy} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - n\bar{y}^2$$

allora si ha:

$$\begin{cases} A = \bar{y} - B\bar{x} \\ B = \dfrac{S_{xy}}{S_{xx}} \\ SS_R = \dfrac{S_{xx}S_{yy} - S_{xy}^2}{S_{xx}} \end{cases}$$

Osservazione

La Fig.1 illustra non solo dove, in un grafico, cade ε_i, ma anche quali sono le conseguenze dell'ipotesi di normalità per ε_i. In Fig.4, per n=6 valori equidistanti di x ed un singolo valore di y per ogni x, la retta tracciata è la vera retta di regressione mentre i punti sono le reali osservazioni, disperse attorno alla retta. Ogni punto appartiene ad una propria distribuzione normale, il cui centro (la media) cade sulla retta di regressione. Questo è quanto ci si aspetta poichè $E[Y|x] = \alpha + \beta x$. Pertanto la vera retta di regressione passa attraverso le medie della variabile di risposta. Tutte le distribuzioni hanno la stessa varianza σ^2. La deviazione tra una singola y e il punto sulla retta sarà il valore di ε corrispondente.

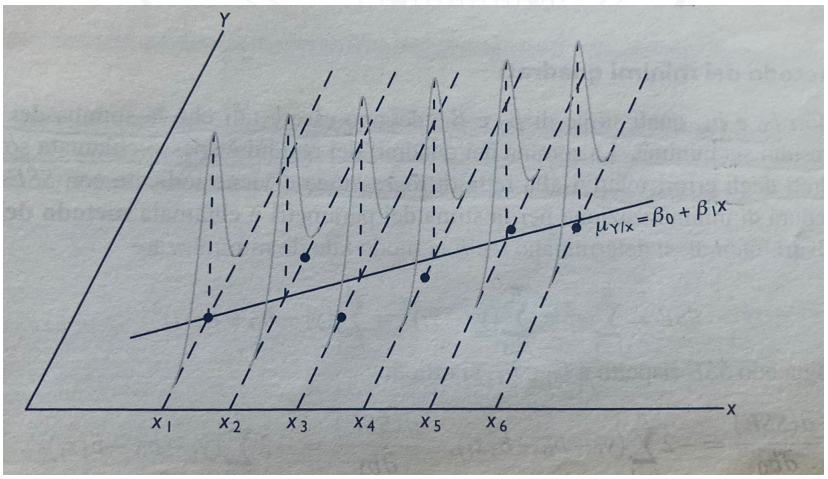

Figura 4: Osservazioni individuali attorno alla vera retta di regressione ($\beta_0 = \alpha$, $\beta_1 = \beta$).

11.6 Regressione lineara multipla (cenni)

In molte situazioni il valore di una risposta Y può essere prevista sulla base di più di un predittore.
Definizione: Il modello di regressione lineare multipla suppone che la risposta Y dipenda dai predittori x_i, $i = 1, ..., r$ attraverso la relazione

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + ... + \beta_r x_r + \varepsilon$$

dove
β_i sono i parametri di regressione
ε è l'errore non osservabile, v.c. con media $E[\varepsilon] = 0$.
I parametri non sono noti e devono essere stimati dai dati.
Come nel caso della regressione lineare semplice si utilizzerà il metodo dei minimi quadrati.
Dato un insieme di n risposte relative ad n insiemi diversi degli r predittori, allora gli stimatori dei minimi quadrati dei parametri di regressione $\beta_0, ..., \beta_r$ sono le scelte $B_0, ...B_r$ che minimizzano il termine

$$\sum_{i=1}^{n} e_i^2$$

dove

$$e_i = y_i - \hat{y}_i$$

con y_i risposta vera e $\hat{y}_i = B_0 + B_1 x_{i1} + ... + B_r x_{ir}$ risposta stimata.

11.7 Regressione logistica (cenni)

La regressione logistica (o anche modello logit) è un modello di regressione non lineare in cui si vuole modellare la relazione tra una variabile dipendente qualitativa Y di tipo dicotomico (cioè 0/1, SI'/NO) ed una o più variabili indipendenti $x_1, ..., x_r$ che si ritiene possano influenzarla.

L'obiettivo è stabilire la probabilità con cui un insieme di dati possa generare uno o l'altro valore di Y (cioè $Y = 0$ o $Y = 1$). Nel caso più semplice di un solo valore indipendente x, il modello lineare non risulta appropriato poichè:

$$P[Y|x] = \alpha + \beta x$$

e il secondo membro varia nell'intervallo $(-\infty, +\infty)$, mentre il primo membro, per definizione di probabilità, varia in $[0, 1]$.

Si usa perciò come modello

$$p = P[Y|x] = \frac{e^{\alpha+\beta x}}{1 + e^{\alpha+\beta x}}$$

dove il secondo membro ora varia in $[0, 1]$.

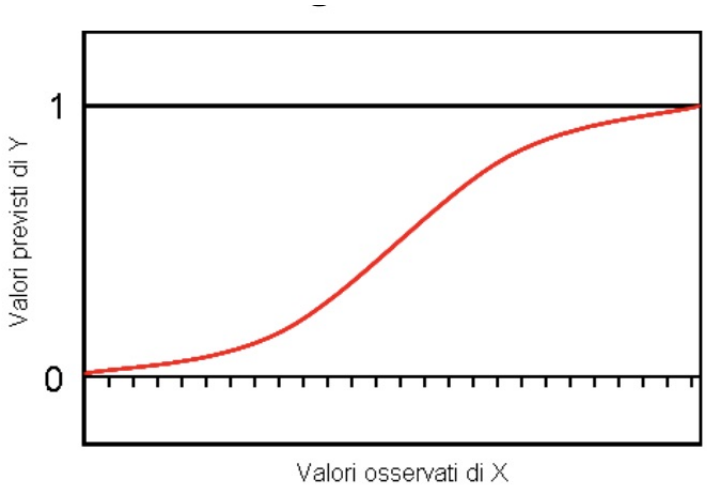

Figura 4: modello logistico

Si considera poi la funzione

$$\text{logit}\, P[Y|x] = \ln(\frac{p}{1-p}) = \ln e^{\alpha+\beta x} = \alpha + \beta x$$

che ha il vantaggio di essere più facile da trattare, poichè è lineare.