Statistica bivariata, correlazione, aggiustamento coi minimi quadrati, regressione

Statistica (Tossicologia dell'Ambiente)

AA2007/08

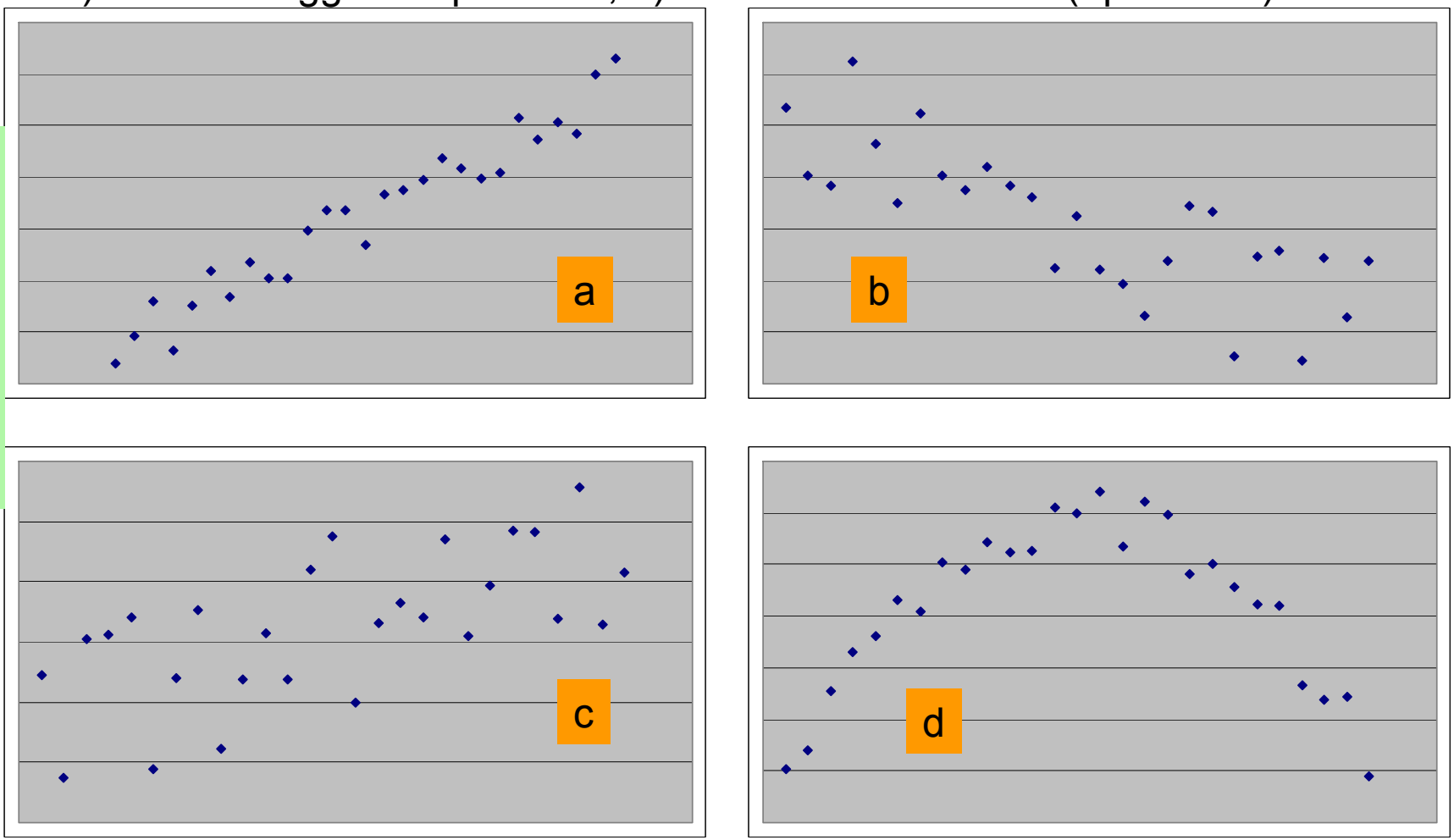
vers.2

regressione

- supponiamo di avere due variabili (di cui una almeno aleatoria) che campioniamo insieme, la regressione riguarda la relazione fra le due variabili – per es. è una tecnica per descrivere una relazione fra le variabili
- la regressione lineare nei coefficienti può essere usata per trovare i coefficienti della relazione fra le due variabili – caso semplice, in particolare consideriamo l'es. di due coefficienti (una retta)
- un problema analogo è dato dall'adattamento di una legge o curva teorica ai dati (o dal confronto di dati con distribuzioni a priori): si tratta di trovare i parametri della curva che meglio si adattano ai dati [minimi quadrati]
- si ottengono le stesse formule nei due casi

esempi di relazione fra 2 variabili aleatorie

a) relazione ~lineare positiva; b) idem negativa, maggiore dispersione;
c) ancora maggior dispersione; d) relazione non lineare (~parabola)



minimi quadrati

- consideriamo ad es. la sperimentazione di un farmaco, le due variabili da mettere in relazione possono essere il tempo medio di guarigione, $\underline{t}_i$ (aleatoria con dev. stand. s_i), ed il dosaggio di un farmaco, x_i (deterministica); i=1,2,...k dove k è il n.o di campioni di pazienti
- supponiamo di ipotizzare una relazione funzionale $\underline{t}_i \sim f(x_i;p_j)$ dove p_j con j=1,2,...n sono dei parametri a priori incogniti
- per trovare i parametri costruisco una 'distanza' fra variabile aleatoria (dati sperimentali) e modello

  $d^2 = \sum_{i=1}^{k}(\underline{t}_i - f(x_i;p_j))^2/s_i^2$
- la migliore scelta dei parametri sarà ottenuta quando la 'distanza' fra dati e modello è minima, matematicamente

  $\partial d^2/\partial p_j = 0$ dove ∂ indica la derivata rispetto ad un p_j tenendo gli altri fissi (derivata parziale) =► n eq. nelle n incognite =► semplici da risolvere nel caso di dipendenza lineare dai parametri =► ho i p_j

minimi quadrati – relazione lineare

- semplifico assumendo $s_i = s$, costante, per tutti i $\underline{t}_i$ (stesso peso) e semplifico le notazioni ponendo $T_i = \underline{t}_i$ e $X_i = \underline{x}_i$ (in gen. anche x_i potrebbe essere aleatoria)
- come modello (hp), in gen. $T_i = T(X_i)$, prendiamo ad es. una relazione lineare

$$T = mX + c$$

$$d^2 = \sum_1^k [T_i - (mX_i + c)]^2 / s^2 =$$

$$= \sum_1^k [T_i^2 - 2T_i(mX_i + c) + m^2X_i^2 + 2mcX_i + c^2] / s^2$$

dove m,c sono i coefficienti da determinare dal sistema formato da $\partial d^2/\partial m = 0$ e $\partial d^2/\partial c = 0$

- pongo $S_X = \sum_{i=1}^k X_i$; $S_T = \sum_{i=1}^k T_i$; $S_{TX} = \sum_{i=1}^k T_i X_i$; $S_{XX} = \sum_{i=1}^k X_i^2$ (e salto tutti i passaggi)

minimi quadrati - formule

- si ottiene per la pendenza e l'intercetta della retta interpolante

$$m = (kS_{XT} - S_X S_T)/(kS_{XX} - S_X S_X)$$

$$c = (S_{XX} S_T - S_{XT} S_X)/(kS_{XX} - S_X S_X)$$

NB usualmente la 2ª variabile è indicata con y

=> m,c ottimali (minima 'distanza')

- e se la relazione non è una retta?
  - relazione lineare nei parametri

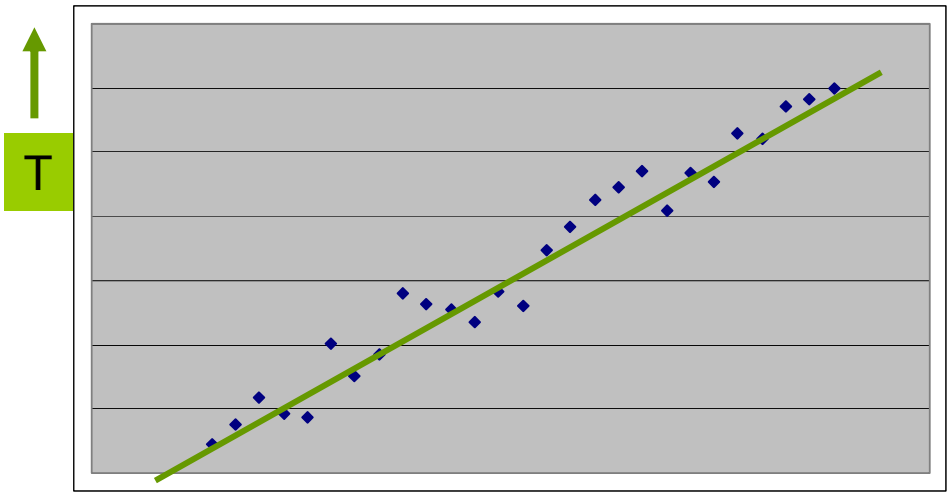
    $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$ =► n eq. in n incognite
  - relazioni linearizzabili prendendo il logaritmo
    - es.1 $z = z_0 e^{-mx}$ => $\ln(z) = \ln(z_0) - mx$

      pongo $y=\ln(z)$; $c= \ln(z_0)$ =► $y = c - mx$
    - es.2 $z = z_0 u^a$ => $\ln(z) = \ln(z0) + a\ln(u)$

      pongo $y=\ln(z)$; $c= \ln(z_0)$; $x=\ln(u)$ =► $y = c + ax$

    in entrambi i casi ottengo l'eq. di una retta per cui posso ottenere pendenza e intercetta ottimali (ricordandomi poi delle posizioni fatte!)

regressione – coefficiente di correlazione



k dati (X_i, T_i)

modello
$T = mX + c$

coefficiente di correlazione

$$r = [\sum(X_i-\underline{X})(T_i-\underline{T})/k]/[\sum(X_i-\underline{X})^2/k \cdot \sum(T_i-\underline{T})^2/k]^{1/2}$$

(si indica anche con ρ [pop.])

dove le $\sum$ vanno da 1 a k; il numeratore è la **covarianza** ed il denominatore contiene sotto radice il prodotto delle varianze; inoltre $\underline{X} = (\sum X_i)/k$; $\underline{T} = (\sum T_i)/k$ sono i valori medi di X e T

$-1 \le r \le +1$

regressione – coefficienti della retta

- assumendo il modello $T = mX + c$ la regressione al valor medio dà

$$m = [\sum(X_i-\underline{X})\cdot(T_i-\underline{T})/k]/[\sum(X_i-\underline{X})^2/k]$$

$$= [\sum X_i T_i - k\underline{XT}]/[\sum X_i^2 - k\underline{X}^2]$$

NB usualmente la 2ª variabile è indicata con y

cioè la covarianza divisa per la varianza di X, mentre c può essere ottenuto per sostituzione

$$c = \underline{T} - m\underline{X}$$

- m,c sono uguali a quelli ottenuti dai minimi quadrati con pesi uguali per la retta interpolante i dati (si può dimostrare); forniscono informazioni sul comportamento **in media** di una variabile al variare dell'altra => consentono di interpolare ed estrapolare (ad es. al futuro sulla base dell'andamento passato)

un esempio – n. divorzi vs anno

n. divorzi in Inghilterra e nel Galles

A(nno)	1975	1976	1977	1978	1979	1980
D(ivorzi) x1000	120.5	126.7	129.1	143.7	138.7	148.3

anche in questo caso solo una variabile è aleatoria (D) mentre l'altra (A) è deterministica, un modello ragionevole è una dipendenza lineare di D da A (retta di regressione)

$D = mA + c$ con c,m coefficienti da determinare

(l'eq. non può essere soddisfatta esattamente per tutte le coppie di dati visto che D è aleatoria)

conviene, per evitare grandi numeri, definire nuove variabili

$T = D - 120$

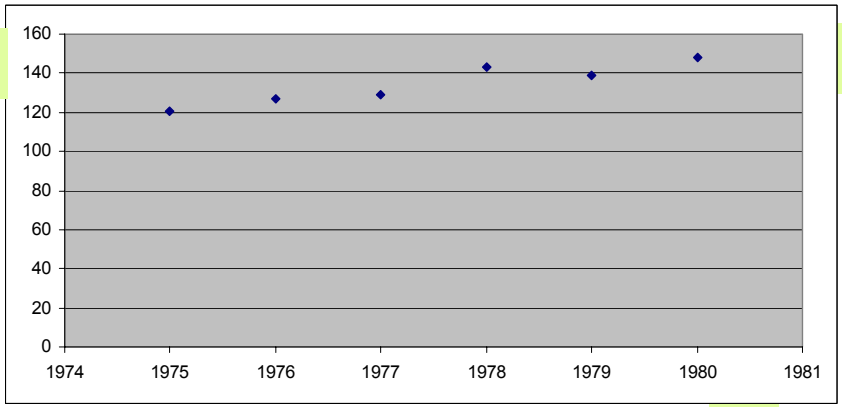
$X = A - 1975$

$T = mX + c'$

dove $c = c' - 1975m + 120$

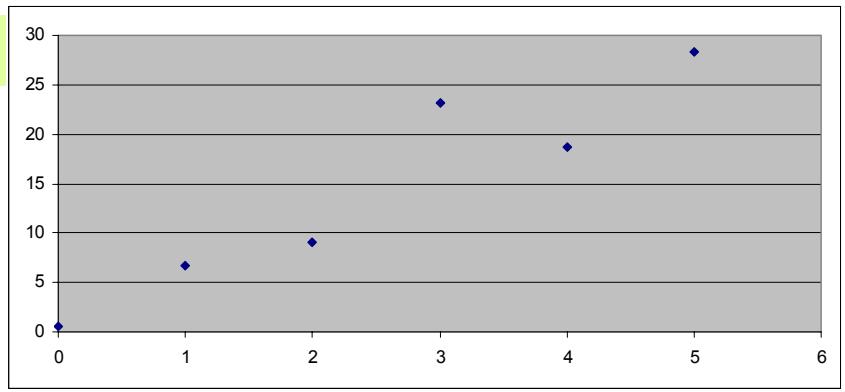
esempio divorzi – minimi quadrati

D



A

T



X

	X	T	XX	XT
	0	0.5	0	0
	1	6.7	1	6.7
	2	9.1	4	18.2
	3	23.1	9	69.3
	4	18.7	16	74.8
	5	28.3	25	141.5
∑	15	86.4	55	310.5

$m = (6 \cdot 310.5 - 15 \cdot 86.4)/(6 \cdot 55 - 15 \cdot 15) = 5.4$

$c' = (55 \cdot 86.4 - 310.5 \cdot 15)/(6 \cdot 55 - 15 \cdot 15) = 0.9$

$c = 0.9 - 1975 \cdot 5.4 + 120 = -10544.1$

Domanda D(2006)? D(2006) = 5.4·2006 – 10544.1 = 228.3 &tc.

esempio divorzi – regressione

- nelle variabili trasformate $\underline{X} = 15/6 = 2.5$; $\underline{T} = 86.4/6 = 14.4$

$m = [\sum(X_i-\underline{X})\cdot(T_i-\underline{T})/k]/[\sum(X_i-\underline{X})^2/k]$
$= [\sum X_iT_i-k\underline{XT}]]/[\sum X_i^2-k\underline{X}^2] = (310.5-6\cdot2.5\cdot14.4)/(55-6\cdot6.25)$
$= 5.4$ k divorzi/anno

come trovato coi minimi quadrati (il passaggio si ha semplificando k e ricordando che $\sum X_i = k\underline{X}$)

$m = [\sum(A_i-\underline{A})\cdot(D_i-\underline{D})/k]/[\sum(A_i-\underline{A})^2/k]$ è assolutamente inutile rifare i conti perchè $A_i-\underline{A} = X_i-\underline{X}$ e $D_i-\underline{D} = T_i-\underline{T}$!!
nelle variab. non trasformate è immediato ricavare c

$c = \underline{D}-m\underline{A} = 134.4-5.4\cdot1977.5 = -10544.1$divorzi

che corrisponde al valore all'anno 0

Retta di regressione – pressione vs altitudine

dati Aviazione Civile, $p=p_0e^{mz}$ - dipende esponenzialmente da z =► prima si deve linearizzare $\ln p = \ln p_0 + mz = c + mz$

	X		T	XT	XX
	z(m)	p(hPa)	ln p	z*ln p	z*z
	0	1013	6.9207	0	0
	2000	795	6.6783	13356.68	4000000
	4000	616	6.4232	25692.99	16000000
	6000	472	6.1570	36941.87	36000000
Σ	12000		26.1792	75991.55	56000000

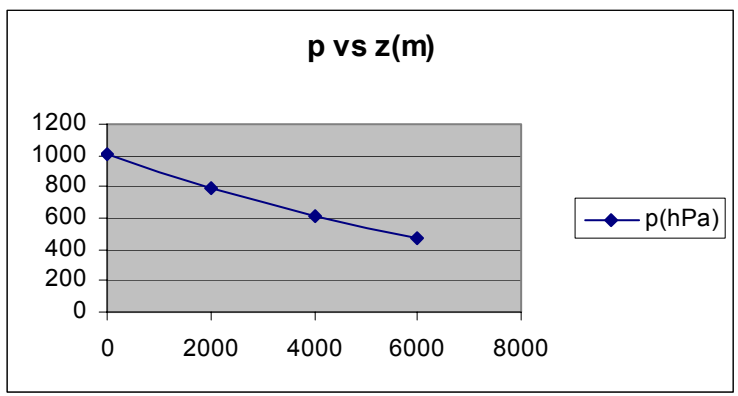
valore dalla regressione	
z	lineare
1000	904.20
5000	543.80

m = -0.0001273

c = 6.9267358 **p_0 =** 1019.162

$$m=(kS_{XT}-S_XS_T)/(kS_{XX}-S_X*S_X)$$

$$c=(S_{XX}S_T-S_{XT}S_X)/(kS_{XX}-S_X*S_X)$$



Retta di regressione – altitudine vs pressione

- ottenuti m, $c=\ln(p_0)$ abbiamo
  $p(z) = e^{c}\, e^{mz} = 1019.2e^{-0.0001273z}$
  NB $1019.2 \neq 1013 = p(0)$ nella tabella, a causa dell'aggiustamento che tiene conto degli altri 3 dati e della loro dispersione
- con i parametri *posso*(*) invertire e ottenere z(p)
  $z(p) = (6.927-\ln(p))/0.0001273$
  e calcolare per es.
  z(750hPa) = 2410 m
  &tc. ed una misura della pressione (differenza di p) può essere usata per misurare l'altitudine (la differenza di altitudine)

(*) ***N.B.*** in generale la regressione di z su p non dà gli stessi coefficienti dell'inversione della regressione di p su z (a meno che il coefficiente di correlazione non sia = ~±1, qui r = -0.9998)

Retta di regressione – esempio 3

ottenuto con Excel usando FORECAST(18;idi;mesi)

	X	T	XT	XX		
	mese	indice di inquinamento	m*idi	m^2	mese di riferimento	valore calcolato con regressione lineare
	1	254	254	1	18	57.30
	2	241	482	4		
	3	233	699	9		
	4	212	848	16		
	5	201	1005	25		
	6	195	1170	36		
	7	184	1288	49		
	8	172	1376	64		
	9	159	1431	81		
	10	147	1470	100		
	11	139	1529	121		
	12	128	1536	144		
Σ	78	2265	13088	650		

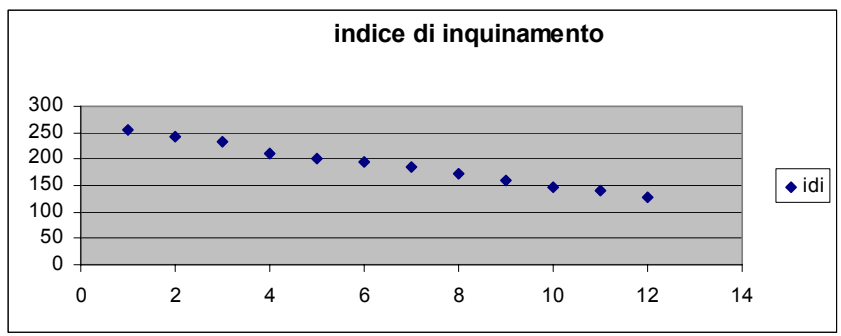
Indice di inquinamento di un lago in funzione del **tempo**, si vuole estrapolare la retta di regressione per trovare il momento in cui l'inquinamento è inferiore ad un certo valore per iniziare il ripopolamento del lago

m = -11.430

c = 263.045

idi(18) = 57.30

idi(t) = **c** + **m**t dove c, m sono ottenuti dalla retta di regressione, invertendo
t = (idi-**c**)/**m** e se ad es. voglio idi ≤ 50 avrò
t(50) = (50 – 263.05)/(-11.430) = 18m19g



uso della calcolatrice e del foglio elettronico

- in pratica in genere i calcoli coi minimi quadrati o la stima della retta di regressione non sono laboriosi se si usa una calcolatrice adatta (molte calc. scientifiche hanno statistica bidimensionale e regressione lineare)
- un foglio elettronico ha alcune funzioni che permettono di far immediatamente il calcolo, ad es. in Excel FORECAST(x;y-noti;x-noti) permette di calcolare il valore della retta nel punto x nuovo (estrapolato o interpolato) usando i valori noti delle coppie x_i,y_i (X_i,T_i nella ns. notazione), le coppie di numeri possono essere date singolarmente oppure ci si può riferire ad un gruppo contiguo di celle (vettore) ; altre funzioni calcolano m [SLOPE(y-noti,x-noti)] e c [INTERCEPT(y-noti,x-noti)]; il coefficiente di correlazione è calcolato con CORREL(vett1;vett2) che da la correlazione fra due insiemi di dati di uguale ampiezza

varianza dei parametri della retta

- (non fatto a lezione) m, c sono anch'essi aleatori visto che almeno una variabile lo è: se le varianze delle T_i sono costanti per tutti i dati (non dipendono da i), si può mostrare $\sigma_m^2 = \sum(T_i-\underline{T})^2\cdot(1-r^2)/[(k-2)\cdot\sum(X_i-\underline{X})^2]$
- (non fatto a lezione) le formule per σ_m^2 σ_c^2 sono ancora più noiose da calcolare con la calcolatrice. Excel ad es. ha la funzione LINEST(y_i;x_i;const;stats) che permette di fare i calcoli – const e stats sono due quantità logiche – const=false permette di fissare a 0 l'intercetta durante il calcolo mentre const=true ha c≠0, con const=stats=true si ottiene un quadro (array) di informazioni estraibile con un'altra funzione: INDEX(LINEST(y_i;x_i;true;true);2;1) dà ad es. σ_m &tc. (si veda l'help di Excel per ulteriori informazioni)
- attenzione quello che noi chiamiamo "c" in Excel vers. Inglese è chiamato "b" &tc. e questo è il meno!