Contenidos

- ▶ 5.1: Diagnóstico: Análisis de los residuos
- ▶ 5.2: La descomposición ANOVA (ANalysis Of VAriance)
- ▶ 5.3: Relaciones no lineales y transformaciones para linealización
- ▶ 5.4: El modelo de regresión lineal en forma matricial
- ▶ 5.5: Introducción a la regresión lineal múltiple

Bibliografía

- ▶ Newbold, P. Estadística para los Negocios y la Economía (1997).
 - Capítulos 12, 13 y 14
- ▶ Peña, D. Regresión y Diseño de Experimentos (2002).
 - Capítulos 5 y 6

5.1. Diagnóstico en regresión

- Supuestos teóricos del modelo de regresión lineal simple de una var. respuesta y sobre una var. explicativa x:
 - Linealidad: $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + u_i$, para $i = 1, \dots, n$
 - Homogeneidad: $\mathsf{E}\left[u_i\right] = \mathsf{0}$, para $i = 1, \dots, n$
 - Homocedasticidad: Var $[u_i] = \sigma^2$, para $i = 1, \ldots, n$
 - Independencia: u_i y u_j son independientes para $i \neq j$
 - Normalidad: $u_i \sim \text{Normal}(0, \sigma^2)$, para $i = 1, \dots, n$
- Los métodos de diagnóstico se utilizan para contrastar si tales supuestos son adecuados para los datos disponibles (x_i, y_i) ; se basan en el análisis de los residuos $e_i = y_i \widehat{y}_i$

- ► El método más sencillo consiste en la observación visual del diagrama de puntos (x_i, y_i)
- ► A menudo, este sencillo pero potente método revela pautas que sugieren si el modelo teórico es o no adecuado
- Ilustraremos su uso con un ejemplo clásico. Consideremos los cuatro conjuntos de datos siguientes

TABLE 3-10 Four Data Sets

	A SET 1		A SET 2	
X	Y	X	Y	
10.0	8.04	10.0	9.14	
8.0	6.95	8.0	8.14	
13.0	7.58	13.0	8.74	
9.0	8.81	9.0	8.77	
11.0	8.33	11.0	9.26	
14.0	9.96	14.0	8.10	
6.0	7.24	6.0	6.13	
4.0	4.26	4.0	3.10	
12.0	10.84	12.0	9.13	
7.0	4.82	7.0	7.26	
5.0	5.68	5.0	4.74	
DATA SET 3		DATA SET 4		
X	Y	X	Y	
10.0	7.46	8.0	6.58	
8.0	6.77	8.0	5.76	
13.0	12.74	8.0	7.71	
9.0	7.11	8.0	8.84	
11.0	7.81	8.0	8.47	
14.0	8.84	8.0	7.04	
6.0	6.08	8.0	5.25	
4.0	5.39	19.0	12.50	
12.0	8.15	8.0	5.56	
7.0	6.42	8.0	7.91	
5.0	5.73	8.0	6.89	

SOURCE: F. J. Anscombe, op. cit.

- Para cada uno de los cuatro conjuntos de datos anteriores, se obtiene el mismo modelo estimado de regresión lineal:
- $\hat{y}_i = 3.0 + 0.5x_i$
- ightharpoonup n = 11, $\bar{x} = 9.0$, $\bar{y} = 7.5$, $r_{x,y} = 0.817$
- ightharpoonup El error estándar estimado del estimador \hat{eta}_1 ,

$$\sqrt{\frac{s_R^2}{(n-1)s_x^2}},$$

toma el valor 0.118. El estadístico $\it T$ correspondiente toma el valor $\it T=0.5/0.118=4.237$

➤ Sin embargo, los diagramas de puntos correspondientes revelan que los cuatro conjuntos de datos son cualitativamente muy diferentes: ¿Qué conclusiones podemos extraer de estos diagramas?

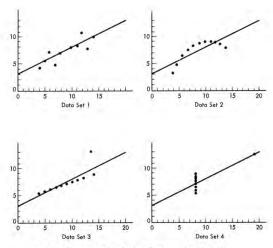


FIGURE 3-29 Scatterplots for the four data sets of Table 3-10 SOURCE: F. J. Anscombe, op cit.

5.1: análisis de los residuos

- Si la observación del diagrama de puntos no basta para descartar el modelo, se utilizan métodos de diagnóstico basados en el análisis de los residuos $e_i = y_i \hat{y}_i$
- El análisis comienza tipificando los residuos (dividiéndolos por la cuasi-desviación típica residual): Las cantidades resultantes se denominan residuos tipificados:

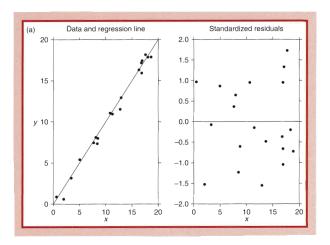
$$\frac{e_i}{s_R}$$

- Bajo los supuestos del modelo de regresión lineal, los residuos tipificados son aproximadamente variables aleatorias normales estándar independientes
- Un gráfico de los residuos tipificados no debería mostrar ninguna pauta clara

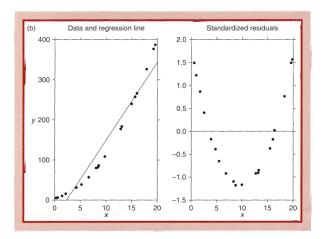
5.1: Diagramas de residuos

- ▶ Hay varios tipos de diagramas de residuos. Los más comunes son:
 - Diagrama de los residuos vs. x
 - Diagrama de los residuos vs. \hat{y}
- Las desviaciones de los supuestos del modelo dan lugar a pautas, que se pueden identificar visualmente

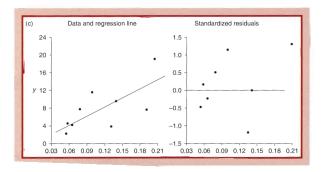
5.1: Ej: consistencia con el modelo teórico



5.1: Ej: No linealidad



5.1: Ej: Heterocedasticidad



5.1: Datos atípicos

- A partir del gráfico de la recta de regresión podemos observar datos atípicos, que presentan desviaciones sustanciales de la recta de regresión
- Los estimadores $\widehat{\beta}_0$ y $\widehat{\beta}_1$ de los parámetros de la recta de regresión son muy sensibles a tales datos atípicos
- Por ello, es importante identificar tales datos y comprobar si son válidos
- ► Veremos que Statgraphics permite mostrar los datos que producen "Unusual Residuals", así como "Influential Points"

5.1: Normalidad de los errores

- ► Recordemos que uno de los supuestos teóricos del modelo de regresión lineal es que los errores tienen una distribución normal
- ▶ Podemos comprobar este supuesto visualmente a partir de la observación y análisis de los residuos e_i, empleando varios métodos:
 - ▶ Observación del histograma de frecuencias de los residuos
 - Observación de un "Normal Probability Plot" para los residuos (desviaciones importantes de los datos de la línea recta en este gráfico indican desviaciones sustanciales del supuesto de normalidad)

5.2: La descomposición ANOVA

- ANOVA: ANalysis Of VAriance
- ▶ Al ajustar un modelo de regresión lineal $\widehat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_i$ a un conjunto de datos (x_i, y_i) , para $i = 1, \ldots, n$, podemos distinguir tres fuentes de variación en las respuestas:
 - variación debida al modelo: $SCM = \sum_{i=1}^n (\widehat{y_i} \overline{y})^2$, donde las siglas "SC" se refieren a "suma de cuadrados", y la "M" se refiere al "Modelo"
 - variación residual: $SCR = \sum_{i=1}^{n} (y_i \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} e_i^2$
 - variación total: SCT = $\sum_{i=1}^{n} (y_i \bar{y})^2$
- ▶ La descomposición ANOVA indica que SCT = SCM + SCR

5.2: El coeficiente de determinación R^2

- ▶ La descomposición ANOVA indica que SCT = SCM + SCR
- ▶ Notemos que: $y_i \overline{y} = (y_i \widehat{y}_i) + (\widehat{y}_i \overline{y})$
- ▶ SCM = $\sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i \bar{y})^2$ mide la variación de las respuestas debida a la regresión (explicada por los valores predichos \hat{y})
- ▶ Por lo tanto, el cociente SCR/SCT es la proporción de variación de la respuesta no explicada por la regresión
- ▶ El cociente $R^2 = SCM/SCT = 1 SCR/SCT$ es la proporción de variación de las respuestas explicada por la regresión; se conoce como coeficiente de determinación
- ▶ Resultado: $R^2 = r_{xy}^2$ (coef. de correlación al cuadrado)
- ▶ Ej: si $R^2 = 0.85$, la variable x explica un 85% de la variación de la variable y

5.2: Tabla ANOVA

Fuente de variación	SC	G.L.	Media	Cociente F
Modelo	SCM	1	SCM/1	SCM/s_R^2
Residuos/Errores	SCR	n-2	$SCR/(n-2)=s_R^2$	
Total	SCT	n-1		

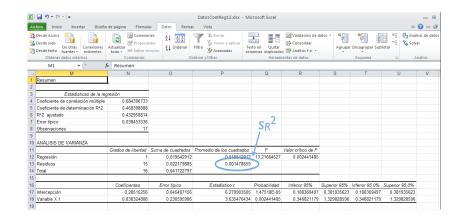
5.2: Contraste de hipótesis ANOVA

- ▶ Contraste de hipótesis H_0 : $\beta_1 = 0$ vs. H_1 : $\beta_1 \neq 0$
- Consideremos el cociente

$$F = \frac{\text{SCM}/1}{\text{SCR}/(n-2)} = \frac{\text{SCM}}{s_R^2}$$

- ▶ Bajo H_0 , F sigue una distribución $F_{1,n-2}$
- ▶ Contraste a nivel α : rechazar H_0 si $F > F_{1,n-2;\alpha}$

5.2: Ej. ANOVA



5.3: Relaciones no lineales y linealización

▶ Supongamos que la parte determinista $f(x_i; a, b)$ de la respuesta en el modelo

$$y_i = f(x_i; a, b) + u_i, \quad i = 1, ..., n$$

es una función no lineal de x que depende de dos parámetros a y b (ej: $f(x; a, b) = ab^x$)

- ► En algunos casos podemos aplicar transformaciones a los datos para linearizarlos, y así poder aplicar los métodos de regresión lineal
- A partir de los datos (x_i, y_i) originales, obtenemos los datos transformados (x'_i, y'_i)
- Los parámetros β_0 y β_1 de la relación lineal entre las x_i' y las y_i' se obtienen como transformaciones de los parámetros a y b

5.3: Transformaciones para linealización

- Ejemplos de transformaciones para linealización:
 - Si $y = f(x; a, b) = ax^b$ entonces $\log y = \log a + b \log x$: tomamos $y' = \log y$, $x' = \log x$, $\beta_0 = \log a$, $\beta_1 = b$
 - ► Si $y = f(x; a, b) = ab^x$ entonces $\log y = \log a + (\log b)x$: tomamos $y' = \log y$, x' = x, $\beta_0 = \log a$, $\beta_1 = \log b$
 - ▶ Si y = f(x; a, b) = 1/(a + bx) entonces 1/y = a + bx: tomamos y' = 1/y, x' = x, $\beta_0 = a$, $\beta_1 = b$
 - ▶ Si $y = f(x; a, b) = \ln(ax^b)$ entonces $y = \ln a + b \ln x$: tomamos $y' = y, x' = \ln x, \beta_0 = \ln a, \beta_1 = b$

5.4: Regresión lineal en forma matricial

▶ Recordemos el modelo de regresión lineal simple:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + u_i, \quad i = 1, ..., n$$

Escribiendo una ecuación para cada observación obtenemos

$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_1 + u_1$$

$$y_2 = \beta_0 + \beta_1 x_2 + u_2$$

$$\vdots \vdots$$

$$y_n = \beta_0 + \beta_1 x_n + u_n$$

5.4: Regresión lineal en forma matricial

▶ En forma matricial, podemos escribir

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 + \beta_1 x_1 \\ \beta_0 + \beta_1 x_2 \\ \vdots \\ \beta_0 + \beta_1 x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix},$$

o, separando los parámetros β_j de las x_i ,

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & & \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix},$$

5.4: Regresión lineal en forma matricial

Escribimos la relación matricial

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix},$$

como

$$y = X\beta + u$$

 y : vector de respuestas; X : matriz de variables explicativas (o del diseño experimental); β : vector de parámetros; u : vector de errores

5.4: La matriz de covarianzas de los errores

▶ Denotamos por $Cov(\mathbf{u})$ la matriz $n \times n$ de covarianzas de los errores; su elemento (i,j) es

$$cov(u_i, u_j) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ Var[u_i] = \sigma^2 & \text{si } i = j \end{cases}$$

▶ $Cov(\mathbf{u})$ es la matriz identidad $\mathbf{I}_{n \times n}$ multiplicada por σ^2 :

$$\operatorname{Cov}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma^2 \end{bmatrix} = \sigma^2 \mathbf{I}$$

5.4: Estimación de mínimos cuadrados

▶ El vector estimado $\widehat{\beta}$ de mínimos cuadrados es la solución única de la ecuación matricial 2×2 (comprueba las dimensiones)

$$(\mathbf{X}^T\mathbf{X})\,\widehat{\boldsymbol{eta}} = \mathbf{X}^T\mathbf{y},$$

es decir,

$$\widehat{oldsymbol{eta}} = \left(\mathbf{X}^{\mathcal{T}} \mathbf{X}
ight)^{-1} \mathbf{X}^{\mathcal{T}} \mathbf{y}$$

▶ El vector $\hat{\mathbf{y}} = (\hat{y}_i)$ de respuestas estimadas es

$$\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}$$

y el vector de residuos es $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \widehat{\mathbf{y}}$

5.5: El modelo de regresión lineal múltiple

- ▶ Modelo de regresión lineal simple: predecir una respuesta y a partir de una variable explicativa x
- ▶ En numerosas aplicaciones, buscamos predecir la respuesta y a partir de múltiples variables explicativas x_1, \ldots, x_k
- ► Ej: predecir el precio de una casa en función de su superficie, localización, planta, y número de baños
- Ej: predecir el tamaño de un parlamento en función de la población, su tasa de crecimiento, el número de partidos políticos con representación, etc.

5.5: El modelo de regresión lineal múltiple

- Modelo de regresión lineal múltiple: predecir una respuesta y a partir de múltiples variables explicativas x_1, \ldots, x_k
- ▶ Tenemos *n* observaciones: para i = 1, ..., n,

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + u_i$$

Suponemos que las u_i son v.a. independientes con distribución $Normal(0, \sigma^2)$

5.5: Ajuste de mínimos cuadrados

▶ Tenemos n observaciones: para i = 1, ..., n,

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + u_i$$

▶ Buscamos ajustar a los datos $(x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{ik}, y_i)$ un hiperplano de la forma

$$\widehat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_{i1} + \widehat{\beta}_2 x_{i2} + \dots + \widehat{\beta}_k x_{ik}$$

- ▶ El residuo para la observación i es: $e_i = y_i \hat{y}_i$
- ▶ Utilizamos la estimación de los parámetros $\widehat{\beta}_j$ que minimiza la suma de los cuadrados de los residuos

5.5: Modelo en forma matricial

Escribimos la relación matricial

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix},$$

como

$$y = X\beta + u$$

y : vector de respuestas; X : matriz de variables explicativas (o del diseño experimental); β : vector de parámetros; u : vector de errores

5.5: Estimación de mínimos cuadrados de β

▶ El vector estimado $\widehat{\beta}$ de mínimos cuadrados es la solución única de la ecuación matricial $(k+1) \times (k+1)$ (comprueba las dimensiones)

$$\left(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X}\right)\widehat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{X}^{T}\mathbf{y},$$

como en el caso k = 1 visto anteriormente, es decir,

$$\widehat{oldsymbol{eta}} = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X}
ight)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

▶ El vector $\hat{\mathbf{y}} = (\hat{y}_i)$ de respuestas estimadas es

$$\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}$$

y el vector de residuos es $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \widehat{\mathbf{y}}$

5.5: Estimación de la varianza σ^2

Para el modelo de regresión lineal múltiple, estimamos la varianza σ^2 mediante la cuasi-varianza residual,

$$s_R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n e_i^2}{n-k-1},$$

que es un estimador insesgado (nótese que para regresión lineal simple el denominador vale n-2)

5.5: Distribución muestral de $\widehat{\beta}$

- ightharpoonup Bajo los supuestos del modelo, el estimador de mínimos cuadrados $\widehat{m{\beta}}$ del vector de parámetros ${m{\beta}}$ sigue una distribución normal multivariante
- $ightharpoonup \mathsf{E}\left[\widehat{eta}
 ight] = eta$ (i.e., es un estimador insesgado)
- lacktriangle La matriz de covarianzas de \widehat{eta} es $\mathsf{Cov}(\widehat{eta}) = \sigma^2 \left(\mathbf{X}^\mathsf{T} \mathbf{X} \right)^{-1}$
- ▶ Estimamos Cov $(\widehat{\boldsymbol{\beta}})$ por $s_R^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$
- La estimación de $Cov(\widehat{\beta})$ nos da estimaciones $s^2(\widehat{\beta}_j)$ de la varianza $Var(\widehat{\beta}_j)$; $s(\widehat{\beta}_j)$ es el error estándar del estimador $\widehat{\beta}_j$
- ▶ Al tipificar $\widehat{\beta}_j$ obtenemos: $\frac{\widehat{\beta}_j \beta_j}{s(\widehat{\beta}_j)} \sim t_{n-k-1}$ (t de Student)

5.5: Inferencia sobre los parámetros $\widehat{\beta}_j$

▶ Intervalo de confianza a nivel $1 - \alpha$ para β_j :

$$\widehat{\beta}_{j} \pm t_{n-k-1;\alpha/2} \, s(\widehat{\beta}_{j})$$

- ▶ Contraste de hipótesis a nivel α para $H_0: \beta_i = 0$ vs. $H_1: \beta_i \neq 0$
- ▶ Rechazar H_0 si $|T| > t_{n-k-1;\alpha/2}$, donde $T = \widehat{\beta}_j/s(\widehat{\beta}_j)$ es el estadístico de contraste

5.5: La descomposición ANOVA

- ANOVA: ANalysis Of VAriance
- Al ajustar un modelo de regresión lineal múltiple

$$\widehat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_{i1} + \dots + \widehat{\beta}_k x_{ik}$$

a un conjunto de datos $(x_{i1}, \ldots, x_{ik}, y_i)$, para $i = 1, \ldots, n$, podemos distinguir tres fuentes de variación en las respuestas:

- variación debida a la regresión: $SCM = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i \bar{y})^2$, donde las siglas "SC" se refieren a "suma de cuadrados", y la "M" se refiere al "Modelo"
- variación residual: $SCR = \sum_{i=1}^{n} (y_i \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} e_i^2$ variación total: $SCT = \sum_{i=1}^{n} (y_i \bar{y})^2$
- La descomposición ANOVA indica que SCT = SCM + SCR

5.5: El coeficiente de determinación R^2

- ▶ La descomposición ANOVA indica que SCT = SCM + SCR
- Notemos que: $y_i \overline{y} = (y_i \widehat{y}_i) + (\widehat{y}_i \overline{y})$
- ▶ SCM = $\sum_{i=1}^{n} (\widehat{y}_i \overline{y})^2$ mide la variación de las respuestas debida a la regresión (explicada por los valores predichos \widehat{y}_i)
- ▶ Por lo tanto, el cociente SCR/SCT es la proporción de variación de la respuesta no explicada por la regresión
- ▶ El cociente $R^2 = \text{SCM/SCT} = 1 \text{SCR/SCT}$ es la proporción de variación de las respuestas explicada por las variables explicativas; se conoce como coeficiente de determinación múltiple
- Resultado: $R^2 = r_{\widehat{y}y}^2$ (coef. de correlación al cuadrado)
- ▶ Ej: si $R^2 = 0.85$, las variables x_1, \ldots, x_k explican un 85% de la variación de la variable y

5.5: Tabla ANOVA

Fuente de variación	SC	G.L.	Media	Cociente F
Modelo	SCM	k	SCM/k	$(SCM/k)/s_R^2$
Residuos/Errores	SCR	n-k-1	$\frac{\mathrm{SCR}}{n-k-1} = s_R^2$	
Total	SCT	n-1		

5.5: Contraste de hipótesis ANOVA

- ► Consideremos el contraste de hipótesis H_0 : $\beta_1 = \beta_2 = \cdots = 0$ vs. H_1 : $\beta_i \neq 0$ para algún $j = 1, \dots, k$
- $ightharpoonup H_0$: la respuesta no depende de las x_i
- Consideremos el cociente

$$F = \frac{\text{SCM/}k}{\text{SCR/}(n-k-1)} = \frac{\text{SCM/}k}{s_R^2}$$

- ▶ Bajo H_0 , F sigue una distribución $F_{k,n-k-1}$
- ▶ Contraste a nivel α : rechazar H_0 si $F > F_{k,n-k-1;\alpha}$