Resumen Unidad 2 y 3

Christian Guanoquiza, Esteban Narea

Unidad 2

¿Qué es el aprendizaje estadístico?

El conjunto de datos de publicidad consta de las ventas de ese producto en 200 mercados diferentes, junto con los presupuestos de publicidad del producto en cada uno de esos mercados para tres medios diferentes: televisión, radio y periódicos.

En este escenario, los presupuestos publicitarios son variables de entrada mientras que las ventas son una variable de salida. Las variables de entrada normalmente se indican con el símbolo X, con un subíndice para distinguirlas. Entonces, X1 podría ser el presupuesto de televisión, X2 el presupuesto de radio y X3 el presupuesto de periódicos.

Aquí f es una función fija pero desconocida de X1,...,Xp, y es un término de error aleatorio, que es independiente de X y tiene media cero. En esta formulación, f representa la información sistemática que proporciona X sobre Y.

¿Por qué estimar f?

Hay dos razones principales por las que podemos desear estimar f: predicción e inferencia.

Predicción: En muchas situaciones, un conjunto de entradas X está fácilmente disponible, pero la salida Y no se puede obtener fácilmente.

Como ejemplo, suponga que X1,...,Xp son características de la muestra de sangre de un paciente que se pueden medir fácilmente en un laboratorio, y que Y es una variable que codifica el riesgo del paciente de sufrir una reacción adversa grave a un determinado droga. Es natural tratar de predecir Y utilizando X, ya que así podemos evitar administrar el fármaco en cuestión a pacientes que tienen un alto riesgo de una reacción adversa, es decir, pacientes para quienes la estimación de Y es alta.

¿Por qué el error irreducible es mayor que cero? La cantidad puede contener variables no medidas que son útiles para predecir Y: como no las medimos, f no puede usarlas para su predicción. La cantidad también puede contener una variación no medible. Por ejemplo, el

riesgo de una reacción adversa puede variar para un paciente determinado en un día determinado, según la variación en la fabricación del fármaco en sí o la sensación general de bienestar del paciente ese día.

Es importante tener en cuenta que el error irreducible siempre proporcionará un límite superior en la precisión de nuestra predicción para Y. Este límite es casi siempre desconocido en la práctica.

Inferencia

¿Qué predictores están asociados con la respuesta? A menudo sucede que solo una pequeña fracción de los predictores disponibles están sustancialmente asociados con Y. La identificación de los pocos predictores importantes entre un gran conjunto de posibles variables puede ser extremadamente útil, según la aplicación.

¿Se puede resumir adecuadamente la relación entre Y y cada predictor usando una ecuación lineal, o la relación es más complicada? Históricamente, la mayoría de los métodos para estimar f han adoptado una forma lineal. En algunas situaciones, tal suposición es razonable o incluso deseable. Pero a menudo la verdadera relación es más complicada, en cuyo caso un modelo lineal puede no proporcionar una representación precisa de la relación entre las variables de entrada y salida.

Aprendizaje Estadístico:

El objetivo es identificar a las personas que probablemente respondan positivamente a un correo, según las observaciones de las variables demográficas medidas en cada individuo. En este caso, las variables demográficas sirven como predictores y la respuesta a la campaña de marketing (ya sea positiva o negativa) sirve como resultado. ¿La empresa no está interesada en obtener una comprensión profunda de las relaciones entre cada predictor individual y la respuesta; en cambio, la empresa simplemente quiere predecir con precisión la respuesta utilizando los predictores.

Finalmente, algunos modelos podrían llevarse a cabo tanto para la predicción como para la inferencia. Por ejemplo, en un entorno inmobiliario, se puede tratar de relacionar los valores de las viviendas con datos como la tasa de criminalidad, la zonificación, la distancia a un río, la calidad del aire, las escuelas, el nivel de ingresos de la comunidad, el tamaño de las casas, etc. En este caso, ¡uno podría estar interesado en la asociación entre cada variable de entrada individual y el precio de la vivienda; por ejemplo, ¿cuánto más valdrá una casa si tiene vista al río?

Sí nuestro objetivo final es la predicción, la inferencia o una combinación de los dos, pueden ser apropiados diferentes métodos para estimar f.

¿Cómo estimamos f?

Proporcionamos una descripción general de estas características compartidas en esta sección. Siempre supondremos que hemos observado un conjunto de n puntos de datos diferentes.

Nuestro objetivo es aplicar un método de aprendizaje estadístico a los datos de entrenamiento para estimar la función desconocida f. En otras palabras, queremos encontrar una función ˆf tal que Y ˆf(X) para cualquier observación (X, Y). En términos generales, la mayoría de los métodos de aprendizaje estadístico para esta tarea se pueden caracterizar como paramétricos o no paramétricos. Ahora discutiremos brevemente estos dos tipos de enfoques.

Métodos paramétricos:

1. Primero, hacemos una suposición acerca de la forma funcional, o forma, de f. Por ejemplo, una suposición muy simple es que f es lineal en X.

2. Después de seleccionar un modelo, necesitamos un procedimiento que use los datos de entrenamiento para ajustar o entrenar el modelo. En el caso del modelo lineal (2.4), necesitamos estimar los parámetros 0, 1,..., p.

El enfoque basado en modelos que se acaba de describir se conoce como paramétrico, reduce el problema de estimar f a uno de estimar un conjunto de parámetros. Asumir una forma paramétrica para f simplifica el problema de estimar f porque generalmente es mucho más fácil estimar un conjunto de parámetros, como 0, 1,..., p en el modelo lineal.

Dado que hemos asumido una relación lineal entre la respuesta y los dos predictores, todo el problema de ajuste se reduce a estimar 0, 1 y 2, lo que hacemos usando la regresión lineal de mínimos cuadrados.

Métodos no paramétricos:

Buscan una estimación de f que se acerque lo más posible a los puntos de datos sin ser demasiado tosco o ondulado. Dichos enfoques pueden tener una gran ventaja sobre los enfoques paramétricos: al evitar la suposición de una forma funcional particular para f, tienen el potencial de adaptarse con precisión a una gama más amplia de formas posibles para f.

Por el contrario, los enfoques no paramétricos evitan por completo este peligro, ya que esencialmente no se hace ninguna suposición sobre la forma de f. Pero los enfoques no paramétricos tienen una gran desventaja: dado que no reducen el problema de estimar f a un pequeño número de parámetros, se requiere una gran cantidad de observaciones (mucho más de lo que normalmente se necesita para un enfoque paramétrico) en para obtener una estimación precisa de f.

El ajuste no paramétrico ha producido una estimación muy precisa de la verdadera f que se muestra en la figura 2.3. Para ajustar una spline de placa delgada, el analista de datos debe seleccionar un nivel de suavidad. La figura 2.6 muestra el mismo ajuste estriado de placa delgada con un nivel más bajo de suavidad, lo que permite un ajuste más basto.

La compensación entre la precisión de la predicción y la interpretabilidad del modelo:

La regresión lineal es un enfoque relativamente inflexible, porque solo puede generar funciones lineales como las líneas.

Uno podría razonablemente hacerse la siguiente pregunta: ¿por qué elegiríamos usar un método más restrictivo en lugar de un enfoque muy flexible?

Si estamos interesados principalmente en la inferencia, entonces los modelos restrictivos son mucho más interpretables. Por ejemplo, cuando el objetivo es la inferencia, el modelo lineal puede ser una buena opción, ya que será muy fácil comprender la relación entre Y y X1, X2,...,Xp.

Los GAM son más flexibles que la regresión lineal. También son algo menos interpretables que la regresión lineal, porque la relación entre cada predictor y la respuesta ahora se modela mediante una curva. Por último, los métodos totalmente no lineales, como embolsado, impulso, máquinas de vectores de soporte con núcleos no lineales y redes neuronales (aprendizaje profundo).

Si buscamos desarrollar un algoritmo para predecir el precio de una acción, nuestro único requisito para el algoritmo es que prediga con precisión, la interpretabilidad no es una preocupación. En este escenario, podríamos esperar que sea mejor usar el modelo más flexible disponible.

Aprendizaje supervisado versus no supervisado:

Deseamos ajustar un modelo que relacione la respuesta con los predictores, con el objetivo de predecir con precisión la respuesta para futuras observaciones (predicción) o comprender mejor la relación entre la respuesta y los predictores (inferencia).

Por el contrario, el aprendizaje no supervisado describe la situación algo más desafiante en la que para cada observación i = 1,...,n, observamos un vector de medidas xi pero ninguna respuesta asociada yi. No es posible ajustar un modelo de regresión lineal, ya que no hay una variable de respuesta que predecir. En este escenario, en cierto sentido estamos trabajando a ciegas, la situación se denomina no supervisada porque carecemos de una variable de respuesta que pueda supervisar nuestro análisis. ¿Qué tipo de análisis estadístico es posible? Podemos buscar comprender las relaciones entre las variables o entre las observaciones.

Hemos trazado 150 observaciones con medidas en dos variables, X1 y X2. Cada observación corresponde a uno de tres grupos distintos. Con fines ilustrativos, hemos trazado los miembros de cada grupo utilizando diferentes colores y símbolos.

Muchos problemas caen naturalmente en los paradigmas de aprendizaje supervisado o no supervisado. Sin embargo, a veces la cuestión de si un análisis debe considerarse supervisado o no supervisado es menos clara. Por ejemplo, supongamos que tenemos un conjunto de n observaciones.

Deseamos utilizar un método de aprendizaje estadístico que pueda incorporar las m observaciones para las que se dispone de medidas de respuesta, así como las n – m observaciones para las que no lo están. Aunque este es un tema interesante, está más allá del alcance de este libro.

Evaluación de la precisión del modelo:

¿Por qué es necesario introducir tantos enfoques diferentes de aprendizaje estadístico, en lugar de un único método óptimo? No hay comida gratis en estadística: ningún método domina a todos los demás sobre todos los conjuntos de datos posibles. En un conjunto de datos en particular, un método específico puede funcionar mejor, pero algún otro método puede funcionar mejor en un conjunto de datos similar pero diferente.

Medición de la calidad del ajuste:

Pero, en general, no nos importa realmente qué tan bien funciona el método en los datos de entrenamiento. Más bien, estamos interesados en la precisión de las predicciones que obtenemos cuando aplicamos nuestro método a datos de prueba nunca vistos. ¿Por qué es esto lo que nos importa? Supongamos que estamos interesados en desarrollar un algoritmo para predecir el precio de una acción en función de los rendimientos de acciones anteriores. Podemos entrenar el método utilizando rendimientos de acciones de los últimos 6 meses. Pero realmente no nos importa qué tan bien nuestro método predice el precio de las acciones de la semana pasada.

Desafortunadamente, hay un problema fundamental con esta estrategia: no hay garantía de que el método con el MSE de entrenamiento más bajo también tenga el MSE de prueba más bajo. En términos generales, el problema es que muchos métodos estadísticos estiman específicamente los coeficientes para minimizar el MSE del conjunto de entrenamiento. Para estos métodos, el MSE del conjunto de entrenamiento puede ser bastante pequeño, pero el MSE de prueba suele ser mucho mayor.

Conocemos la verdadera función f, por lo que también podemos calcular el MSE de prueba sobre un conjunto de prueba muy grande, como una función de flexibilidad. (Por supuesto, en general f es desconocido, por lo que esto no será posible).

Esta es una propiedad fundamental del aprendizaje estadístico que se mantiene independientemente del conjunto de datos en cuestión y del método estadístico que se utilice. A medida que aumenta la flexibilidad del modelo, el MSE de entrenamiento disminuirá, pero es posible que no lo haga el MSE de prueba. Cuando un método dado produce un MSE de entrenamiento pequeño pero un MSE de prueba grande, se dice que estamos sobre ajustando los datos.

Independientemente de si se ha producido o no un sobreajuste, casi siempre esperamos que el MSE de entrenamiento sea más pequeño que el MSE de prueba porque la mayoría de los métodos de aprendizaje estadístico ya sea directa o indirectamente, buscan minimizar el MSE de entrenamiento. El sobreajuste se refiere específicamente al caso en el que un modelo menos flexible habría producido un MSE de prueba más pequeño.

La compensación entre sesgo y varianza:

¿Qué queremos decir con la varianza y el sesgo de un método de aprendizaje estadístico? La varianza se refiere a la cantidad por la cual ˆf cambiaría si lo estimamos utilizando un conjunto de datos de entrenamiento diferente. Dado que los datos de entrenamiento se utilizan para ajustarse al método de aprendizaje estadístico, diferentes conjuntos de datos de entrenamiento darán como resultado un ˆf diferente. Pero idealmente, la estimación de f no debería variar demasiado entre los conjuntos de entrenamiento.

Por otro lado, el sesgo se refiere al error que se introduce al aproximar un problema de la vida real, que puede ser extremadamente complicado, por un modelo mucho más simple. Por ejemplo, la regresión lineal supone que existe una relación lineal entre Y y X1, X2,...,Xp.

En una situación de la vida real en la que no se observa f, generalmente no es posible calcular explícitamente el MSE, el sesgo o la varianza de la prueba para un método de aprendizaje estadístico.

Sin embargo, siempre se debe tener en cuenta la compensación entre sesgo y varianza. En este libro exploramos métodos que son extremadamente flexibles y, por lo tanto, pueden eliminar esencialmente el sesgo. Sin embargo, esto no garantiza que superen a un método mucho más simple como la regresión lineal. Para tomar un ejemplo extremo, suponga que la verdadera f es lineal.

La configuración de clasificación:

Muchos de los conceptos que hemos encontrado, como el equilibrio entre sesgo y varianza, se transfieren al entorno de clasificación con solo algunas modificaciones debido al hecho de que yi ya no es cuantitativo. Suponga que buscamos estimar f sobre la base de observaciones de entrenamiento {(x1, y1),...,(xn, yn)}, donde ahora y1,...,y n son cualitativas.

El clasificador bayesiano:

Para cada valor de X1 y X2, existe una probabilidad diferente de que la respuesta sea naranja o azul. Dado que se trata de datos simulados, sabemos cómo se generaron los datos y podemos calcular las probabilidades condicionales para cada valor de X1 y X2. La región sombreada en naranja refleja el conjunto de puntos para los que Pr (Y = naranja|X) es superior al 50 %, mientras que la región sombreada en azul indica el conjunto de puntos para los que la probabilidad es inferior al 50 %. La línea discontinua morada representa los puntos donde la probabilidad es exactamente del 50 %. Esto se llama el límite de decisión de Bayes. La predicción del clasificador de Bayes está determinada por el límite de decisión de Bayes, una observación que cae en el lado naranja del límite se asignará a la clase naranja y, de manera similar, una observación en el lado azul del límite se asignará a la clase azul.

Kvecinos más cercanos:

Pero para datos reales, no conocemos la distribución condicional de Y dada X, por lo que calcular el clasificador de Bayes es imposible. Por lo tanto, el clasificador de Bayes sirve como un estándar de oro inalcanzable contra el cual comparar otros métodos.

A pesar del hecho de que es un enfoque muy simple, KNN a menudo puede producir clasificadores que están sorprendentemente cerca del clasificador óptimo de Bayes.

La siguiente figura muestra el límite de decisión de KNN, utilizando K = 10, cuando se aplica al conjunto de datos simulados más grande.

Evaluación de la precisión del modelo:

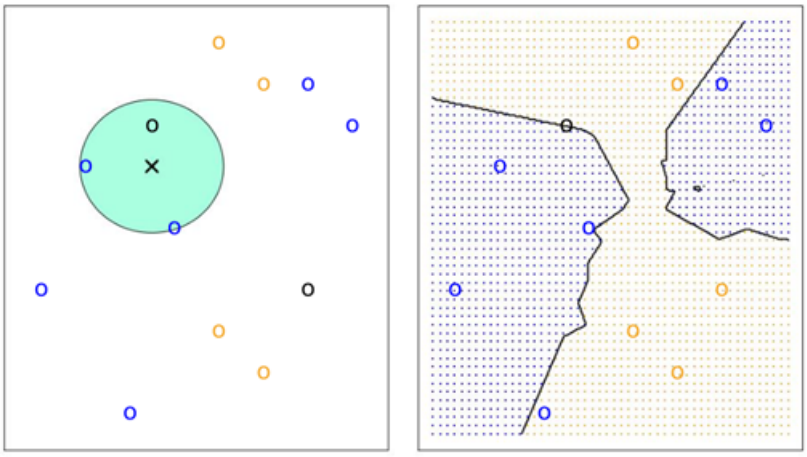


Figure 1: Límite de decisión de KNN, utilizando K = 10

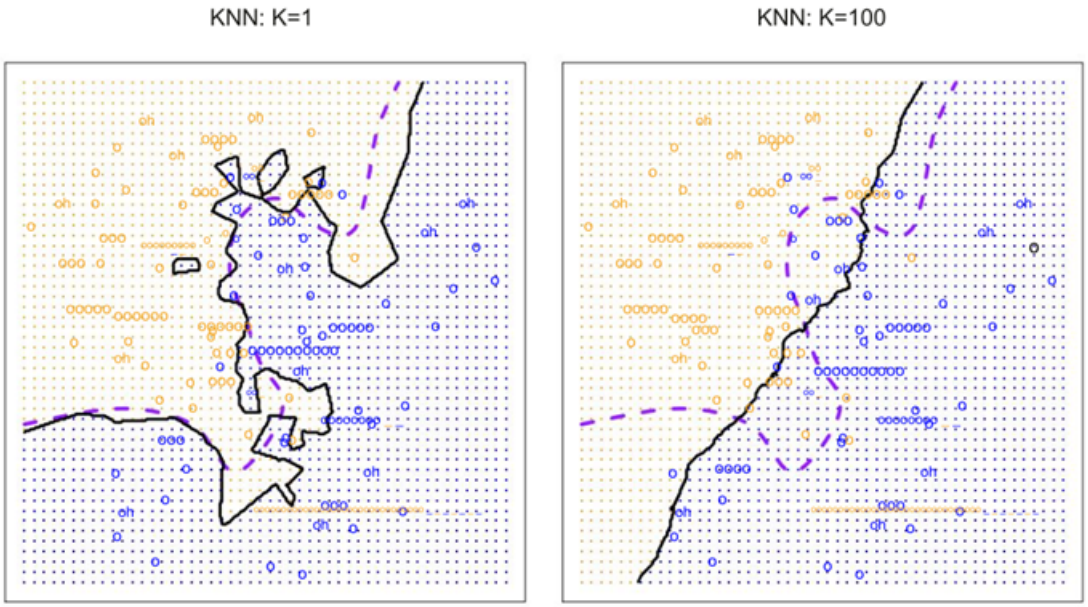


Figure 2: Presición del modelo

Al igual que en el escenario de regresión, no existe una fuerte relación entre la tasa de error de entrenamiento y la tasa de error de prueba. Con K = 1, la tasa de error de entrenamiento de KNN es 0, pero la tasa de error de prueba puede ser bastante alta. En general, a medida que usamos métodos de clasificación más flexibles, la tasa de error de entrenamiento disminuirá, pero es posible que no la tasa de error de prueba. Hemos trazado la prueba KNN y los errores de entrenamiento como una función de 1/ K. A medida que aumenta 1/K, el método se vuelve más flexible.

Tanto en la configuración de regresión como de clasificación, elegir el nivel correcto de flexibilidad es fundamental para el éxito de cualquier método de aprendizaje estadístico.

Laboratorio: Introducción a R:

Comandos básicos: R usa funciones para realizar operaciones. Para ejecutar una función llamada funcname, escribimos funcname(input1, input2), donde las entradas (o argumentos) input1 y input2 le indican a R cómo ejecutar la función. Una función puede tener cualquier número de entradas.

Al presionar la flecha hacia arriba varias veces, se mostrarán los comandos anteriores, que luego se pueden editar. Esto es útil ya que a menudo se desea repetir un comando similar. Además, escribir funcname siempre hará que R abra una nueva ventana de archivo de ayuda con información adicional sobre la función funcname ().

La función matrix () se puede utilizar para crear una matriz de números.

La función rnorm () genera un vector de variables normales aleatorias, con el primer argumento en el tamaño de la muestra. Cada vez que llamemos a esta función, obtendremos una respuesta diferente. Aquí creamos dos conjuntos de números correlacionados, x e y, y usamos la función cor () para calcular la correlación entre ellos.

Usamos set.seed () en todos los laboratorios cada vez que realizamos cálculos que involucran cantidades aleatorias. En general, esto debería permitir al usuario reproducir nuestros resultados. Sin embargo, a medida que estén disponibles nuevas versiones de R, pueden surgir pequeñas discrepancias entre este libro y el resultado de R.

Gráficos:

La función plot() es la forma principal de trazar datos en R. Por ejemplo, plot(x, y) produce un diagrama de dispersión de los números en x frente a los números en y. Hay muchas opciones adicionales que se pueden pasar a la función plot ().

La función seq() se puede utilizar para crear una secuencia de números. Por ejemplo, seq(a, b) hace un vector de números enteros entre a y b. Hay muchas otras opciones: por ejemplo, seq(0, 1, longitud = 10) crea una secuencia de 10 números que están igualmente espaciados entre 0 y 1.

La función image() funciona de la misma manera que contour(), excepto que produce un gráfico codificado por colores cuyos colores dependen del valor z . Esto se conoce como mapa de calor y, a veces, se usa para trazar la temperatura en los pronósticos meteorológicos.

Carga de datos:

Estos datos son parte de la biblioteca ISLR2 , discutida en el Capítulo 3. Para ilustrar la función read.table() , la cargamos ahora desde un archivo de texto, Auto.data, que puede encontrar en el sitio web del libro de texto. El siguiente comando cargará el archivo Auto.data en R y lo almacenará como un objeto llamado Auto, en un formato denominado marco de datos.

Este conjunto de datos en particular no se cargó correctamente porque R supuso que los nombres de las variables son parte de los datos y, por lo tanto, los incluyó en la primera fila. El conjunto de datos también incluye una serie de observaciones faltantes, indicadas por un signo de interrogación. Los valores faltantes son una ocurrencia común en conjuntos de datos reales.

Resúmenes gráficos y numéricos adicionales:

Podemos usar la función plot() para producir diagramas de dispersión de las variables cuantitativas. Sin embargo, simplemente escribir los nombres de las variables producirá un mensaje de error, porque R no sabe buscar en el conjunto de datos Auto para esas variables.

Junto con la función plot() , identify() proporciona un método interactivo útil para identificar el valor de una variable particular para puntos en un gráfico. Pasamos tres argumentos para identificar (): la variable del eje x, la variable del eje y y la variable cuyos valores nos gustaría ver impresos para cada punto. Luego, hacer clic en uno o más puntos en el gráfico y presionar Escape hará que R.

Una vez que hemos terminado de usar R, escribimos q() para apagarlo, o q() sale. Al salir de R, tenemos la opción de guardar el espacio de trabajo actual para que todos los objetos (como conjuntos de datos) que hemos creado en esta sesión de R estén disponibles la próxima vez. Antes de salir de R, es posible que deseemos guardar un registro de todos los comandos que escribimos en la sesión más reciente; esto se puede lograr usando la función savehistory() .

Unidad 3

Regresión lineal

La regresión lineal, una herramienta para predecir respuestas cuantitativas, es el punto de partida para nuevas técnicas, y muchas técnicas sofisticadas de aprendizaje estadístico pueden considerarse generalizaciones o extensiones de la regresión lineal.

Regresión lineal simple

Es un método directo enfocado para predecir una respuesta cuantitativa Y sobre la base de una única variable predictora X. Supone que existe una relación aproximadamente lineal entre X e Y. Matemáticamente, podemos escribir esta relación lineal como:

Y = ß0 + ß1 X

Algunas veces describiremos diciendo que estamos retrocediendo Y sobre X (o Y sobre X). ß0 y ß1 son dos constantes desconocidas que representan los términos de intersección y pendiente en el modelo lineal. Juntos, ß0 y ß1 se conocen como los coeficientes o parámetros del modelo. Una vez que hayamos utilizado nuestros datos de entrenamiento para producir estimaciones podemos predecir las ventas futuras sobre la base de un valor particular calculando.

yˆ = ßˆ0 + ßˆ1x

donde ˆy indica una predicción de Y sobre la base de X = x.

Estimación de los coeficientes

En la práctica, ß0 y ß1 son desconocidos. Por lo que, antes de que podamos usar predicciones, debemos usar datos para estimar los coeficientes dejar

(x1,y1),(x2,y2),...,(xn,yn),

representan n pares de observación, cada uno de los cuales consta de una medida de X y una medida de Y. En el ejemplo de publicidad, el conjunto de datos tiene el presupuesto de publicidad televisiva y las ventas de productos en n = 200 mercados diferentes, lo que queremos es obtener estimaciones de los coeficientes ßˆ0 y ßˆ1 de modo que el modelo linea se ajuste bien a los datos disponibles.

El i-th valor de respuesta observado y el i-th valor de respuesta que predice nuestro modelo lineal. Definimos la suma residual de cuadrados (RSS) como:

RSS = (y1−ßˆ0−ßˆ1x1) 2+(y2−ßˆ0−ßˆ1x2)2+ · · · + (yn−ßˆ0−ßˆ1xn) 2

La siguiente figura se muestra el ajuste de regresión lineal simple a los datos de publicidad, donde ßˆ0 = 7.03 y ßˆ1 = 0.0475. En otras palabras, de acuerdo con esta aproximación, $1,000 adicionales gastados en publicidad televisiva están asociados con la venta de aproximadamente 47.5 unidades adicionales del producto.

En cada gráfico, el punto rojo representa el par de estimaciones de mínimos cuadrados

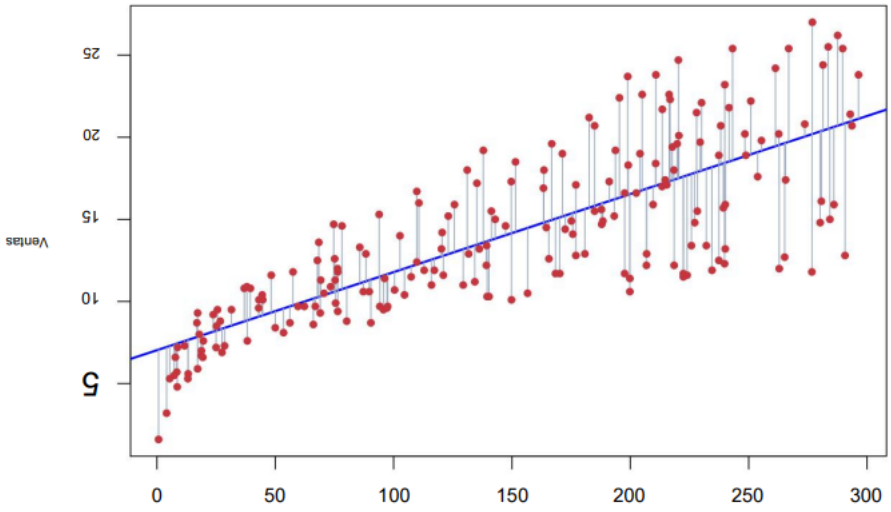


Figure 3: Regresion Lineal

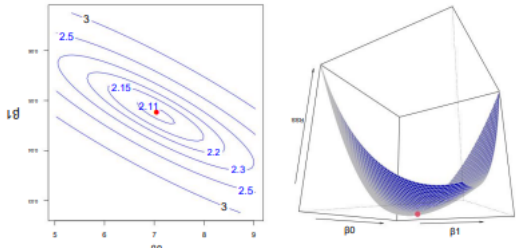


Figure 4: Gráficos de contorno y tridimensionales del RSS

Evaluación de la precisión de las estimaciones del coeficiente

Si f se va a aproximar mediante una función lineal, entonces podemos escribir esta relación como: Y = ß0 + ß1X + E

Aquí ß0 es el término de intersección, el término de error es un cajón de sastre para lo que echamos de menos con este modelo simple. la siguiente figura muestra la línea de mínimos cuadrados.

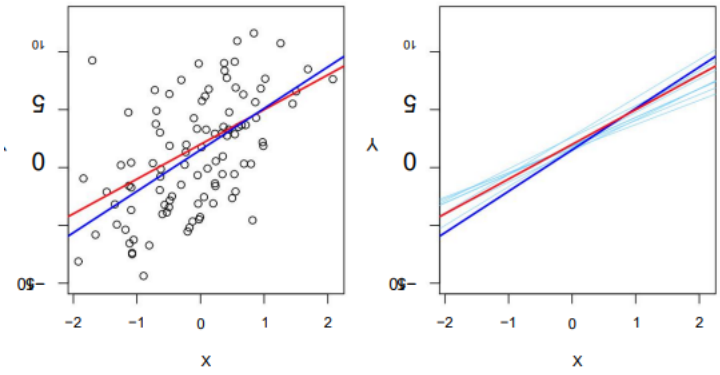


Figure 5: Línea de mínimos cuadrados

Un conjunto de datos simulado. Izquierda: La línea roja representa la verdadera relación, se conoce como la línea de regresión de población. La línea azul es la línea de mínimos cuadrados; es la estimación de mínimos cuadrados para f(X).Derecha: La línea de regresión de la población se muestra en rojo, la línea de mínimos cuadrados en azul oscuro y en azul claro, se muestran diez líneas de mínimos cuadrados.

Evaluación de la precisión del modelo

La calidad de un ajuste de regresión lineal generalmente se evalúa utilizando dos cantidades relacionadas: el error estándar residual y estadistico.

Error estándar residual

Debido a la presencia de términos de error, incluso si conociéramos la verdadera línea de regresión no seriamos capases de predecir perfectamente Y a partir de X. El RSE es una estimación de la desviación estándar de E, en generales es la cantidad promedio que la respuesta se esviará de la verdadera línea de regresión. Se calcula usando la fórmula.

$$\mathrm{RSE} = \sqrt{\frac{1}{n-2}\mathrm{RSS}} = \sqrt{\frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}.$$

El RSE se considera una medida de la falta de ajuste del modelo a los datos. Si las predicciones obtenidas con el modelo están muy cerca de los valores reales de los resultados será pequeño y podemos concluir que el modelo se ajusta muy bien los datos. Por otro lado, si está muy lejos entonces el RSE puede ser bastante grande, lo que indica que el modelo no se ajusta bien a los datos.

Estadística R2

El estadístico R2 proporciona una medida de ajuste alternativa. Toma la forma de una proporción: la proporción de la varianza por lo que siempre toma un valor entre 0 y 1, y es independiente de la escala de Y. Para calcularla se utiliza la siguiente fórmula

$$R^2 = \frac{\text{TSS} - \text{RSS}}{\text{TSS}} = 1 - \frac{\text{RSS}}{\text{TSS}}$$

Donde TSS sumatoria es la suma total de cuadrados y mide la varianza total en la respuesta Y y puede considerarse como la cantidad de variabilidad inherente a la respuesta antes de que se realice la regresión. Por el contrario, RSS mide la cantidad de variabilidad que queda sin explicar después de realizar la regresión. Por lo tanto, TSS − RSS mide la cantidad de variabilidad en la respuesta que se explica (o elimina) al realizar la regresión, y R2 mide la proporción de variabilidad en Y que se puede explicar usando X.

Regresión lineal múltiple

La regresión lineal simple es un enfoque útil para predecir una respuesta sobre la base de una única variable predictora. Sin embargo, en la práctica a menudo tenemos más de un predictor. un buen enfoque es extender el modelo de regresión lineal simple para que pueda acomodar directamente varios predictores. Podemos hacer esto dando a cada predictor un coeficiente de pendiente separado en un solo modelo.

Estimación de los coeficientes de regresión

Al igual que en el caso de la regresión lineal simple, los coeficientes de regresión ß0, ß1,..., ßp suelen ser desconocidos y deben estimarse. Dadas las estimaciones ßˆ0, ßˆ1,..., ßˆp, podemos hacer predicciones usando la fórmula.

yˆ= ßˆ0 + ßˆ1x1 + ßˆ2x2 + · · · + ßˆpxp

Los parámetros se estiman utilizando el mismo enfoque de mínimos cuadrados.

Los valores ßˆ0, ßˆ1,..., ßˆp son las estimaciones del coeficiente de regresión de mínimos cuadrados múltiples. A diferencia de las estimaciones de regresión lineal simple dadas, las estimaciones de coeficientes de regresión múltiple tienen formas algo complicadas que se representan más fácilmente usando álgebra matricial.

La figura 5 muestra una tabla que muestra las estimaciones del coeficiente de regresión múltiple cuando se utilizan los presupuestos de publicidad en televisión, radio y periódicos para predecir

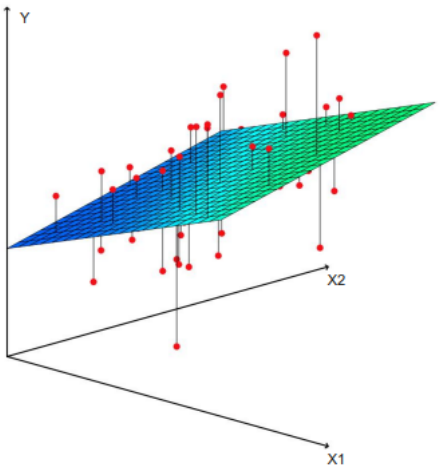


Figure 6: Plano

las ventas de productos utilizando los datos de publicidad . Interpretamos estos resultados de la siguiente manera: para una cantidad dada de publicidad en televisión y periódicos, gastar $1,000 adicionales en publicidad por radio está asociado con aproximadamente 189 unidades de ventas adicionales.

	Coefficient	Std. error	t-statistic	p-value
`Intercept`	2.939	0.3119	9.42	< 0.0001
`TV`	0.046	0.0014	32.81	< 0.0001
`radio`	0.189	0.0086	21.89	< 0.0001
`newspaper`	-0.001	0.0059	-0.18	0.8599

Figure 7: Estimaciones del coeficiente de regresión múltiple

Algunas preguntas importantes

Cuando realizamos una regresión lineal múltiple, generalmente nos interesa responder algunas preguntas importantes.

1. ¿Es útil al menos uno de los predictores X1, X2,...,Xp para predecir la respuesta?
2. ¿Todos los predictores ayudan a explicar la utilidad de los predictores Y?
3. ¿Qué tan bien se ajusta el modelo a los datos?
4. Dado un conjunto de valores predictores, ¿qué valor de respuesta deberíamos predecir? y ¿qué tan precisa es nuestra predicción?

¿Existe una relación entre la respuesta y los predictores?

En la configuración de regresión lineal simple, para determinar si existe una relación entre la respuesta y el predictor, simplemente podemos verificar si ß1 = 0. En la configuración de regresión múltiple con p predictores, debemos preguntarnos si todos los coeficientes de regresión son cero.

Decidir sobre variables importantes

El primer paso en un análisis de regresión múltiple es calcular el estadístico F y examinar el valor p asociado. Si concluimos sobre la base de ese valor p que al menos uno de los predictores está relacionado con la respuesta, entonces es natural preguntarse cuáles son los culpables. para encotnrarlos probar todos los subconjuntos posibles de los predictores es inviable. Por lo que se necesita un modelo automatizado y un enfoque eficiente para elegir un conjunto más pequeño de modelos a considerar. Hay tres enfoques clásicos para esta tarea:

Selección de reenvío. Comenzamos con el modelo nulo, un modelo que contiene unintercepto pero no predictores. Luego ajustamos p regresiones lineales simples y agregamos al modelo nulo la variable que resulta en el RSS más bajo. Luego agregamos a ese modelo la variable que resulta en el RSS más bajo para el nuevo modelo de dos variables. Este enfoque continúa hasta que se cumple alguna regla de parada.

Selección hacia atrás. Comenzamos con todas las variables del modelo y eliminamos la variable con el valor p más grande, es decir, la variable que es estadísticamente menos significativa. Se ajusta el nuevo modelo de variable (p − 1) y se elimina la variable con el valor p más grande. Este procedimiento continúa hasta que se alcanza una regla de parada.

Selección mixta. Esta es una combinación de selección hacia adelante y hacia atrás. Comenzamos sin variables en el modelo y, al igual que con la selección directa, agregamos la variable que proporciona el mejor ajuste. Continuamos agregando variables una por una, si en algún punto el valor p de una de lasvariables del modelo supera cierto umbral, eliminamos esa variable del modelo. Continuamos realizando estos pasos hacia adelante y hacia atrás hasta que todas las variables en el modelo tengan un valor p suficientemente bajo, y todas las variables fuera del modelo tendrían un valor p grande si se agregaran al modelo.

Ajuste del modelo

Dos de las medidas numéricas más comunes del ajuste del modelo son RSE y R2, la fracción de varianza explicada. Estas cantidades se calculan e interpretan de la misma manera que para la regresión lineal simple.

Recuerde que en la regresión simple, R2 es el cuadrado de la correlación de la respuesta y la variable. En la regresión lineal múltiple resulta que es igual a Cor(Y, Yˆ)ˆ2, el cuadrado de la correlación entre la respuesta y el modelo lineal ajustado; de hecho, una propiedad del modelo lineal ajustado es que maximiza esta correlación entre todos los modelos lineales posibles

Predicciones

Existen tres tipos de incertidumbre asociados a las predicción.

1. Las estimaciones del coeficiente ßˆ0, ßˆ1,..., ßˆp son estimaciones para ß0, ß1,..., ßp

La imprecisión en las estimaciones de los coeficientes está relacionada con el error reducible. Podemos calcular un intervalo de confianza para determinar qué tan cerca estará Yˆ de f(X).

2. En la práctica asumir un modelo lineal para f(X) es casi siempre una aproximación a la realidad, por lo que existe una fuente adicional de error potencialmente reducible que llamamos sesgo del modelo. Entonces, cuando usamos un modelo lineal, estamos estimando la mejor aproximación lineal a la superficie real. aunque aquí se ignora esta discrepancia y se opera como si el modelo lineal fuera correcto.
3. Incluso si conociéramos f(X), es decir, incluso si conociéramos los valores verdaderos de ß0, ß1,..., ßp, el valor de respuesta no se puede predecir perfectamente debido al error aleatorio.

Otras consideraciones en el modelo de regresión

Predictores cualitativos En la práctica a menudo algunos predictores son cualitativos. Por ejemplo, un conjunto de datos de crédito se registran variables para varios titulares de tarjetas de crédito, la respuesta es saldo y hay varios predictores cuantitativos: edad, tarjetas, educación, ingresos, límite, calificación, etc.

Predictores con solo dos niveles

Si un factor o variable cualitativa tiene solo dos niveles o valores posibles, podemos incluirla en el modelo como una variable dummy (toma dos valores numéricos). La decisión de cómo codificar los niveles del factor es arbitraria y no tiene efecto en el ajuste de la regresión, pero sí determina la interpretación de los coeficientes.

El valor del coeficiente de correlación ßj correspondiente a un nivel de una variable dummy (codificado como 1) indica el promedio con el que influye dicho nivel sobre la variable respuesta en comparación con el nivel de referencia no codificado como variable dummy (ß0).

Predictores cualitativos con más de dos niveles

En el caso de un predictor cualitativo con más de dos niveles, una sola variable dummy no puede representar todos los niveles posibles. En esta situación, podemos crear variables dummy adicionales. De nuevo, el nivel seleccionado como referencia es arbitrario.

Extensiones del Modelo Lineal

El modelo de regresión lineal estándar proporciona resultados interpretables y funciona bastante bien en muchos problemas del mundo real. Sin embargo, hace varios supuestos altamente restrictivos. Dos de los supuestos más importantes establecen que la relación entre los predictores y la respuesta es aditiva y lineal. La suposición de aditividad significa que la asociación entre un predictor X y la respuesta Y no depende de los valores de los otros predictores. La suposición de linealidad establece que el cambio en la respuesta Y asociado con un cambio de una unidad en Xj es constante, independientemente del valor de X. Examinamos brevemente algunos enfoques clásicos comunes para extender el modelo lineal.

Problemas potenciales

Cuando ajustamos un modelo de regresión lineal a un conjunto de datos en particular, pueden surgir muchos problemas. Los más comunes entre estos son los siguientes:

1. No linealidad de las relaciones respuesta-predictor.
2. Correlación de términos de error.
3. Varianza no constante de los términos de error.
4. Valores atípicos.
5. Puntos de alto apalancamiento.
6. Colinealidad.

No linealidad de los datos

El modelo de regresión lineal supone que hay una relación lineal entre los predictores y la respuesta. Si la verdadera relación está lejos de ser lineal, entonces todas las conclusiones que sacamos del ajuste son sospechosas. Los diagramas de residuos son una herramienta gráfica útil para identificar la no linealidad.

Si la gráfica residual indica que hay asociaciones no lineales en los datos, entonces un enfoque simple es usar transformaciones no lineales de los predictores, como log X, $\sqrt{}$ X y X^2, en el modelo de regresión.

Correlación de términos de error

Una suposición importante del modelo de regresión lineal es que los términos de error no están correlacionados. Los errores estándar que se calculan para los coeficientes de regresión estimados o los valores ajustados se basan en la suposición de términos de error no correlacionados. si los términos de error están correlacionados, podemos tener una sensación de confianza injustificada en nuestro modelo.

¿Por qué pueden ocurrir correlaciones entre los términos de error? Tales correlaciones ocurren con frecuencia en el contexto de datos de series de tiempo, que consisten en observaciones para

las cuales se obtienen mediciones en puntos discretos en el tiempo. En muchos casos, las observaciones que se obtienen en puntos de tiempo adyacentes tendrán errores positivamente correlacionados. Para determinar si este es el caso para un conjunto de datos determinado, podemos trazar los residuos de nuestro modelo en función del tiempo. Si los errores no están correlacionados, entonces no debería haber un patrón perceptible. Por otro lado, si los términos de error están positivamente correlacionados, podemos ver un seguimiento en los residuos.

Variación no constante de los términos de error

Otra suposición importante del modelo de regresión lineal es que los términos de error tienen una varianza constante. Los errores estándar, los intervalos de confianza y las pruebas de hipótesis asociadas con el modelo lineal se basan en esta suposición. Desafortunadamente, a menudo ocurre que las varianzas de los términos de error no son constantes.Las varianzas de los términos de error pueden aumentar con el valor de la respuesta. Se pueden identificar varianzas no constantes en los errores, o heteroscedasticidad, en etos problemas, una posible solución es transformar la respuesta Y utilizando una función cóncava como log Y o $\sqrt{}$ Y . Tal transformación da como resultado una mayor cantidad de reducción de las respuestas más grandes, lo que conduce a una reducción de la heteroscedasticidad.

Valores atípicos

Un valor atípico es un punto para el cual yi está lejos del valor predicho por el modelo. Los valores atípicos pueden surgir por una variedad de razones, como el registro incorrecto de una observación durante la recopilación de datos.Los gráficos residuales se pueden utilizar para identificar valores atípicos. Para abordar este problema, en lugar de graficar los residuos, podemos graficar los residuos estudentizados, calculados al dividir cada residuo ei por su error estándar estimado. Las observaciones cuyos residuos estudentizados son mayores que 3 en valor absoluto son posibles valores atípicos. Si creemos que se ha producido un valor atípico debido a un error en la recopilación o registro dedatos, entonces una solución es simplemente eliminar la observación. Sin embargo, se debe tener cuidado, ya que un valor atípico puede indicar una deficiencia en el modelo, como la falta de un predictor.

Altos puntos de apalancamiento

Las observaciones con alto apalancamiento tienen un valor inusual para xi, las observaciones de alto apalancamiento tienden a tener un impacto considerable en la línea de regresión estimada. Es motivo de preocupación si la línea de mínimos cuadrados se ve muy afectada por solo un par de observaciones, porque cualquier problema con estos puntos puede invalidar todo el ajuste. Por esta razón, es importante identificar observaciones de alto apalancamiento. En una regresión lineal simple, las observaciones de alto apalancamiento son bastante fáciles de identificar, ya que simplemente podemos buscar observaciones para las cuales el valor del predictor está fuera del rango normal de las observaciones.

Colinealidad

se refiere a la situación en la que dos o más variables predictoras están estrechamente relacionadas entre sí. Identificar y abordar los posibles problemas de colinealidad al ajustar el

modelo es de suma importancia para no tener problemas, una forma de detectar la colinealidad es observar la matriz de correlación de los predictores. Un elemento de esta matriz que es grande en valor absoluto indica un par de variables altamente correlacionadas y, por lo tanto, un problema de colinealidad en los datos. Desafortunadamente, no todos los problemas de colinealidad pueden detectarse mediante la inspección de la matriz de correlación: es posible que exista colinealidad entre tres o más variables incluso si ningún par de variables tiene una correlación particularmente alta. A esta situación la llamamos multicolinealidad.

En lugar de inspeccionar la matriz de correlación, una mejor manera de evaluar la colinealidad múltiple es calcular el factor de inflación de la varianza (VIF). El VIF es el cociente de la varianza de ßˆj cuando se ajusta el modelo completo dividido por la varianza de ˆj si se ajusta por sí solo. El valor más pequeño posible para VIF es 1, lo que indica la ausencia total de colinealidad. El VIF para cada variable se puede calcular usando la fórmula:

$$\mathrm{VIF}(\hat{\beta}_j) = \frac{1}{1 - R^2_{X_j|X_{-j}}},$$

Comparación de regresión lineal con K-vecinos más cercanos

La regresión lineal es un ejemplo de un método paramétrico porque asume una forma funcional lineal de f(X). La ventaja es que por lo general, son fáciles de configurar, ya que solo se necesita evaluar una pequeña cantidad de coeficientes. En el caso de la regresión lineal, los coeficientes son fáciles de interpretar y su significancia estadística puede probarse fácilmente. Pero los métodos paramétricos tienen un inconveniente: por diseño, hacen fuertes suposiciones sobre la forma de f(X). Si la forma de la función especificada está lejos de hecho, si nuestro objetivo es la precisión predictiva, los métodos paramétricos funcionarán mal. Por el contrario, los métodos no paramétricos no tienen una forma bien definida. Por lo tanto, la parametrización de f (X) proporciona una forma alternativa y más flexible realizar la regresión.

El método de regresión KNN está estrechamente relacionado con el clasificador KNN, . Dado un valor para K y un punto de predicción x0, la regresión KNN primero identifica las observaciones de entrenamiento K más cercanas a x0, representadas por N0. Luego estima f(x0) usando el promedio de todas las respuestas deentrenamiento en N0. En otras palabras,

$$\hat{f}(x_0) = \frac{1}{K} \sum_{x_i \in \mathcal{N}_0} y_i.$$

La figura ilustra dos ajustes KNN en un conjunto de datos con p = 2 predictores. El ajuste con K = 1 se muestra en el panel de la izquierda, mientras que el panel de la derecha corresponde a K = 9. Vemos que cuando K = 1, el ajuste KNN interpola perfectamente las observaciones de entrenamiento y, en consecuencia, toma la forma de una función de paso. Cuando K = 9, el ajuste KNN sigue siendo una función escalonada, pero el promedio de nueve observaciones da como resultado regiones mucho más pequeñas de constante predicción y, en consecuencia,

un ajuste más suave. El valor óptimo de K dependerá del compromiso sesgo-varianza, un valor pequeño de K proporciona el ajuste más flexible, que tendrá un sesgo bajo pero una varianza alta. Esta varianza se debe al hecho de que la predicción en una región dada depende completamente de una sola observación.Caso contrario, los valores más grandes de K proporcionan un ajuste más suave y menos variable; la predicción en una región es un promedio de varios puntos, por lo que cambiar una observación tiene un efecto menor. Sin embargo, el suavizado puede causar un sesgo al enmascarar parte de la estructura en f(X).

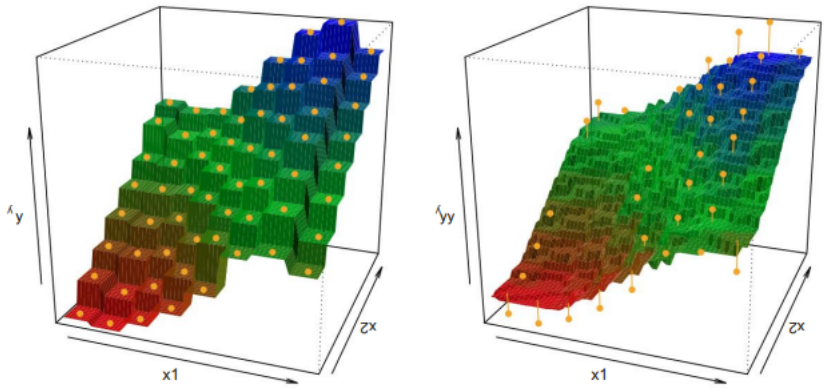


Figure 8: Ajuste KNN

Práctica de laboratorio: Regresión lineal

Bibliotecas

La función library() se usa para cargar bibliotecas o grupos de funciones y conjuntos de datos que no están incluidos en la distribución base de R.

Cargamos el paquete MASS , que es una gran colección de conjuntos de datos y funciones. También cargamos el paquete ISLR2, que incluye los conjuntos de datos asociados con este libro.

```
library (MASS)
library (ISLR2)
```

```
Attaching package: 'ISLR2'
```

```
The following object is masked from 'package:MASS':
```

```
Boston
```

Regresión lineal simple

La biblioteca ISLR2 contiene el conjunto de datos de Boston, Buscaremos predecir medv utilizando 12 predictores como rm, age y lstat.

```
head (Boston)
```

```
     crim zn indus chas   nox    rm  age    dis rad tax ptratio lstat medv
1 0.00632 18  2.31    0 0.538 6.575 65.2 4.0900   1 296    15.3  4.98 24.0
2 0.02731  0  7.07    0 0.469 6.421 78.9 4.9671   2 242    17.8  9.14 21.6
3 0.02729  0  7.07    0 0.469 7.185 61.1 4.9671   2 242    17.8  4.03 34.7
4 0.03237  0  2.18    0 0.458 6.998 45.8 6.0622   3 222    18.7  2.94 33.4
5 0.06905  0  2.18    0 0.458 7.147 54.2 6.0622   3 222    18.7  5.33 36.2
6 0.02985  0  2.18    0 0.458 6.430 58.7 6.0622   3 222    18.7  5.21 28.7
```

Usamos la función lm() para ajustar un modelo deregresión lineal simple, con medv como respuesta y lstat como predictor.

```
lm.fit <- lm(medv ~ lstat , data = Boston)
attach (Boston)
lm.fit <- lm(medv ~ lstat)
```

lm.fit, genera información básica sobre el modelo. Para obtener información más detallada, usamos summary(lm.fit). Esto nos da valores p y errores estándar para los coeficientes, así como el estadístico R2 y el estadístico F para el modelo.

```
lm.fit
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ lstat)

Coefficients:
(Intercept)        lstat
      34.55        -0.95
```

```
summary (lm.fit)
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ lstat)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-15.168  -3.990  -1.318   2.034  24.500

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 34.55384    0.56263   61.41   <2e-16 ***
lstat       -0.95005    0.03873  -24.53   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 6.216 on 504 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.5441,    Adjusted R-squared:  0.5432
F-statistic: 601.6 on 1 and 504 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

La función names() averigua qué otra información se almacena en lm.fit. Aunque podemos extraer estas cantidades por nombre, por ejemplo, lm.fit$coficients, es más seguro usar las funciones de extracción como coef() para acceder a ellas

```
names (lm.fit)
```

```
 [1] "coefficients"  "residuals"     "effects"       "rank"
 [5] "fitted.values" "assign"        "qr"            "df.residual"
 [9] "xlevels"       "call"          "terms"         "model"
```

```
coef (lm.fit)
```

```
(Intercept)       lstat
 34.5538409  -0.9500494
```

confint() nos permite obtener un intervalo de confianza para las estimaciones de los coeficientes

```
confint (lm.fit)
```

```
                2.5 %     97.5 %
(Intercept) 33.448457 35.6592247
lstat       -1.026148 -0.8739505
```

La función predict() produce intervalos de confianza e intervalos de predicción para la predicción de medv para un valor dado de lstat

```
predict(lm.fit, data.frame(lstat = (c(5, 10, 15))), interval = "confidence")
```

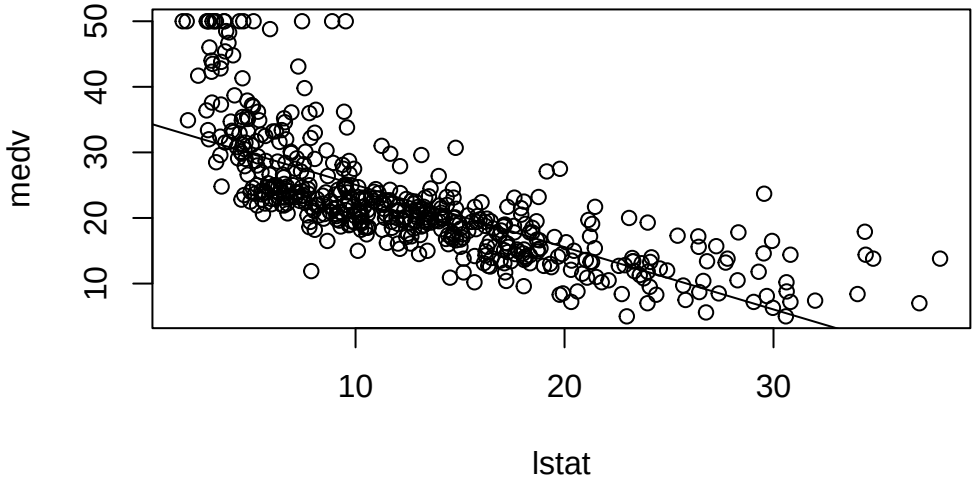
```
       fit      lwr      upr
1 29.80359 29.00741 30.59978
2 25.05335 24.47413 25.63256
3 20.30310 19.73159 20.87461
```

```
predict(lm.fit, data.frame(lstat = (c(5, 10, 15))), interval = "prediction")
```

```
       fit       lwr      upr
1 29.80359 17.565675 42.04151
2 25.05335 12.827626 37.27907
3 20.30310  8.077742 32.52846
```

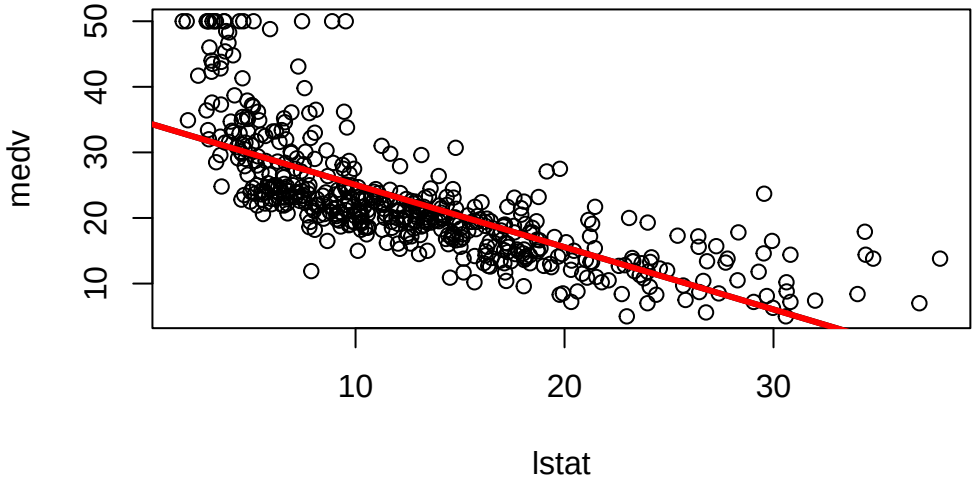
Trazamos medv y lstat junto con la regresión de mínimos cuadrados utilizando las funciones plot() y abline().

```
plot (lstat , medv)
abline (lm.fit)
```

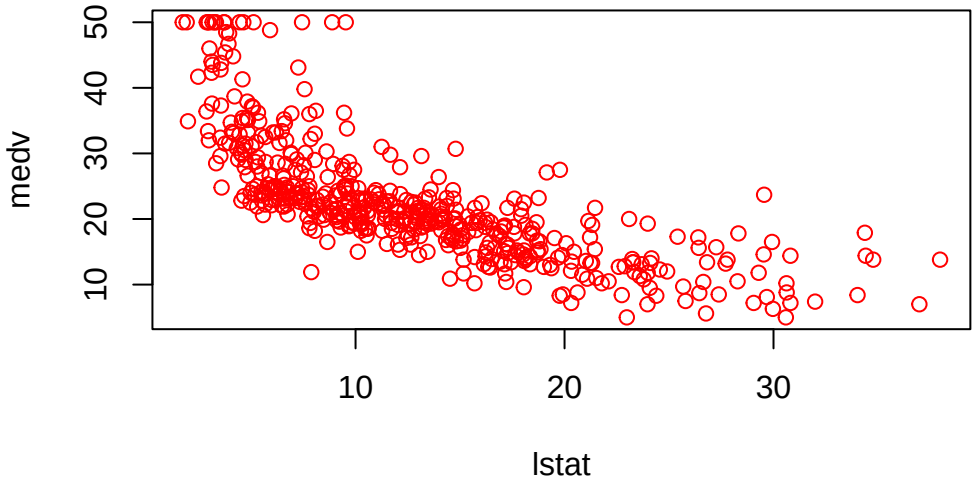


La función abline() se puede usar para dibujar cualquier línea, no solo la línea de regresión de mínimos cuadrados. abline(a, b): dibuja una línea con intersección a y pendiente b. lwd: 3 hace que el ancho de la línea de regresión aumente en un factor de 3. pch: crea diferentes símbolos de trazado.

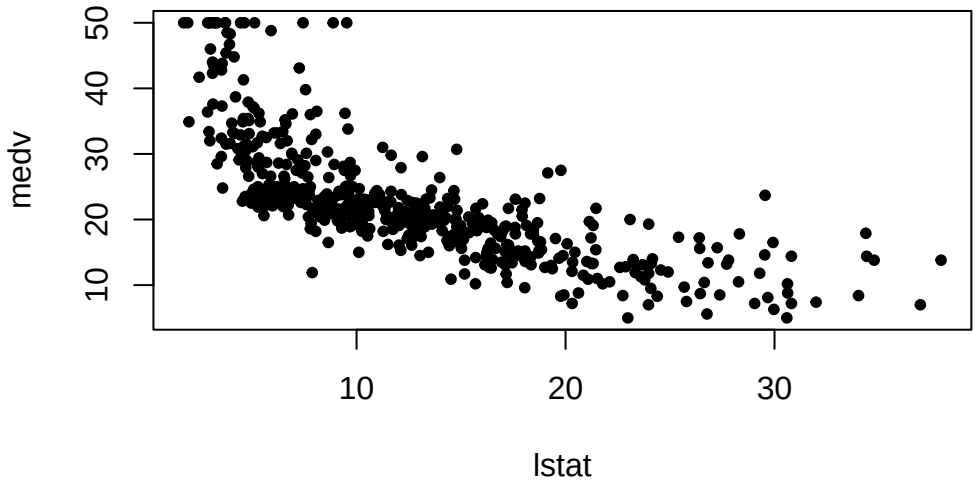
```
plot(lstat, medv)
abline(lm.fit, lwd = 3)
abline(lm.fit, lwd = 3, col = "red")
```



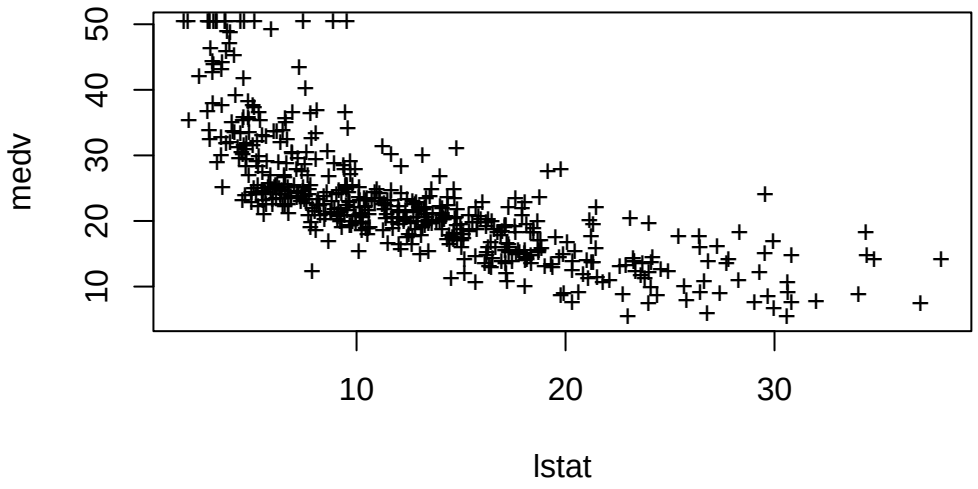

```
plot(lstat, medv, col = "red")
```



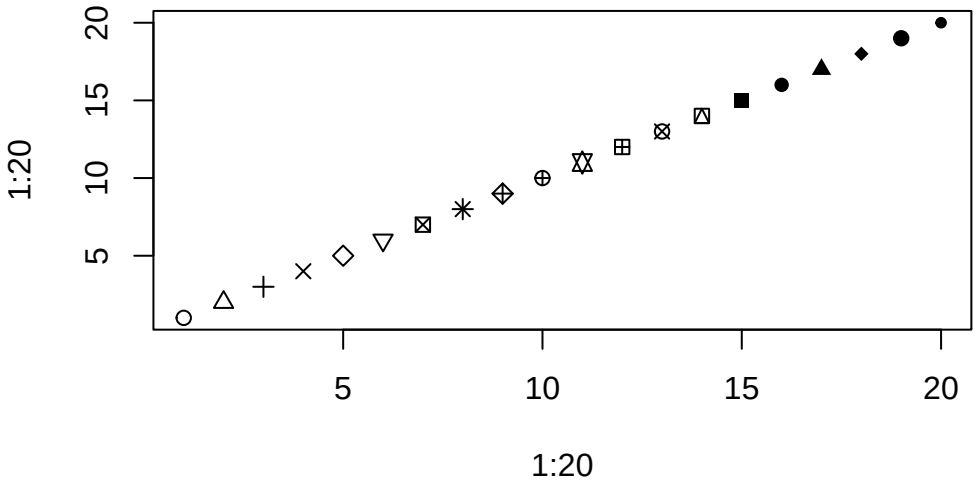
```
plot(lstat, medv, pch = 20)
```




```
plot(lstat, medv, pch = "+")
```

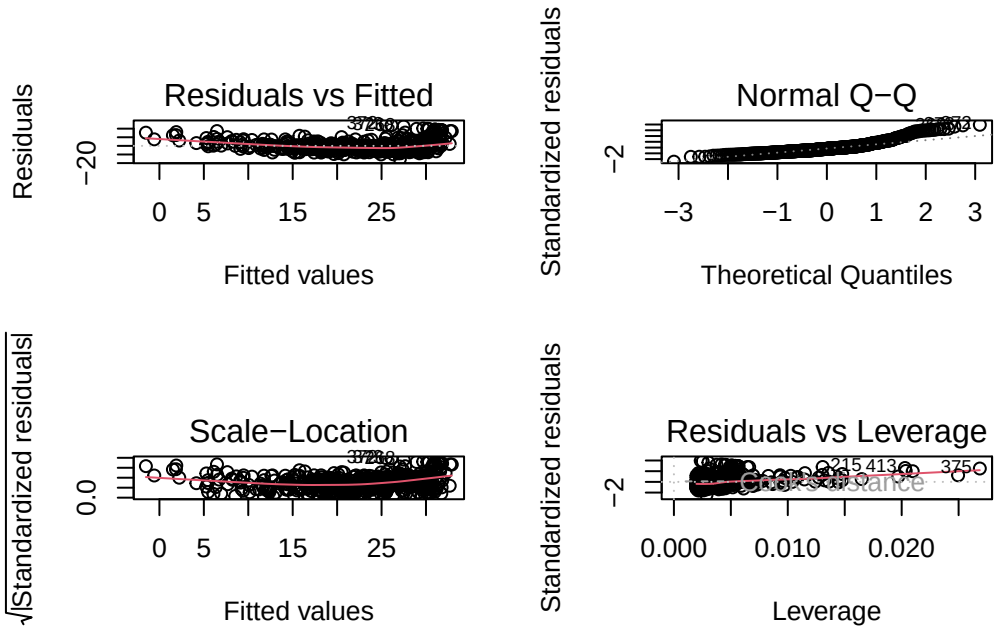



```
plot(1:20, 1:20, pch = 1:20)
```



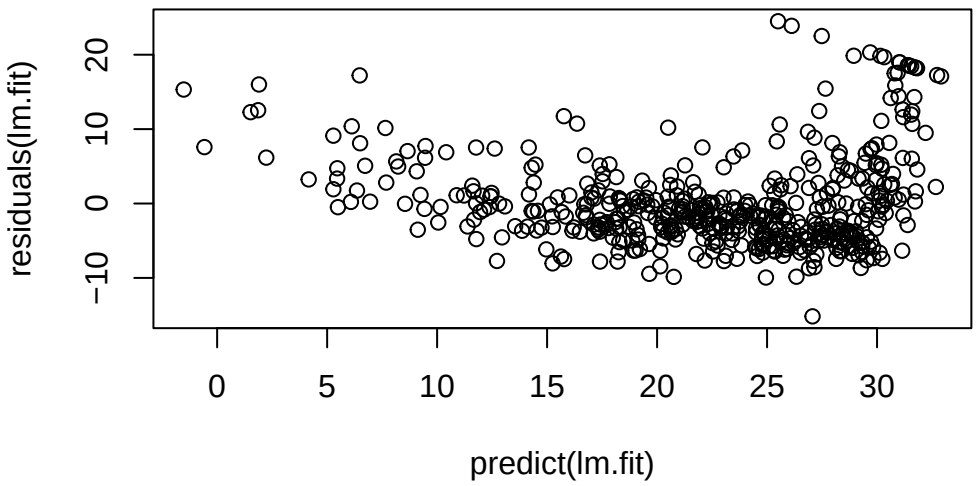
par(mfrow = c(2, 2)) divide la región de trazado en una cuadrícula de paneles de 2×2.

```
par(mfrow = c(2, 2))
plot(lm.fit)
```

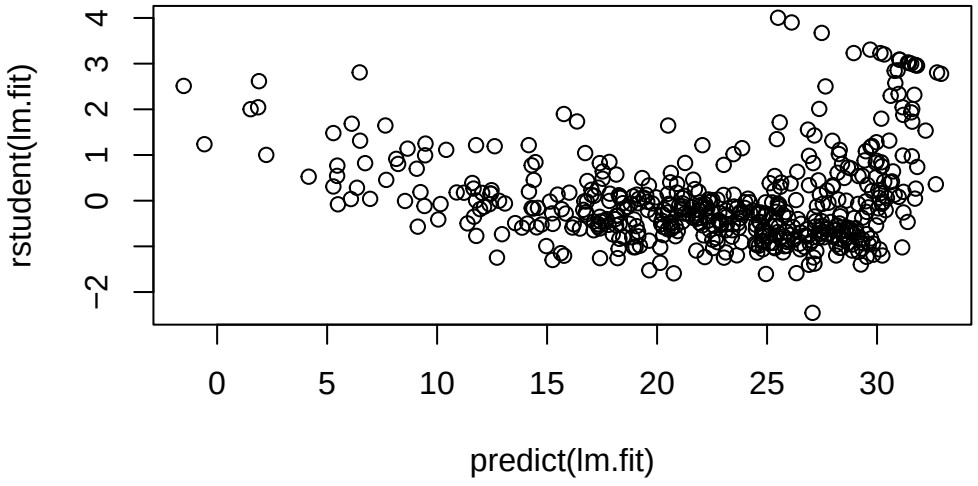


residuals(): calcula los residuos de un ajuste de regresión lineal. rstudent() devolverá los residuos estudentizados.

```
plot(predict(lm.fit), residuals(lm.fit))
```

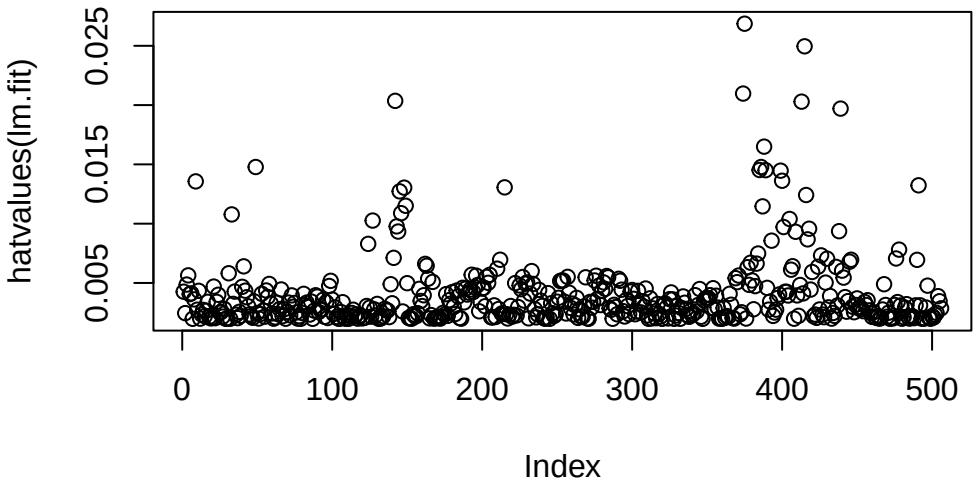



```
plot(predict(lm.fit), rstudent(lm.fit))
```



hatvalues(): calcula las estadísticas de apalancamiento

```
plot(hatvalues(lm.fit))
```



which.max(): identifica el índice del elemento más grande de un vector.

```
which.max(hatvalues(lm.fit))
```

```
375
375
```

Regresión lineal múltiple

Usamos lm() para ajustar un modelo de regresión lineal múltiple usando mínimos cuadrados y summary() para genera los coeficientes de regresión para todos los predictores.

```
lm.fit <- lm(medv ~ lstat + age, data = Boston)
summary(lm.fit)
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ lstat + age, data = Boston)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-15.981  -3.978  -1.283   1.968  23.158

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 33.22276    0.73085  45.458  < 2e-16 ***
lstat       -1.03207    0.04819 -21.416  < 2e-16 ***
age          0.03454    0.01223   2.826  0.00491 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 6.173 on 503 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.5513,    Adjusted R-squared:  0.5495
F-statistic:   309 on 2 and 503 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Abreviatura para los 12 valores de Boston

```
lm.fit <- lm(medv ~ ., data = Boston)
summary(lm.fit)
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ ., data = Boston)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-15.1304  -2.7673  -0.5814   1.9414  26.2526

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  41.617270   4.936039   8.431 3.79e-16 ***
crim         -0.121389   0.033000  -3.678 0.000261 ***
zn            0.046963   0.013879   3.384 0.000772 ***
indus         0.013468   0.062145   0.217 0.828520
chas          2.839993   0.870007   3.264 0.001173 **
nox         -18.758022   3.851355  -4.870 1.50e-06 ***
rm            3.658119   0.420246   8.705  < 2e-16 ***
age           0.003611   0.013329   0.271 0.786595
```

```
dis          -1.490754   0.201623  -7.394 6.17e-13 ***
rad           0.289405   0.066908   4.325 1.84e-05 ***
tax          -0.012682   0.003801  -3.337 0.000912 ***
ptratio      -0.937533   0.132206  -7.091 4.63e-12 ***
lstat        -0.552019   0.050659 -10.897  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 4.798 on 493 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7343,    Adjusted R-squared:  0.7278
F-statistic: 113.5 on 12 and 493 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

summary(lm.fit)$r.sq nos da el R2, y summary(lm.fit)$sigma nos da el RSE. La función vif(), parte del paquete de automóviles, se puede utilizar para calcular los factores de inflación de la varianza.

```
library(car)
```

```
Loading required package: carData
```

```
vif(lm.fit)
```

```
    crim       zn    indus     chas      nox       rm      age      dis
1.767486 2.298459 3.987181 1.071168 4.369093 1.912532 3.088232 3.954037
     rad      tax  ptratio    lstat
7.445301 9.002158 1.797060 2.870777
```

Regresión usando todas las variables menos una (edad)

```
lm.fit1 <- lm(medv ~ . - age, data = Boston)
summary(lm.fit1)
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ . - age, data = Boston)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-15.1851  -2.7330  -0.6116   1.8555  26.3838
```

```
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  41.525128   4.919684   8.441 3.52e-16 ***
crim         -0.121426   0.032969  -3.683 0.000256 ***
zn            0.046512   0.013766   3.379 0.000785 ***
indus         0.013451   0.062086   0.217 0.828577
chas          2.852773   0.867912   3.287 0.001085 **
nox         -18.485070   3.713714  -4.978 8.91e-07 ***
rm            3.681070   0.411230   8.951  < 2e-16 ***
dis          -1.506777   0.192570  -7.825 3.12e-14 ***
rad           0.287940   0.066627   4.322 1.87e-05 ***
tax          -0.012653   0.003796  -3.333 0.000923 ***
ptratio      -0.934649   0.131653  -7.099 4.39e-12 ***
lstat        -0.547409   0.047669 -11.483  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 4.794 on 494 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7343,    Adjusted R-squared:  0.7284
F-statistic: 124.1 on 11 and 494 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Alternativamente, se puede usar la función actualizar()

```
lm.fit1 <- update(lm.fit, ~ . - age)
```

Términos de interacción

lstat:black le dice a R que incluya un término de interacción entre lstat y black. La sintaxis lstat * edad incluye simultáneamente lstat, edad y el término de interacción lstat×edad como predictores; es una abreviatura de lstat + edad + lstat:edad

```
summary(lm(medv ~ lstat * age, data = Boston))
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ lstat * age, data = Boston)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
```

```
-15.806  -4.045  -1.333   2.085  27.552

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 36.0885359  1.4698355  24.553  < 2e-16 ***
lstat       -1.3921168  0.1674555  -8.313 8.78e-16 ***
age         -0.0007209  0.0198792  -0.036   0.9711
lstat:age    0.0041560  0.0018518   2.244   0.0252 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 6.149 on 502 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.5557,    Adjusted R-squared:  0.5531
F-statistic: 209.3 on 3 and 502 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Transformaciones no lineales de los predictores

lm() puede acomodar transformaciones no lineales de los predictores. La función I() es necesaria ya que ^ tiene un significado especial en un objeto de fórmula; envolver como lo hacemos permite el uso estándar en R, que es elevar X a la potencia 2. Ahora realizamos una regresión de medv en lstat y lstat2.

```r
lm.fit2 <- lm(medv ~ lstat + I(lstat^2))
summary(lm.fit2)
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ lstat + I(lstat^2))

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-15.2834  -3.8313  -0.5295   2.3095  25.4148

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 42.862007   0.872084   49.15   <2e-16 ***
lstat       -2.332821   0.123803  -18.84   <2e-16 ***
I(lstat^2)   0.043547   0.003745   11.63   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 5.524 on 503 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6407,    Adjusted R-squared:  0.6393
F-statistic: 448.5 on 2 and 503 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Usamos la función anova() para cuantificar aún más la medida en que el ajuste cuadrático es superior al ajuste lineal.

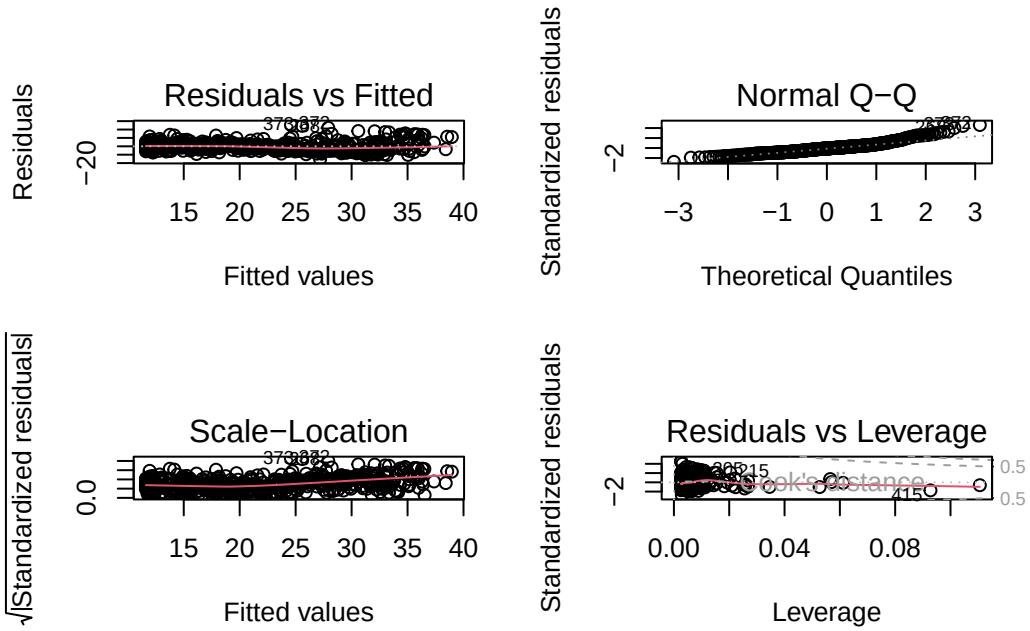
```
lm.fit <- lm(medv ~ lstat)
anova(lm.fit, lm.fit2)
```

```
Analysis of Variance Table

Model 1: medv ~ lstat
Model 2: medv ~ lstat + I(lstat^2)
  Res.Df   RSS Df Sum of Sq     F    Pr(>F)
1    504 19472
2    503 15347  1    4125.1 135.2 < 2.2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

El Modelo 1 representa el submodelo lineal que contiene solo un predictor, lstat, mientras que el Modelo 2 corresponde al modelo cuadrático más grande que tiene dos predictores, lstat y lstat2. La función anova() realiza una prueba de hipótesis comparando los dos modelos

```
par(mfrow = c(2, 2))
plot(lm.fit2)
```



Cuando el término lstat2 se incluye en el modelo, hay un patrón poco perceptible en los residuos. Un mejor enfoque consiste en usar la función poly() para crear el polinomio dentro de lm().

```
lm.fit5 <- lm(medv ~ poly(lstat, 5))
summary(lm.fit5)
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ poly(lstat, 5))

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-13.5433  -3.1039  -0.7052   2.0844  27.1153

Coefficients:
                 Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)       22.5328     0.2318  97.197  < 2e-16 ***
poly(lstat, 5)1 -152.4595     5.2148 -29.236  < 2e-16 ***
poly(lstat, 5)2   64.2272     5.2148  12.316  < 2e-16 ***
poly(lstat, 5)3  -27.0511     5.2148  -5.187 3.10e-07 ***
poly(lstat, 5)4   25.4517     5.2148   4.881 1.42e-06 ***
```

```
poly(lstat, 5)5  -19.2524     5.2148  -3.692 0.000247 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 5.215 on 500 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6817,    Adjusted R-squared:  0.6785
F-statistic: 214.2 on 5 and 500 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

la función poly() ortogonaliza los predictores: esto significa que las características que genera esta función no son simplemente una secuencia de potencias del argumento. Sin embargo, un modelo lineal aplicado a la salida de la función poly() tendrá los mismos valores ajustados que un modelo lineal aplicado a los polinomios sin procesar. Para obtener los polinomios sin procesar de la función poly() , se debe usar el argumento raw = TRUE .

```
summary(lm(medv ~ log(rm), data = Boston))
```

```
Call:
lm(formula = medv ~ log(rm), data = Boston)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-19.487  -2.875  -0.104   2.837  39.816

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -76.488      5.028  -15.21   <2e-16 ***
log(rm)       54.055      2.739   19.73   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 6.915 on 504 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.4358,    Adjusted R-squared:  0.4347
F-statistic: 389.3 on 1 and 504 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Predictores cualitativos

Datos de Carseats , que forman parte de la biblioteca ISLR2. Intentaremos predecir las ventas

```
head(Carseats)
```

```
  Sales CompPrice Income Advertising Population Price ShelveLoc Age Education
1  9.50       138     73          11        276   120       Bad  42        17
2 11.22       111     48          16        260    83      Good  65        10
3 10.06       113     35          10        269    80    Medium  59        12
4  7.40       117    100           4        466    97    Medium  55        14
5  4.15       141     64           3        340   128       Bad  38        13
6 10.81       124    113          13        501    72       Bad  78        16
  Urban  US
1   Yes Yes
2   Yes Yes
3   Yes Yes
4   Yes Yes
5   Yes  No
6    No Yes
```

El predictor Shelveloc toma tres valores posibles: malo, medio y bueno Dada una variable cualitativa como Shelveloc, R genera automáticamente variables ficticias. A continuación ajustamos un modelo de regresión múltiple que incluye algunos términos de interacción.

```
lm.fit <- lm(Sales ~ . + Income:Advertising + Price:Age,
    data = Carseats)
summary(lm.fit)
```

```
Call:
lm(formula = Sales ~ . + Income:Advertising + Price:Age, data = Carseats)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-2.9208 -0.7503  0.0177  0.6754  3.3413

Coefficients:
                     Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)         6.5755654  1.0087470   6.519 2.22e-10 ***
CompPrice           0.0929371  0.0041183  22.567  < 2e-16 ***
Income              0.0108940  0.0026044   4.183 3.57e-05 ***
Advertising         0.0702462  0.0226091   3.107 0.002030 **
Population          0.0001592  0.0003679   0.433 0.665330
Price              -0.1008064  0.0074399 -13.549  < 2e-16 ***
ShelveLocGood       4.8486762  0.1528378  31.724  < 2e-16 ***
ShelveLocMedium     1.9532620  0.1257682  15.531  < 2e-16 ***
Age                -0.0579466  0.0159506  -3.633 0.000318 ***
```

```
Education          -0.0208525  0.0196131  -1.063 0.288361
UrbanYes            0.1401597  0.1124019   1.247 0.213171
USYes              -0.1575571  0.1489234  -1.058 0.290729
Income:Advertising  0.0007510  0.0002784   2.698 0.007290 **
Price:Age           0.0001068  0.0001333   0.801 0.423812
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.011 on 386 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8761,    Adjusted R-squared:  0.8719
F-statistic:   210 on 13 and 386 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

contrasts(): devuelve la codificación que utiliza R para las variables ficticias.

```
attach(Carseats)
contrasts(ShelveLoc)
```

```
       Good Medium
Bad       0      0
Good      1      0
Medium    0      1
```

Funciones de escritura

LoadLibraries() proporcionamos una función simple que lee las bibliotecas ISLR2 y MASS

```
 LoadLibraries <- function () {
   library (ISLR2)
   library (MASS)
   print ("The libraries have been loaded .")
   }
```

```
LoadLibraries
```

```
function () {
   library (ISLR2)
   library (MASS)
   print ("The libraries have been loaded .")
   }
```

```
LoadLibraries()
```

```
[1] "The libraries have been loaded ."
```