

## ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA INFORMÁTICA

# Apuntes de la Asignatura: Métodos Estadísticos de Predicción

Grado en Matemáticas

Víctor Aceña Gil

Isaac Martín de Diego

2025-2026



# **Índice de Diapositivas**

- Tema o: Introducción a los Modelos de Regresión
- Tema 1: El Modelo de Regresión Lineal Simple
- Tema 2: El Modelo de Regresión Lineal Múltiple
- Tema 3: Ingeniería de Características
- Tema 4: Selección de Variables y Regularización
- Tema 5: Modelos Lineales Generalizados (GLM)

## Introducción a los Modelos Estadísticos para la Predicción

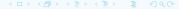
Víctor Aceña - Isaac Martín

DSLab

2025-08-08







## El Modelado de Regresión: Una Herramienta Universal



El modelado de regresión constituye una de las herramientas más potentes y flexibles del arsenal estadístico. Su aplicabilidad abarca un espectro extraordinariamente amplio de disciplinas:

- Ciencias Físicas: Física de partículas, ingeniería aeroespacial para modelar sistemas complejos.
- Ciencias Sociales: Econometría, psicometría para entender comportamientos.
- Ciencias de la Salud: Epidemiología para identificar factores de riesgo.
- Finanzas: Para entender mercados y comportamientos económicos.

## El Propósito de Este Curso



Este curso tiene como misión construir el **andamiaje conceptual y filosófico** sobre el que se asienta el modelado estadístico moderno.

#### **Objetivos:**

- Contextualizar la regresión no solo como una técnica, sino como un marco de pensamiento indispensable.
- Explorar en profundidad el propósito dual de la regresión (predicción vs. inferencia).
- Desgranar los componentes axiomáticos hasta el último detalle.
- Ofrecer una visión panorámica de la vasta familia de modelos de regresión.

El objetivo es prepararte, **con solidez y sin prisas**, para las inmersiones técnicas posteriores.

## Predecir vs. Explicar



El modelado de regresión ofrece un marco para investigar y cuantificar las relaciones entre variables.

Conceptualmente, el modelado estadístico se orienta hacia uno de dos polos (Shmueli, 2010):

## Predicción: El Paradigma de la Precisión



**Objetivo Principal**: La **precisión**. Se busca construir un modelo que pueda estimar con el menor error posible el valor de una variable de interés (la *respuesta*).

#### Características Clave:

- El modelo puede ser tratado como una "caja negra" (black box).
- El funcionamiento interno o la interpretabilidad son secundarios.
- Lo importante es que las predicciones sean consistentemente fiables y robustas en datos no observados previamente.

## Inferencia: El Paradigma de la Comprensión



**Objetivo Principal**: La **comprensión** e **interpretación**. No solo predecir, sino dilucidar la naturaleza de las interdependencias.

#### Características Clave:

- Se busca cuantificar cómo un cambio en una variable predictora influye en la respuesta.
- La interpretabilidad del modelo es primordial.
- El interés reside en la magnitud, signo e incertidumbre estadística de los parámetros (errores estándar, intervalos de confianza, p-valores).

## Predecir vs. Explicar: Ejemplos



#### Ejemplo de Predicción

Una entidad financiera quiere predecir la probabilidad de que un cliente incurra en impago. Su principal interés es tener un modelo que clasifique correctamente a los futuros solicitantes como de alto o bajo riesgo para minimizar pérdidas.

### Ejemplo de Inferencia

Una epidemióloga investiga los factores de riesgo de una enfermedad cardíaca. Su objetivo es entender y cuantificar la relación: ¿En cuántos mmHg aumenta la presión arterial, en promedio, por cada gramo adicional de sal consumido al día?

#### Una Relación Simbiótica



Aunque conceptualmente distintos, ambos objetivos no son mutuamente excluyentes; a menudo se benefician el uno del otro.

- Un modelo con una base inferencial sólida, que captura relaciones causales o asociativas verdaderas, suele tener un buen rendimiento predictivo.
- A la inversa, un modelo que demuestra una alta precisión predictiva en datos nuevos nos da confianza en que las relaciones que ha aprendido no son meras casualidades, sino que probablemente reflejen patrones reales y generalizables.
- La tensión entre **interpretabilidad** y **precisión** es uno de los debates más fascinantes en la ciencia de datos moderna.

### El Primer Paso: Convertirse en un Modelador Eficaz



Comprender la distinción entre predicción e inferencia es fundamental para el desarrollo como estadístico.

- En la Práctica: Ambos objetivos a menudo se entrelazan y se complementan mutuamente.
- Decisión Estratégica: La elección del enfoque determina el tipo de modelo, las métricas de evaluación y la interpretación de resultados.
- Contexto del Problema: El dominio de aplicación y las preguntas de investigación guían esta decisión fundamental.

## Anatomía de un Modelo de Regresión



Todo modelo de regresión se construye sobre tres pilares fundamentales (Kutner et al., 2005):

- La variable de respuesta
- Las variables predictoras
- El término de error aleatorio

Estos componentes son los ladrillos con los que edificaremos todo nuestro conocimiento.

## La Variable de Respuesta (Dependiente)



Representa el fenómeno cuyo comportamiento se busca modelar, comprender o predecir. Su naturaleza determina el tipo de modelo a elegir.

- Continua: Cualquier valor en un rango (temperatura, precio).
- Discreta de Conteo: Número de eventos (nº de accidentes, nº de clientes).
- Binaria o Dicotómica: Dos resultados posibles (éxito/fracaso, enfermo/sano).
- Categórica: Grupos o categorías.
  - Nominal (sin orden): tipo de sangre, partido político.
  - Ordinal (con orden): nivel de satisfacción "bajo/medio/alto".

## La Variable de Respuesta: Ejemplos Detallados



La naturaleza de la variable de respuesta es el factor más determinante para elegir el tipo de modelo:

- **Continuas**: Temperatura ambiente, altura de una persona, precio de una acción, concentración de un compuesto químico.
- Discretas de Conteo: Número de accidentes en una intersección, número de clientes que entran en una tienda, número de mutaciones en un gen.
- **Binarias**: Éxito/fracaso en un tratamiento, enfermo/sano, compra/no compra, correo spam/no spam.
- Categóricas:
  - Nominales: Tipo de sangre (A, B, AB, O), partido político preferido.
  - **Ordinales**: Estadio de una enfermedad (I/II/III/IV), nivel educativo.

#### Las Variables Predictoras



También llamadas independientes, explicativas, regresoras, covariables o *features*.

Son las magnitudes, atributos o factores que se postula que influyen o están asociados con el comportamiento de la variable de respuesta.

- Pueden ser de diversa naturaleza (continuas, categóricas, etc.).
- Su selección es una fase crítica del modelado que requiere:
  - Conocimiento del dominio.
  - Análisis exploratorio de datos.
  - Técnicas estadísticas formales.

#### La Selección de Variables: Una Fase Crítica



La selección de variables predictoras es una de las fases más críticas del modelado estadístico:

#### Requiere una Combinación de:

- Conocimiento del Dominio: Comprensión profunda del fenómeno que se está modelando.
- Análisis Exploratorio: Visualización y exploración inicial de los datos para identificar patrones.
- **Técnicas Estadísticas Formales**: Métodos como selección hacia adelante, hacia atrás, o criterios de información.

#### **Consideraciones:**

- Las variables pueden ser de diversa naturaleza (continuas, categóricas, etc.).
- No todas las variables disponibles deben incluirse en el modelo.

# El Término de Error Aleatorio $(\epsilon)$



Este componente, a menudo subestimado, es conceptualmente crucial. Simboliza la variabilidad de la respuesta **no capturada** por los predictores.

No es un simple "error" en el sentido de equivocación, sino un componente estocástico que amalgama:

- Variables Omitidas: Factores que influyen en Y pero no han sido medidos o incluidos.
- Error de Medición: Imprecisiones en la medición de las variables.
- Aleatoriedad Intrínseca: Variabilidad irreducible inherente a muchos fenómenos.

## Los Supuestos sobre el Error Aleatorio



El término de error  $\epsilon$  es la clave del diagnóstico en regresión. Gran parte de la inferencia se basa en verificar los supuestos sobre su distribución:

#### **Supuestos Fundamentales:**

- Media cero:  $E[\epsilon] = 0$
- Varianza constante (homocedasticidad):  $Var[\epsilon] = \sigma^2$
- Independencia: Los errores no están correlacionados
- Normalidad:  $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$  (para inferencia exacta)

Dos individuos con idénticos valores en las variables predictoras pueden tener valores distintos en la respuesta debido a este componente irreducible.

## La Ecuación Fundamental de la Regresión



La relación se expresa como la descomposición de la variable de respuesta en una parte sistemática y una parte aleatoria:

$$Y = \underbrace{f(X_1, \dots, X_k)}_{\text{Componente Sistemática}} + \underbrace{\epsilon}_{\text{Componente Aleatoria}}$$

- $f(\cdot)$  es la **componente sistemática**, que representa el valor esperado de Y para unos valores dados de las X. Es lo que intentamos estimar.
- $m{\epsilon}$  es la **componente aleatoria**. El diagnóstico en regresión se basa en verificar los supuestos sobre su distribución.

#### Linealidad en los Parámetros



Una característica clave de los modelos de regresión lineal es que son **lineales en los parámetros** ( $\beta_j$ ), no necesariamente en las variables.

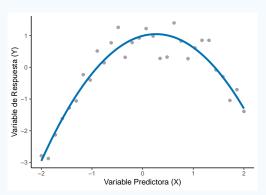
Este modelo es lineal, aunque la relación con las variables no lo sea:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_1^2 + \beta_3 \log(X_2) + \beta_4 (X_1 \cdot X_2) + \epsilon$$

La función f es una combinación lineal de los coeficientes  $\beta$ . Esta flexibilidad es una de las razones de la enorme potencia de los modelos lineales.

## Ejemplo: Modelo Lineal con Término Cuadrático





$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \epsilon$$

#### ¿Es "lineal" este modelo?

- **SÍ**: Lineal en los parámetros  $\beta_0, \beta_1, \beta_2$
- **NO**: No lineal en la variable X

La "linealidad" se refiere a los coeficientes, no a la forma de la curva.

Una parábola que encaja perfectamente en el marco de regresión lineal clásica.

## Universo de los Modelos de Regresión



La regresión lineal clásica es el punto de partida para una gama prolífica de metodologías avanzadas:

- Modelos Lineales (LMs)
- Modelos Lineales Generalizados (GLMs)
- Modelos de Efectos Mixtos (Mixed Models)
- Modelos Aditivos Generalizados (GAMs)

## Modelos Lineales (LMs)



Constituyen el paradigma fundamental. Es el laboratorio donde se forjan los conceptos esenciales:

- Estimar parámetros e interpretar su significado.
- Cuantificar la incertidumbre (errores estándar, intervalos de confianza).
- Realizar contrastes de hipótesis para evaluar la significancia estadística.
- Diagnosticar la "salud" de un modelo examinando sus supuestos.

Asumen que la variable de respuesta sigue una distribución Normal.

#### Modelos Lineales: La Base Unificadora



Los Modelos Lineales no son solo una técnica más, sino el fundamento que unifica toda la estadística clásica:

- ANOVA (Análisis de la Varianza): Es un caso particular de los LMs cuando todas las variables predictoras son categóricas.
- ANCOVA (Análisis de la Covarianza): Combina variables categóricas (factores) con variables continuas (covariables).
- Unificación Histórica: Técnicas que se estudiaban por separado ahora se entienden como manifestaciones del mismo principio matemático.

Esta perspectiva unificadora revolucionó la enseñanza y comprensión de la estadística.

## Modelos Lineales Generalizados (GLMs)



Si los LMs son el alfabeto, los GLMs son la gramática que nos permite construir frases complejas y con significado en contextos mucho más amplios.

Representan un salto conceptual que expande masivamente el universo de problemas que podemos abordar (Nelder & Wedderburn, 1972).

Permiten escapar de la "tiranía" de la distribución Normal para modelar respuestas con otras naturalezas y escalas.

Se logra mediante dos mecanismos:

- La familia exponencial de distribuciones.
- La función de enlace (link function).

## GLMs: Una Revolución Conceptual



Los GLMs representan uno de los avances más significativos en la estadística del siglo XX:

- Unificación: Por primera vez, se unificaron bajo un mismo marco conceptual diversas clases de modelos que antes se trataban por separado.
- Flexibilidad: Permitieron abordar una gama masivamente amplia de problemas que antes requerían técnicas especializadas.
- **Impacto**: Estimularon enormemente el desarrollo de software estadístico y la aplicación del modelado a nuevos dominios.

Gracias a los GLMs, podemos usar el mismo marco conceptual para modelar desde la cantidad de ciclistas en una ciudad (Poisson) hasta la probabilidad de respuesta a un tratamiento (logística).

## GLMs: La Familia Exponencial de Distribuciones



Los GLMs funcionan con distribuciones que pertenecen a la **familia exponencial**, un "club" con propiedades matemáticas convenientes que permiten una teoría unificada.

- Miembros Notables: Normal, Poisson (conteo), Binomial (proporciones/binarios), Gamma (positivos asimétricos), Binomial Negativa.
- Estructura Común: Su forma matemática compartida es la clave que permite unificar la estimación de parámetros para todos estos modelos.

## GLMs: La Función de Enlace - El "Traductor"



**El verdadero golpe de genialidad**: La función de enlace  $g(\cdot)$  actúa como un "traductor" o "puente" entre dos mundos:

- **El predictor lineal**  $X\beta$ : Puede tomar cualquier valor real  $(-\infty$  a  $+\infty)$
- La media de la respuesta  $\mu = E[Y]$ : A menudo está restringida

La Relación Fundamental:  $g(E[Y]) = g(\mu) = X\beta$ 

**Ejemplos Clave**: - **Enlace Logarítmico** (Poisson):  $g(\mu) = \log(\mu) \rightarrow \mu = \exp(\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})$  (siempre positivo) - **Enlace Logit** (Binomial):  $g(\mu) = \log(\frac{\mu}{1-\mu})$  (proyecta probabilidades al rango completo)



#### Modelos de Efectos Mixtos



Su desarrollo responde a la **necesidad crítica** de analizar datos que exhiben estructuras de dependencia o correlación.

#### Violación del Supuesto de Independencia:

- Medidas repetidas: Medir la presión arterial de un paciente cada mes.
- Datos longitudinales: Un tipo especial de medida repetida a lo largo del tiempo.
- Datos agrupados: Estudiantes anidados dentro de clases, clases dentro de colegios.

La Solución: Introducir efectos aleatorios para capturar la variabilidad específica entre grupos/individuos, además de los efectos fijos que representan a la población general.

## GAMs: Flexibilidad sin Perder Interpretabilidad



Los **Modelos Aditivos Generalizados** representan una extensión natural y altamente flexible de los GLMs.

**Innovación Clave**: Relajan el supuesto de linealidad entre el predictor transformado y las covariables.

#### Metodología:

- Modelan relaciones mediante funciones suaves no paramétricas (splines).
- Mantienen la estructura aditiva:

$$g(\mu) = \alpha + f_1(x_1) + f_2(x_2) + \ldots + f_p(x_p)$$

• Las funciones  $f_i(\cdot)$  se **estiman a partir de los datos**.

**Ventaja**: Capturan patrones no lineales complejos sin especificar una forma funcional a priori, logrando un equilibrio excepcional entre **flexibilidad** e **interpretabilidad**.

## R y el Ecosistema de Paquetes



Este curso fusiona la teoría con la aplicación computacional directa a través de  ${\bf R}$ .

### ¿Por qué R?

- Estándar de facto en la investigación estadística y ciencia de datos académica.
- Potencia y flexibilidad incomparables.
- Inmenso ecosistema de paquetes contribuidos por la comunidad científica.

**Capacidades Fundamentales**: Exploración de datos, estimación de parámetros, diagnóstico riguroso, producción de gráficos de alta calidad.

## Paquetes Especializados para el Modelado



Funciones Base (paquete stats): -lm() para regresión lineal -glm() para modelos lineales generalizados - Se cargan automáticamente (no requieren instalación)

Paquetes Especializados: - mgcv: Implementación de referencia para GAMs (Simon Wood) - lme4 y nlme: Modelos de efectos mixtos - rms: Estrategias robustas de modelado - gamair: Conjuntos de datos para practicar con GAMs

## Breve Crónica de la Regresión: Orígenes



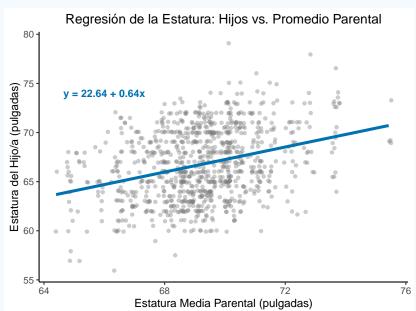
La gestación de la regresión se traza hasta Sir **Francis Galton** (S. XIX).

Estudiando la herencia de la estatura, notó que los padres muy altos tendían a tener hijos que, en promedio, no eran tan altos como ellos (y viceversa).

Acuñó el término **"regresión a la mediocridad"** (hoy "regresión a la media") para describir esta tendencia de las características a "regresar" hacia la media de la población.

#### Los Estudios de Galton: Los Datos Históricos





## Los Estudios de Galton: Hallazgos e Importancia



#### **Datos y Hallazgos Principales**

- Galton recopiló datos de 928 hijos y sus padres.
- Observó una relación lineal: padres altos tenían hijos altos (y viceversa).
- "Regresión a la mediocridad": Las estaturas extremas de los padres no se perpetuaban completamente.
- Los hijos tendían a "regresar" hacia la media poblacional.

#### Importancia Histórica

- Regresión Lineal: Introdujo el concepto de la recta de regresión para modelar relaciones.
- Correlación: Precursor del coeficiente de correlación (desarrollado por Karl Pearson).
- Terminología: Acuñó el término "regresión" que usamos hoy.
- Método Estadístico: Fundó las bases del análisis de regresión moderno.

#### Breve Crónica: La Formalización Matemática



Aunque Galton sentó las bases conceptuales, la formalización matemática se debe a dos gigantes:

#### Adrien-Marie Legendre

- En 1805 publicó el "Método de los mínimos cuadrados".
- Lo concibió como un procedimiento numérico para ajustar observaciones astronómicas.

#### Carl Friedrich Gauss

- Desarrolló el método de forma independiente.
- Lo dotó de una profunda base teórica, conectándolo con la teoría de la probabilidad.
- Lo derivó bajo el supuesto de errores normales, convirtiéndolo en la técnica fundamental que es hoy.

## Breve Crónica: El Desarrollo Moderno



El siglo XX fue testigo de un desarrollo explosivo, con dos hitos clave:

### La Revolución de los GLMs (1972) La Evolución Contemporánea

- John Nelder y Robert
   Wedderburn publicaron su trabajo sobre Modelos Lineales
   Generalizados.
- Unificaron la regresión lineal, logística y de Poisson bajo un mismo marco conceptual y computacional.
- Esto estimuló enormemente la aplicación del modelado a una nueva y vasta gama de problemas.

- El legado continúa evolucionando a un ritmo vertiginoso.
- Inclusión de modelos jerárquicos y bayesianos.
- Integración con métodos de machine learning (ej: árboles de regresión).
- Adaptación al análisis de datos masivos (big data).

## De la Herencia Biológica al Big Data



La regresión ha evolucionado de manera extraordinaria desde sus orígenes:

- Origen Modesto: Una simple observación sobre la herencia de la estatura por Sir Francis Galton.
- Desarrollo Matemático: La formalización rigurosa por Legendre y Gauss en el siglo XIX.
- Revolución Conceptual: Los GLMs unificaron múltiples técnicas bajo un marco común.
- Era Contemporánea: Adaptación a machine learning, métodos bayesianos y big data.

La regresión se ha convertido en una de las herramientas más versátiles y poderosas del arsenal analítico moderno, presente en prácticamente todas las disciplinas cuantitativas.

# Preparándonos para el Viaje Técnico



#### Lo que hemos construido:

- Marco conceptual sólido: Predicción vs. inferencia
- Fundamentos axiomáticos: Los tres pilares de la regresión
- Perspectiva histórica: De Galton al big data
- Visión panorámica: El universo de modelos disponibles

#### Lo que sigue:

Con este **andamiaje conceptual y filosófico**, estamos preparados para las inmersiones técnicas que seguirán. Cada concepto avanzado se construirá sobre estos cimientos sólidos.

#### Referencias



- Kutner, M. H., Nachtsheim, C. J., Neter, J., & Li, W. (2005). Applied linear statistical models (5th ed.). McGraw-Hill/Irwin.
- Nelder, J. A., & Wedderburn, R. W. M. (1972). Generalized linear models. Journal of the Royal Statistical Society: Series A (General), 135(3), 370-384.
- Shmueli, G. (2010). To explain or to predict? *Statistical Science*, 25(3), 289-310.

# Regresión Lineal Simple

Víctor Aceña - Isaac Martín

DSLab

2025-08-08





## Fundamento del Modelado Estadístico



La regresión lineal constituye uno de los **pilares fundamentales** de la modelización estadística.

### ¿Por qué es tan importante?

- Es el primer modelo predictivo que se aprende por su simplicidad e interpretabilidad
- Los conceptos aquí desarrollados son la base para técnicas avanzadas: regresión múltiple, GLMs, machine learning
- Proporciona el marco conceptual para toda la inferencia estadística en modelos lineales

### Nuestro enfoque:

Seguiremos el **ciclo completo** de un proyecto de modelado: exploración  $\to$  formalización  $\to$  estimación  $\to$  inferencia  $\to$  diagnóstico

## Objetivos de Aprendizaje



Al finalizar este tema, serás capaz de:

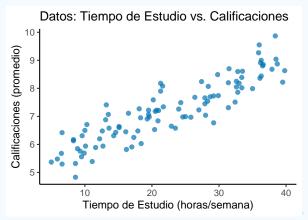
- Comprender y aplicar el proceso de modelización estadística para problemas con una variable predictora
- Identificar y medir la correlación lineal entre dos variables como paso previo al modelado
- Oescribir la formulación matemática del modelo de regresión lineal simple e interpretar sus parámetros
- Estimar los coeficientes mediante mínimos cuadrados ordinarios (MCO) y entender sus propiedades
- Realizar inferencias sobre los parámetros del modelo y evaluar su bondad de ajuste
- Diagnosticar la adecuación del modelo verificando si se cumplen los supuestos

# Ejemplo Motivador: Los Datos



**Pregunta de investigación:** ¿Influye el tiempo de estudio semanal en las calificaciones finales?

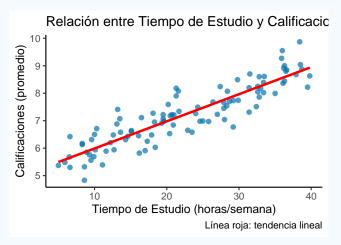
**Simulación de datos realista:** - 100 estudiantes universitarios - Tiempo de estudio: entre 5 y 40 horas/semana - Calificaciones: escala de 0 a 10 puntos



## Ejemplo Motivador: Primera Observación



#### Lo que vemos en el gráfico anterior:



**Observación clave:** Clara tendencia lineal positiva → Justifica un modelo de regresión lineal

# Paso 1: Exploración Visual - El Gráfico de Dispersión



El **gráfico de dispersión** (*scatterplot*) es la herramienta más potente para examinar la relación entre dos variables continuas.

## ¿Qué nos permite evaluar?

#### Características de la relación:

- Forma: ¿Es lineal, curva, o sin patrón?
- Dirección: ¿Positiva o negativa?
- Fuerza: ¿Qué tan estrecha es la relación?
- Valores atípicos: ¿Hay observaciones extremas?

#### Criterios para regresión lineal:

- Linealidad: Los puntos siguen una tendencia recta
- Variabilidad constante: La dispersión es similar en todo el rango
- Sin valores atípicos extremos:
   No hay puntos que distorsionen la relación

**Principio:** La visualización SIEMPRE precede a la cuantificación



## Paso 2: Cuantificación - Covarianza y Correlación



Una vez que la visualización sugiere una tendencia, necesitamos métricas para cuantificarla.

#### Covarianza muestral:

$$Cov(x,y) = s_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n-1}$$

Problema: Su magnitud depende de las unidades de las variables

#### Coeficiente de correlación de Pearson:

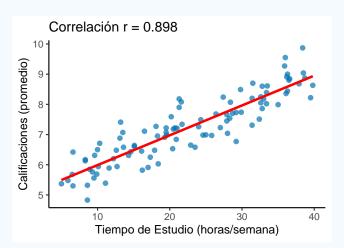
$$r = r_{xy} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}$$

- Ventajas: Adimensional, siempre entre -1 y 1
- Interpretación: Fuerza de la asociación lineal



## Cuantificación en Nuestro Ejemplo





- Covarianza: 9.82 (difícil de interpretar por las unidades)
- Correlación: 0.898 (asociación lineal muy fuerte y positiva)

## Correlación NO Implica Causalidad



Encontrar una **correlación fuerte** (0.898) entre tiempo de estudio y calificaciones **NO** nos autoriza a concluir que *una causa la otra*.

### ¿Por qué?

### Posibles explicaciones alternativas:

- Variable oculta: El interés del estudiante influye tanto en las horas de estudio como en las calificaciones
- Causalidad inversa: Los estudiantes con mejores calificaciones se motivan a estudiar más
- Terceras variables: Calidad del sueño, técnicas de estudio, etc.

### La regresión lineal puede:

Demostrar que las variables se mueven juntas

Permitirnos predecir una a partir de la otra

Cuantificar la fuerza de la asociación **NO puede:** 

Explicar el porqué de la relación Establecer causalidad sin diseño experimental



## El Modelo Poblacional



Una vez confirmada la relación lineal, **formalizamos** matemáticamente nuestra observación.

El modelo poblacional postula que la relación verdadera sigue una línea recta con aleatoriedad:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i$$

#### **Componentes:**

#### Parte sistemática:

- β<sub>0</sub>: Intercepto (parámetro poblacional desconocido)
- β<sub>1</sub>: Pendiente (parámetro poblacional desconocido)

#### Parte aleatoria:

- $\varepsilon_i$ : **Error aleatorio** que incluye:
  - Variables omitidas
  - Error de medición
  - Aleatoriedad intrínseca

Nunca observamos la población o Usamos la muestra para estimar el modelo muestral

### Del Modelo Poblacional al Modelo Muestral



### Modelo poblacional (desconocido):

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i$$

Modelo muestral (estimado):

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$

### Terminología clave:

- Los "gorros" (:) indican estimaciones calculadas de la muestra
- La diferencia  $e_i = y_i \hat{y}_i$  es el **residuo** (aproximación empírica del error  $\varepsilon_i$ )
- ullet  $\hat{y}_i$  es el **valor predicho** por el modelo

**Objetivo:** Usar la muestra para encontrar la "mejor" recta de ajuste

## Los Supuestos del Modelo



Para que nuestras estimaciones e inferencias sean válidas, asumimos que los errores  $\varepsilon_i$  se comportan ordenadamente:

- 1. Linealidad:  $E[Y_i|X_i] = \beta_0 + \beta_1 X_i$
- **2. Independencia**:  $\operatorname{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$  para  $i \neq j$
- **3. Homocedasticidad**:  $Var(\varepsilon_i|X_i) = \sigma^2$  (varianza constante)
- **4. Normalidad** (para inferencia):  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$

**Importancia:** Estos supuestos garantizan las **propiedades óptimas** de los estimadores de mínimos cuadrados y la **validez** de la inferencia estadística.

# El Método de Mínimos Cuadrados Ordinarios (MCO)



**Criterio:** Encontrar la recta que **minimice** la suma de los cuadrados de los errores.

$$SSE(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2$$

## ¿Por qué este criterio?

- Los errores positivos y negativos no se cancelan
- Penaliza más los errores grandes
- Tiene solución analítica única
- Proporciona estimadores con propiedades óptimas

## Interpretación geométrica:

Minimizamos la suma de las distancias verticales al cuadrado entre los puntos observados y la recta de regresión.

### Derivación de las Fórmulas de MCO



Para encontrar  $\beta_0$  y  $\beta_1$  que minimizan SSE, usamos cálculo:

#### **Derivadas parciales:**

$$\frac{\partial SSE}{\partial \beta_0} = -2\sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0$$

$$\frac{\partial SSE}{\partial \beta_1} = -2\sum_{i=1}^n x_i(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0$$

### Resolviendo el sistema (ecuaciones normales):

### Fórmula para la pendiente:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{s_{xy}}{s_{xx}} = \frac{\text{Covarianza muestral}}{\text{Varianza muestral de } X}$$

### Fórmula para el intercepto:

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

# Propiedades de las Predicciones



Las estimaciones MCO generan predicciones  $(\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i)$  con propiedades matemáticas específicas:

**①** La recta pasa por el centro de los datos:  $(\bar{x}, \bar{y})$ 

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

**Demostración:** Sumando la ecuación de predicción para todas las observaciones:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

Promedio de predicciones = Promedio observado:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{y}_i = \bar{y}$$

Importancia: La recta de regresión siempre pasa por el punto central de los datos

## Propiedades de los Residuos



Los residuos MCO ( $e_i = y_i - \hat{y}_i$ ) tienen **propiedades fundamentales**:

 $\odot$  Suma de residuos = 0:

$$\sum_{i=1}^{n} e_i = 0$$

**\bigcirc** Residuos no correlacionados con X:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i e_i = 0$$

Residuos no correlacionados con predicciones:

$$\sum_{i=1}^{n} \hat{y}_i e_i = 0$$

**Implicación:** Estas propiedades garantizan que MCO es **insesgado** y **óptimo** 

## Interpretación de los Coeficientes



Una vez estimados, los coeficientes tienen interpretación concreta y práctica:

# Pendiente $(\hat{\beta}_1)$ :

- Representa el cambio promedio esperado en Y por cada aumento de una unidad en X
- En nuestro ejemplo: puntos que aumenta la calificación por cada hora adicional de estudio

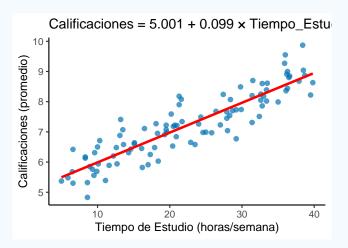
# Intercepto $(\hat{\beta}_0)$ :

- ullet Valor promedio esperado de Y cuando X=0
- Solo tiene sentido práctico si  ${\cal X}=0$  es plausible y está en el rango de los datos
- A menudo es solo un "ancla matemática" para la recta

**Nota importante:** La interpretación siempre debe considerar el contexto del problema y la plausibilidad de los valores.

# Aplicación: Ajuste del Modelo en Nuestro Ejemplo





**Interpretación:** Por cada hora adicional de estudio, la calificación aumenta en promedio 0.099 puntos.

## Propiedades de los Estimadores de MCO



Bajo los supuestos de Gauss-Markov, los estimadores MCO son **MELI** (Mejores Estimadores Lineales Insesgados):

### 1. Insesgadez:

$$E[\hat{\beta}_0] = \beta_0 \quad \text{y} \quad E[\hat{\beta}_1] = \beta_1$$

- 2. Varianza mínima: Entre todos los estimadores lineales insesgados
- 3. Varianzas conocidas:

### Para la pendiente:

$$Var(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$$

donde  $S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2$  es la suma de cuadrados de X

#### Para el intercepto:

$$Var(\hat{\beta}_0) = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}} \right] = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right]$$

## Estimación de la Varianza del Error



Las fórmulas de varianza dependen de  $\sigma^2$  (desconocida). La estimamos con:

### Media Cuadrática del Error (MSE):

$$\hat{\sigma}^2 = MSE = \frac{SSE}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}$$

¿Por qué n-2? - Son los grados de libertad del error - Hemos "gastado" 2 grados de libertad estimando  $\beta_0$  y  $\beta_1$ 

#### Error estándar de los residuos:

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\mathsf{MSE}}$$

También llamado **RMSE** en *machine learning*  $\rightarrow$  Mide la dispersión promedio alrededor de la recta

# Análisis de la Varianza (ANOVA) para la Regresión



Pregunta clave: ¿Es el modelo útil o la relación observada es casualidad?

### Contraste de hipótesis:

- $H_0: \beta_1 = 0$  (no hay relación lineal)
- $H_1: \beta_1 \neq 0$  (sí hay relación lineal)

### Descomposición de la variabilidad total:

$$SST = SSR + SSE$$

**Esta ecuación es fundamental:** Toda la variabilidad se divide en **explicada** y **no explicada** 

# Suma Total de Cuadrados (SST)



#### Definición:

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

#### ¿Qué mide?

- ullet La **variabilidad total** de Y respecto a su media  $ar{y}$
- Es la varianza muestral de Y multiplicada por (n-1)
- Representa toda la dispersión que queremos explicar con nuestro modelo

### Interpretación:

Si no tuviéramos ningún modelo y solo usáramos  $\bar{y}$  para predecir, SST sería el **error total** que cometeríamos.

# Suma de Cuadrados de la Regresión (SSR)



#### Definición:

$$SSR = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

#### ¿Qué mide?

- La variabilidad que **explica** nuestro modelo de regresión
- ullet Es la variabilidad de las predicciones  $\hat{y}_i$  respecto a la media  $ar{y}$
- Representa la señal que nuestro modelo logra captar

### Interpretación:

Mide cuánto  $\mathbf{mejor}$  es nuestro modelo comparado con simplemente usar  $\bar{y}$  como predicción.

## Suma de Cuadrados del Error (SSE)



#### Definición:

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

#### ¿Qué mide?

- La variabilidad **no explicada** por nuestro modelo
- Es la suma de los cuadrados de los residuos
- Representa el ruido que nuestro modelo no puede captar

## Interpretación:

Es exactamente lo que **minimiza el método MCO** para encontrar la mejor recta.

## La Descomposición Fundamental de la Variabilidad



### La ecuación clave:

$$SST = SSR + SSE$$

#### Interpretación intuitiva:

### En palabras:

- SST: "¿Cuánta variabilidad hay que explicar?"
- SSR: "¿Cuánta variabilidad explica mi modelo?"
- **SSE**: "¿Cuánta variabilidad queda sin explicar?"

#### En porcentajes:

- **SST**: 100% de la variabilidad
- SSR: % explicado por el modelo
- SSE: % no explicado (error)

**Consecuencia:** Si SSR es grande comparado con SSE  $\rightarrow$  El modelo es útil

### El Estadístico F



#### Estadístico F:

$$F = \frac{\mathsf{MSR}}{\mathsf{MSE}} = \frac{\mathsf{SSR}/1}{\mathsf{SSE}/(n-2)}$$

### Interpretación:

- MSR: Variabilidad explicada por grado de libertad
- MSE: Variabilidad no explicada por grado de libertad
- F: Ratio entre variabilidad explicada vs no explicada

# La Lógica del Contraste F (I): Si No Hay Relación



## Si $H_0: \beta_1 = 0$ fuera cierta (no hay relación lineal):

- ullet El modelo lineal sería **inútil** para explicar Y
- ullet Todas las predicciones  $\hat{y}_i$  serían iguales a  $ar{y}$
- Por tanto: SSR =  $\sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i \bar{y})^2 \approx 0$  (muy pequeña)

#### Consecuencia matemática:

$$F = \frac{\mathsf{SSR}/1}{\mathsf{SSE}/(n-2)} \approx \frac{0}{\mathsf{MSE}} \approx 0$$

En palabras: Si no hay relación, F debería ser cercano a cero

# La Lógica del Contraste F (II): Si Hay Relación



### Si $H_1: \beta_1 \neq 0$ fuera cierta (sí hay relación lineal):

- ullet El modelo **captura** la relación entre X e Y
- ullet Las predicciones  $\hat{y}_i$  varían siguiendo el patrón de los datos
- Por tanto: SSR sería grande (el modelo explica mucha variabilidad)

#### Consecuencia matemática:

$$F = \frac{\mathsf{SSR} \; \mathsf{grande}}{\mathsf{MSE}} >> 1$$

#### Decisión estadística:

- ullet  ${f F}pprox{f 0} o{f N}$ o rechazamos  $H_0 o{f E}$ l modelo no es útil
- **F** »  $\mathbf{1} \to \mathsf{Rechazamos} \ H_0 \to \mathsf{El} \ \mathsf{modelo} \ \mathsf{si} \ \mathsf{es} \ \mathsf{\acute{u}til}$



## Tabla ANOVA: Resumen de la Descomposición



Fuente	df	SS	MS = SS/df	Estadístico $F$
Regresión	1	SSR	MSR	F = MSR/MSE
Error	n-2	SSE	MSE	
Total	n-1	SST		

#### ¿Cómo leer esta tabla?

- Fila "Regresión": Cuantifica lo que el modelo explica
- Fila "Error": Cuantifica lo que el modelo no explica
- Fila "Total": La variabilidad total que queremos explicar

#### El estadístico F resume todo:

$$F = \frac{\text{Variabilidad explicada por df}}{\text{Variabilidad no explicada por df}} = \frac{MSR}{MSE}$$

**Equivalencia importante:** En regresión simple,  $F=t^2$  donde t es el estadístico para contrastar  $\beta_1=0$ 



El  $\mathbb{R}^2$  cuantifica **qué proporción** de la variabilidad total es explicada por el modelo:

$$R^2 = \frac{\mathsf{SSR}}{\mathsf{SST}} = 1 - \frac{\mathsf{SSE}}{\mathsf{SST}}$$

#### Interpretación:

- $R^2=0$ : El modelo no explica nada (tan malo como usar  $\bar{y}$ )
- $R^2=1$ : El modelo explica toda la variabilidad (ajuste perfecto)
- ullet  $R^2=0.7$ : El modelo explica el 70% de la variabilidad

En regresión simple:  $R^2 = r^2$  (cuadrado de la correlación)

Precaución: Un  $\mathbb{R}^2$  alto no garantiza un buen modelo ni implica causalidad

## Inferencia sobre los Coeficientes



Para realizar inferencias necesitamos el supuesto de **normalidad** de los errores.

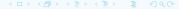
#### Distribución de los estimadores:

$$\hat{\beta}_1 \sim N\left(\beta_1, \frac{\sigma^2}{S_{xx}}\right)$$
  $\hat{\beta}_0 \sim N\left(\beta_0, \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}\right]\right)$ 

### Estadístico t para la pendiente:

$$t = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\mathsf{SE}(\hat{\beta}_1)} \sim t_{n-2}$$

donde 
$${\sf SE}(\hat{eta}_1) = \sqrt{\frac{{\sf MSE}}{S_{xx}}}$$



# Contraste de Hipótesis y Intervalos de Confianza



### Contraste para la pendiente:

- $H_0: \beta_1 = 0 \text{ vs } H_1: \beta_1 \neq 0$
- Estadístico:  $t_0 = \frac{\hat{\beta}_1}{\mathsf{SE}(\hat{\beta}_1)}$
- ullet Decisión: Rechazar  $H_0$  si  $|t_0|>t_{lpha/2,n-2}$

Intervalo de confianza al  $(1-\alpha)100\%$  para  $\beta_1$ :

$$\hat{\beta}_1 \pm t_{\alpha/2,n-2} \cdot \mathsf{SE}(\hat{\beta}_1)$$

**Interpretación:** Si el IC no contiene el cero  $\rightarrow \beta_1$  es significativo

## Resultados del Modelo en Nuestro Ejemplo



```
Call:
lm(formula = Calificaciones ~ Tiempo_Estudio, data = datos)
Residuals:
    Min
              10 Median
                               30
                                      Max
-1.11465 -0.30262 -0.00942 0.29509 1.10533
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 5.00118 0.11977 41.76 <2e-16 ***
Tiempo_Estudio 0.09875 0.00488 20.23 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' 1
Residual standard error: 0.4842 on 98 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8069, Adjusted R-squared: 0.8049
F-statistic: 409.5 on 1 and 98 DF, p-value: < 2.2e-16
```

## Interpretación de los Resultados



#### Coeficientes:

- Intercepto:  $5.001 \rightarrow \text{Calificación esperada cuando el tiempo de estudio es 0 horas}$
- **Pendiente:**  $0.0987 \rightarrow Por cada hora adicional de estudio, la calificación aumenta en promedio <math>0.0987$  puntos

**Bondad de ajuste: R-cuadrado:**  $0.8069 \rightarrow \text{El modelo explica el } 80.7\%$  de la variabilidad en las calificaciones

### Significancia:

- ullet Coeficientes: Ambos son altamente significativos (p < 2e-16)
- Modelo global: F = 409.5 con p < 2.2e-16  $\rightarrow$  El modelo es estadísticamente útil

**Error estándar residual:**  $0.484 \rightarrow \text{Dispersión típica alrededor de la recta de regresión$ 

### Predicción con el Modelo



Una vez validado, usamos el modelo para **hacer predicciones**. Hay dos tipos:

#### 1. Intervalo de confianza para la respuesta media:

- Pregunta: ¿Cuál es la calificación *promedio* esperada para todos los estudiantes que estudian  $x_0$  horas?
- Estima dónde se encuentra la línea de regresión verdadera

#### 2. Intervalo de predicción para una respuesta individual:

- Pregunta: ¿Entre qué valores esperamos la calificación de *un* estudiante específico que estudia  $x_0$  horas?
- Considera tanto la incertidumbre del modelo como la variabilidad individual

**Diferencia clave:** El intervalo de predicción siempre es **más ancho** porque incluye la variabilidad  $\sigma^2$  del error individual.

# Fórmulas para Predicción



### Intervalo de confianza para la respuesta media:

$$\hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2,n-2} \cdot \sqrt{\mathsf{MSE}\left(\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}\right)}$$

### Intervalo de predicción para respuesta individual:

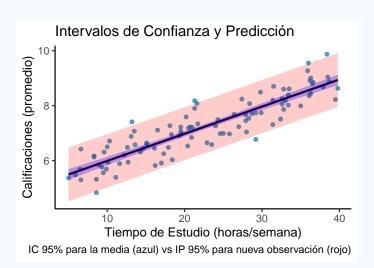
$$\hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2, n-2} \cdot \sqrt{\mathsf{MSE}\left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}\right)}$$

### Observaciones importantes:

- ullet Ambos intervalos son más estrechos cerca del **centro** de los datos  $(ar{x})$
- La diferencia entre ambos es el término "+1" que representa  $\sigma^2$
- Nunca extrapolar más allá del rango de los datos observados

### Visualización de los Intervalos de Predicción





## El Diagnóstico del Modelo: Fundamento Teórico



### ¿Por qué es crucial el diagnóstico?

El diagnóstico **NO** es opcional. Las inferencias estadísticas (p-valores, intervalos de confianza, predicciones) solo son válidas si se cumplen los supuestos del modelo.

### Consecuencias de ignorar el diagnóstico:

- Estimadores sesgados → Conclusiones erróneas
- Errores estándar incorrectos → Intervalos de confianza y p-valores inválidos
- Predicciones poco fiables → Pérdida de poder predictivo

Filosofía del diagnóstico: Los residuos son la "ventana" hacia los errores verdaderos  $\varepsilon_i$ 

## Los Cuatro Pilares del Diagnóstico



### Recordatorio de supuestos:

- **1** Linealidad:  $E[Y_i|X_i] = \beta_0 + \beta_1 X_i$
- **② Independencia**:  $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$  para  $i \neq j$
- **Output** Homocedasticidad:  $Var(\varepsilon_i|X_i) = \sigma^2$  (varianza constante)
- **Normalidad**:  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  (para inferencia)

Herramienta fundamental: Análisis de residuos  $(e_i = y_i - \hat{y}_i)$ 

**Principio clave:** Si los supuestos se cumplen, los residuos deben comportarse como **ruido aleatorio** sin patrones sistemáticos

# Diagnóstico: Linealidad



**Supuesto:**  $E[Y|X] = \beta_0 + \beta_1 X$  (relación promedio es lineal)

### Métodos de Diagnóstico:

- Gráfico: Residuos vs Valores Ajustados
- Test estadístico: Test de Ramsey RESET (Regression Equation Specification Error Test)

### ¿Qué buscamos?

- Patrón ideal: Nube aleatoria de puntos centrada en cero
- Violación: Patrón curvilíneo (forma de "U" o parábola)

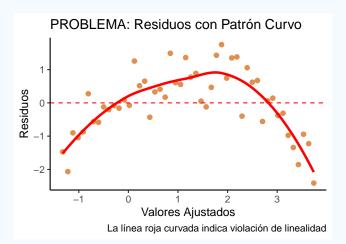
### Test de Ramsey RESET:

- H<sub>0</sub>: La forma funcional es correcta (lineal)
- H<sub>1</sub>: La forma funcional es incorrecta (no lineal)
- Añade términos  $\hat{y}^2, \hat{y}^3, ...$  al modelo y testa su significancia

# Violación del supuesto: NO Linealidad



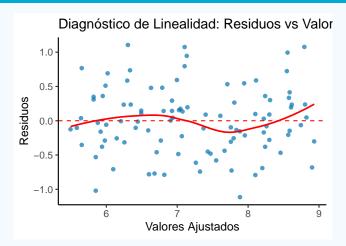
Problema: Ajustar un modelo lineal a datos con relación cuadrática



Diagnóstico: Patrón curvo en residuos → NO linealidad

### Verificación de linealidad





#### Resultados:

- ullet Gráfico: Línea roja prácticamente plana o Linealidad
- Test RESET: F = 1.051,  $p = 0.353 \rightarrow Forma funcional correcta$

# Diagnóstico: Homocedasticidad



**Supuesto:**  $Var(\varepsilon_i|X_i) = \sigma^2$  (varianza constante)

### Métodos de Diagnóstico:

- **Gráficos:** Scale-Location, Residuos vs Valores Ajustados
- Tests estadísticos: Test de Breusch-Pagan, Test de Goldfeld-Quandt, Test de White

#### ¿Qué buscamos?

- Patrón ideal: Dispersión constante a lo largo del rango
- Violación: Forma de "embudo" (dispersión creciente o decreciente)

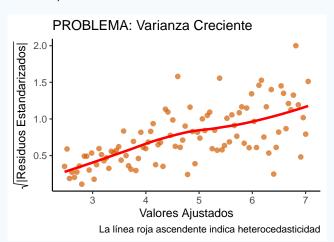
#### Tests de Heterocedasticidad:

- ullet Breusch-Pagan:  $H_0$ : Homocedasticidad,  $H_1$ : Heterocedasticidad
- White: Versión robusta que no asume forma específica de heterocedasticidad

# Violación del Supuesto: NO Homocedasticidad



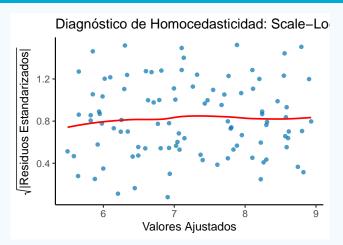
**Problema:** Varianza de los errores que aumenta con los valores predichos (heterocedasticidad)



**Diagnóstico:** Tendencia creciente → **Heterocedasticidad** (violación de oceanical de oceanical

### Verficación de homocedasticidad





#### Resultados:

- $\bullet$  Gráfico: Línea roja horizontal  $\to$  Varianza constante
- Breusch-Pagan: LM = 0.02, p =  $0.889 \rightarrow Homocedasticidad$

# Diagnóstico: Normalidad



**Supuesto:**  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  (errores normalmente distribuidos)

**Métodos de Diagnóstico: - Gráficos:** Normal Q-Q Plot, Histograma de residuos - **Tests estadísticos:** Test de Shapiro-Wilk, Test de Jarque-Bera, Test de Anderson-Darling

¿Qué buscamos? - Q-Q Plot ideal: Puntos sobre la línea diagonal - Violación: Desviaciones sistemáticas de la línea (colas pesadas, asimetría)

**Tests de Normalidad:** - **Shapiro-Wilk:** H<sub>0</sub>: Los residuos siguen distribución normal - **Jarque-Bera:** Basado en asimetría y curtosis - **Anderson-Darling:** Más sensible en las colas de la distribución

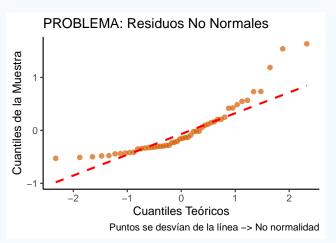
### ¿Qué buscamos?

- Patrón ideal: Puntos siguen la línea diagonal
- **Violación:** Desviaciones sistemáticas de la línea (colas pesadas, asimetría)

# Violación del Supuesto: NO Normalidad



Problema: Errores con distribución asimétrica o con colas pesadas

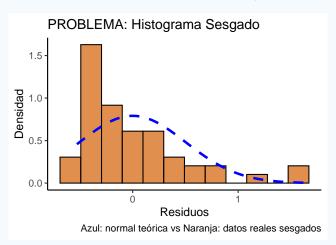


**Diagnóstico:** Puntos se alejan sistemáticamente de la línea → **NO** normalidad

# Violación del Supuesto: Histograma NO Normal



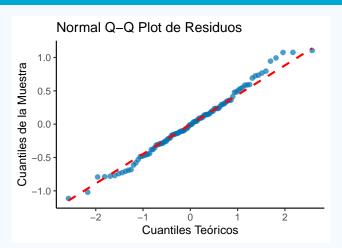
Problema: Distribución asimétrica de los residuos (histograma sesgado)



**Diagnóstico:** Distribución sesgada  $\neq$  curva normal  $(p = 0) \rightarrow NO$  normalidad

### Verificación de normalidad





**Resultados:** - **Gráfico:** Puntos siguen la línea diagonal  $\rightarrow$  Normalidad - **Shapiro-Wilk:** W = 0.99, p = 0.671  $\rightarrow$  Normalidad - **Jarque-Bera:** JB = 0.685, p = 0.71  $\rightarrow$  Normalidad

# Diagnóstico: Normalidad (Histograma)



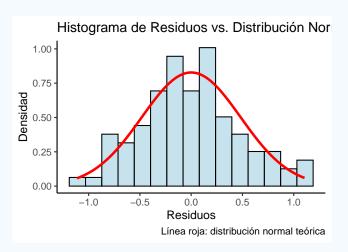
**Complemento visual:** Histograma de residuos con curva normal superpuesta

### ¿Qué buscamos?

- Patrón ideal: Distribución simétrica y campaniforme
- Violación: Asimetría marcada o múltiples modas

### Verificación de normalidad





**Resultado:** Distribución simétrica y campaniforme  $\rightarrow$  Normalidad confirmada

# Diagnóstico: Independencia



**Supuesto:**  $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$  para  $i \neq j$  (errores independientes)

### Métodos de Diagnóstico:

- Gráfico: Residuos vs Orden de observación
- **Tests estadísticos:** Test de Durbin-Watson, Test de Breusch-Godfrey (LM), Ljung-Box

### ¿Qué buscamos?

- Patrón ideal: Residuos sin patrones temporales o secuenciales
- Violación: Tendencias, ciclos, o correlaciones entre residuos consecutivos

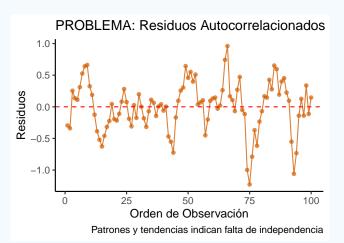
#### Tests de Autocorrelación:

- **Durbin-Watson:** H<sub>0</sub>: No hay autocorrelación de primer orden ( $\rho = 0$ )
- **Breusch-Godfrey:** Generaliza DW para órdenes superiores y regresores retardados
- Ljung-Box: Testa autocorrelación conjunta en múltiples retardos

# Violación del Supuesto: NO Independencia



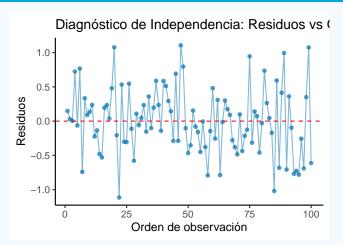
Problema: Residuos con autocorrelación (típico en series temporales)



Diagnóstico: Patrones sistemáticos y tendencias → NO independencia

## Verificación de Independencia





**Resultados:** - **Gráfico:** Sin patrones temporales  $\rightarrow$  Independencia - **Durbin-Watson:** DW = 2.056, p = 0.61  $\rightarrow$  Sin autocorrelación orden 1 - **Breusch-Godfrey:** LM = 0.14, p = 0.932  $\rightarrow$  Sin autocorrelación orden 2.

# Diagnóstico 5: Observaciones Influyentes



**Objetivo:** Identificar puntos que tienen influencia desproporcionada en el modelo

### Métricas Principales:

- Leverage  $(h_{ii})$ : Distancia en el espacio X (valores atípicos en X)
- Residuos Estudentizados: Outliers en Y ajustado por su varianza
- Distancia de Cook  $(D_i)$ : Influencia global en los coeficientes

#### Umbrales de Referencia:

- Leverage:  $h_{ii} > \frac{2(k+1)}{n}$  (k = número de predictores)
- Cook:  $D_i > \frac{4}{n-k-1}$  (regla conservadora)
- Residuos:  $|t_i| > 2$  (fuera de 2 desviaciones estándar)

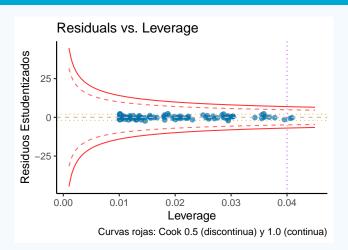
Bajo leverage + alto residuo = Outlier sin influencia

#### Combinaciones Problemáticas:

- Alto leverage + alto residuo = Muy influyente
- Alto leverage + bajo residuo = Punto de anclaje (puede ser bueno)
- Víctor Aceña Isaac Martín (DSLab)

# Diagnóstico: Observaciones Influyentes





Resultados: - Leverage máximo: 0.041 (umbral: 0.04) - Cook máximo: 0.095 (umbral: 0.041) - Outliers ( $|\mathbf{t}| > 2$ ): 6 observaciones - Conclusión: Revisar observaciones: 24, 74, 6, 20, 47, 85, 87, 89

## Análisis de Puntos Influyentes



#### Identificación:

- Outliers: observaciones 20, 22, 47, 85, 89, 99
- Alto leverage: observaciones 24, 74

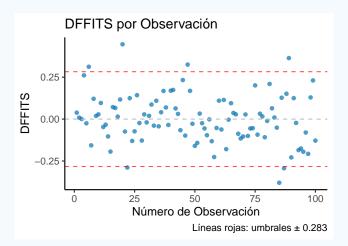
#### Interpretación por regiones:

- **Zona derecha:** Alto leverage (X atípicos)  $\rightarrow$  Potencial influyente
- Zona izquierda: Outliers (Y atípicos) → Residuos grandes
- Esquinas críticas: ¡Vacías! (Situación favorable)
- Distancia de Cook: Influencia moderada (< 1.0)

**Conclusión:** No hay solapamiento leverage + outlier  $\rightarrow$  Situación manejable

# Diagnóstico DFFITS





### Análisis de Resultados DFFITS



**DFFITS:** Evalúa cómo cada observación afecta a su propia predicción

#### Resultados cuantitativos:

- Umbral de influencia: 0.283
- Observaciones influyentes: 7 observaciones (6, 20, 22, 47, 85, 87, 89)
- Top 5 |DFFITS|: observaciones 20, 85, 89, 47, 6
- Valores: 0.446, -0.38, 0.364, 0.325, 0.312

### Interpretación:

- **Observación 20:** DFFITS = 0.446 (la más influyente)
- Conclusión: 7 observaciones cambian significativamente sus propias predicciones → Investigar casos especiales

# Diagnóstico Completo: Supuestos Básicos



**Ejemplo:** Modelo horas\_estudio ~ nota\_examen (n=100)

- 1. LINEALIDAD: [OK] CUMPLIDO
  - Gráfico: Línea loess prácticamente plana en Residuos vs Ajustados
  - Test RESET: F = 1.051,  $p = 0.353 \rightarrow Forma$  funcional correcta
- 2. HOMOCEDASTICIDAD: [OK] CUMPLIDO
  - Scale-Location: Línea horizontal, dispersión constante
  - ullet Breusch-Pagan: LM = 0.02, p = 0.889 o Varianza constante
  - $\bullet \ \ \textbf{White:} \ \ LM = 0.122, \ p = 0.941 \rightarrow Confirmado$

# Diagnóstico Completo: Supuestos Distribucionales



**Ejemplo:** Modelo horas\_estudio ~ nota\_examen (n=100)

- 3. NORMALIDAD: [OK] CUMPLIDO
  - Q-Q Plot: Puntos siguen línea diagonal perfectamente
  - Shapiro-Wilk: W = 0.99,  $p = 0.671 \rightarrow Normalidad confirmada$
  - Jarque-Bera: JB = 0.685,  $p = 0.71 \rightarrow Distribución normal$
- 4. INDEPENDENCIA: [OK] CUMPLIDO
  - Residuos vs Orden: Sin patrones temporales o secuenciales
  - **Durbin-Watson:** DW = 2.056, p =  $0.61 \rightarrow Sin$  autocorrelación
  - Breusch-Godfrey: LM = 0.14, p =  $0.932 \rightarrow$  Independencia confirmada

# Diagnóstico Completo: Observaciones Influyentes



**Ejemplo:** Modelo horas\_estudio ~ nota\_examen (n=100)

### **DETECCIÓN DE PUNTOS PROBLEMÁTICOS:**

- Outliers: 6 observaciones con |t| > 2
- Alto Leverage: 2 observaciones de alta palanca
- **DFFITS** influyentes: 7 observaciones que cambian sus predicciones
- Cook influyentes: 6 observaciones con alta influencia global

### **EVALUACIÓN DE RIESGO:**

- **Situación:** [OK] Favorable Sin solapamiento crítico leverage + outlier
- Acción: Revisar 9 observaciones específicas

# Veredicto Final del Diagnóstico



**Ejemplo:** Modelo horas\_estudio ~ nota\_examen (n=100)

#### Interpretación completa:

- Por cada hora adicional de estudio, la calificación aumenta en promedio 0.099 puntos
- El modelo explica el **80.7%** de la variabilidad en las calificaciones
- La relación es altamente significativa (p < 0.001)
- ullet Todos los **supuestos se cumplen** o Las inferencias son válidas
- Existen obsrevaciones influyentes que requieren atención

# Conclusiones y Próximos Pasos



### Lo que hemos aprendido:

**Proceso completo** de modelado: exploración  $\to$  formalización  $\to$  estimación  $\to$  inferencia  $\to$  diagnóstico

Interpretación de coeficientes y medidas de bondad de ajuste

Validación mediante diagnóstico de supuestos

Limitaciones de la correlación vs. causalidad

### Próximo tema: Regresión Lineal Múltiple

- Múltiples variables predictoras
- Control de variables confusas
- Interacciones entre predictores
- Selección de variables

La regresión simple es el fundamento  $\rightarrow$  Todos estos conceptos escalan directamente

#### Referencias



- Draper, N. R., & Smith, H. (1998). Applied regression analysis (3rd ed.). Wiley.
- Fox, J., & Weisberg, S. (2018). An R companion to applied regression (3rd ed.). Sage.
- Harrell Jr, F. E. (2015). *Regression modeling strategies* (2nd ed.). Springer.
- James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2021). An introduction to statistical learning (2nd ed.). Springer.
- Kutner, M. H., Nachtsheim, C. J., Neter, J., & Li, W. (2005). Applied linear statistical models (5th ed.). McGraw-Hill/Irwin.

# Regresión Lineal Múltiple

Víctor Aceña - Isaac Martín

DSLab

2025-08-17





## El Modelo de Regresión Lineal Múltiple



El modelo de regresión lineal múltiple constituye la **extensión natural y más potente** del modelo simple.

#### Diferencias clave:

### Regresión Simple:

- Una variable respuesta
- Un único predictor
- Relación bivariada

#### Capacidades únicas:

### Regresión Múltiple:

- Una variable respuesta
- Múltiples predictores
- Relación multivariada
- Modelar simultáneamente el efecto de múltiples variables predictoras
- Interpretación de coeficientes en presencia de otros predictores
- Diagnóstico específico del modelo múltiple
- Manejo de la multicolinealidad



# Objetivos de Aprendizaje



Al finalizar este tema, serás capaz de:

- Formular y estimar modelos de regresión lineal múltiple, comprendiendo las diferencias clave respecto al caso simple
- Interpretar coeficientes en el contexto multivariante, entendiendo el concepto de ceteris paribus
- Realizar inferencia estadística construyendo intervalos de confianza y contrastes de hipótesis
- Evaluar la calidad del ajuste usando medidas como R<sup>2</sup>, R<sup>2</sup> ajustado y descomposición ANOVA
- Diagnosticar el modelo múltiple aplicando técnicas específicas como gráficos CPR
- Identificar y tratar la multicolinealidad usando el VIF como herramienta de diagnóstico
- Realizar predicciones distinguiendo entre intervalos de confianza e intervalos de predicción

## Formulación del Modelo Poblacional



Para n observaciones y p variables predictoras, el **modelo poblacional** postula:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \dots + \beta_p X_{ip} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

### **Componentes:**

- Y<sub>i</sub>: i-ésima variable respuesta aleatoria
- ullet  $X_{ij}$ : i-ésima variable predictora aleatoria del j-ésimo predictor
- $\varepsilon_i$ : término de error aleatorio
- $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ : coeficientes poblacionales verdaderos pero desconocidos

#### Características clave:

- Relación lineal en los parámetros
- Los errores son no observables
- Los parámetros son constantes poblacionales

# Formulación del Modelo Muestral



En la práctica, trabajamos con datos observados y estimamos el modelo:

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \hat{\beta}_2 x_{i2} + \dots + \hat{\beta}_p x_{ip}, \quad i = 1, \dots, n$$

## **Componentes:**

- $\hat{y}_i$ : *i*-ésima predicción
- $x_{ij}$ : *i*-ésima observación del *j*-ésimo predictor
- $\hat{\beta}_j$ : coeficientes estimados

# Interpretación clave de $\hat{\beta}_j$ :

El cambio estimado en la media de Y ante un cambio de una unidad en  $X_j$ , manteniendo constantes todas las demás variables predictoras.

Este principio se conoce como *ceteris paribus* ("lo demás constante")



# Notación Matricial: Modelo Poblacional



## Modelo poblacional:

$$\mathbf{Y} = \tilde{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \quad \tilde{X} = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np} \end{bmatrix}$$

$$oldsymbol{eta} = egin{bmatrix} eta_0 \ eta_1 \ dots \ eta_p \end{bmatrix}, \quad oldsymbol{arepsilon} = egin{bmatrix} arepsilon_1 \ arepsilon_2 \ dots \ arepsilon_n \end{bmatrix}$$

**Nota:**  $ilde{X}$  contiene variables aleatorias (mayúsculas  $X_{ij}$ )



#### Modelo muestral:

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

$$\hat{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_p \end{bmatrix}$$

### **Observaciones:**

- X contiene datos observados (minúsculas  $x_{ij}$ )
- X y  $\tilde{X}$  son matrices de dimensión  $n \times (p+1)$
- ullet La primera columna de unos corresponde al intercepto  $eta_0$



# Supuestos del Modelo Lineal Múltiple



#### Condiciones de Gauss-Markov:

- ① Linealidad en los parámetros: El modelo  $E[\mathbf{Y}|\tilde{X}] = \tilde{X}\boldsymbol{\beta}$  está bien especificado
- **Q** Exogeneidad: Los errores tienen media cero:  $E[oldsymbol{arepsilon}| ilde{X}]=\mathbf{0}$
- **1** Homocedasticidad e independencia:  $\mathrm{Var}(oldsymbol{arepsilon}| ilde{X}) = \sigma^2\mathbf{I}_n$
- **Ausencia de multicolinealidad perfecta:**  ${\bf X}$  tiene rango completo (p+1)
- **1** Normalidad (para inferencia):  $\varepsilon \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$

**Implicación:** Estos supuestos garantizan que los estimadores MCO sean **insesgados, consistentes y eficientes** 

# Estimación por Mínimos Cuadrados: Función Objetivo



**Principio:** Minimizar la discrepancia entre valores observados y predichos **Función objetivo:** 

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

## ¿Por qué cuadrados?

- Los residuos positivos y negativos no se cancelan
- Se penalizan más fuertemente los errores grandes
- Facilita el tratamiento matemático

**Resultado:** MCO minimiza la **Suma de los Cuadrados de los Residuos** (SSR)

# Derivación de las Ecuaciones Normales



### Expandiendo la función objetivo:

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X}) \boldsymbol{\beta}$$

Derivando respecto a  $\beta$ :

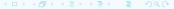
$$\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) \boldsymbol{\beta}$$

Igualando a cero:

$$-2\mathbf{X}^T\mathbf{y} + 2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{0}$$

**Ecuaciones Normales:** 

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) \hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$



# Solución MCO y Condición de Invertibilidad



### Solución única:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

Condición necesaria: La matriz  $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})$  debe ser invertible

## ¿Cuándo es invertible?

- Cuando X tiene rango completo (p+1)
- Cuando las columnas de X son linealmente independientes
- Cuando no hay multicolinealidad perfecta

# Propiedades de $(X^TX)$ :

- Dimensión:  $(p+1) \times (p+1)$
- Simétrica
- Definida positiva (si es invertible)



# Propiedades de los Estimadores MCO



## Bajo los supuestos de Gauss-Markov:

- Insesgados:  $E[\hat{\boldsymbol{\beta}}] = \boldsymbol{\beta}$
- Eficientes: Varianza mínima entre todos los estimadores lineales insesgados
- **3** Consistentes:  $\hat{\beta} \xrightarrow{p} \beta$  cuando  $n \to \infty$

#### Matriz de varianza-covarianza:

$$\mathsf{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$$

# Bajo normalidad adicional:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim N\left(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\right)$$

# Estimación de la Varianza del Error



## Estimador insesgado de $\sigma^2$ :

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\text{SSE}}{n-p-1} = \frac{\sum_{i=1}^n e_i^2}{n-p-1} = \frac{\mathbf{e}^T \mathbf{e}}{n-p-1}$$

## **Grados de libertad:** n-p-1

- n: número de observaciones
- p+1: número de parámetros estimados

### Distribución:

$$\frac{(n-p-1)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-p-1}^2$$

#### Error estándar de los coeficientes:

$$\hat{\sigma}_{\beta_j} = \hat{\sigma} \sqrt{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})_{jj}^{-1}}$$



# Ejemplo: Modelo de Precios de Viviendas



Datos: Precios de viviendas basados en características

### Variables predictoras:

- superficie: Metros cuadrados
- habitaciones: Número de habitaciones
- antiguedad: Años de antigüedad
- distancia\_centro: Distancia al centro (km)
- garaje: Presencia de garaje (Sí/No)

# Interpretación de los Coeficientes



## Coeficiente de regresión parcial:

$$\beta_j = \frac{\partial E[Y|\tilde{X}]}{\partial X_j}$$

Interpretación:  $\beta_j$  representa el cambio esperado en Y por una unidad de cambio en  $X_j$ , manteniendo todas las demás variables constantes

#### Diferencia crucial:

### Regresión Simple:

- Efecto total (directo + indirecto)
- Puede estar confundido
- $\hat{\beta}_i$  captura toda la asociación

## Regresión Múltiple:

- Efecto puro o parcial
- Controla por otras variables
- Interpretación más causal

Concepto clave: El coeficiente proviene de una regresión entre residuos

# Ejemplo: Interpretación Ceteris Paribus



	Estimate	Std. Error
(Intercept)	53750.9705	6666.70624
superficie	1171.7780	47.28087
habitaciones	15072.3104	1303.41715
antiguedad	-744.5896	75.42075
${\tt distancia\_centro}$	-2028.2715	164.87756
garajeSí	25829.4317	2349.44285

### Interpretación ceteris paribus:

- Superficie (+1,172 €/m²): Cada m² adicional incrementa el precio
- Habitaciones (+15,072 €): Cada habitación adicional aumenta el precio
- Antigüedad (-745 €/año): Cada año de antigüedad reduce el precio
- **Distancia centro** (-2,028 €/km): Cada km más lejos del centro reduce el precio
- Garaje (+25,829 €): Tener garaje incrementa el precio

# Evaluación del Modelo: Descomposición de la Varianza 👼



## Descomposición ANOVA:

$$SST = SSR + SSE$$

#### Donde:

- SST (Sum of Squares Total):  $\sum_{i=1}^{n} (y_i \bar{y})^2$
- **SSR** (Sum of Squares Regression):  $\sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i \bar{y})^2$
- **SSE** (Sum of Squares Error):  $\sum_{i=1}^{n} (y_i \hat{y}_i)^2$

### Interpretación:

- SST: Variabilidad total en los datos
- SSR: Variabilidad explicada por el modelo
- SSE: Variabilidad no explicada (residual)

# Coeficiente de Determinación Múltiple



### R-cuadrado:

$$R^2 = \frac{\mathsf{SSR}}{\mathsf{SST}} = 1 - \frac{\mathsf{SSE}}{\mathsf{SST}}$$

## Interpretación:

- ullet Proporción de la variabilidad en Y explicada por el modelo
- Rango:  $0 \le R^2 \le 1$
- $R^2 = 0$ : El modelo no explica nada
- $R^2=1$ : El modelo explica toda la variabilidad

**Problema:**  $\mathbb{R}^2$  siempre aumenta al añadir variables (incluso irrelevantes)

En regresión múltiple:  $R^2$  es el cuadrado de la correlación entre  ${f y}$  y  $\hat{{f y}}$ 

# El Coeficiente de Determinación Ajustado



### R-cuadrado ajustado:

$$R_{\rm adj}^2 = 1 - \frac{{\rm SSE}/(n-p-1)}{{\rm SST}/(n-1)} = 1 - (1-R^2)\frac{n-1}{n-p-1}$$

## Ventajas:

- Penaliza la inclusión de variables irrelevantes
- Puede decrecer si una variable no aporta información suficiente
- Mejor para comparar modelos con diferente número de predictores

### Criterio de decisión:

- ullet Si  $R^2_{
  m adj}$  aumenta al añadir una variable ightarrow la variable es útil
- $\bullet$  Si  $R^2_{\mathrm{adj}}$  disminuye  $\to$  la variable no aporta información suficiente

# Inferencia: Contraste de Hipótesis Individual



## Hipótesis sobre un coeficiente:

$$H_0: \beta_j = 0$$
 vs  $H_1: \beta_j \neq 0$ 

#### Estadístico de contraste:

$$t = \frac{\hat{\beta}_j - 0}{\hat{\sigma}_{\beta_j}} = \frac{\hat{\beta}_j}{\hat{\sigma}\sqrt{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})_{jj}^{-1}}} \sim t_{n-p-1}$$

## Interpretación:

- ullet Rechazar  $H_0$ : La variable  $X_j$  es estadísticamente significativa
- No rechazar  $H_0$ : No hay evidencia de efecto lineal de  $X_j$  sobre Y

**Valor p:** Probabilidad de observar un estadístico t tan extremo o más, bajo  $H_0$ 

# Intervalo de Confianza para los Coeficientes



# Intervalo de confianza al $(1 - \alpha)\%$ :

$$\hat{\beta}_j \pm t_{\alpha/2, n-p-1} \cdot \hat{\sigma}_{\beta_j}$$

### Interpretación:

- Con  $(1-\alpha)\%$  de confianza, el verdadero valor de  $\beta_j$  está en este intervalo
- Si el intervalo **no contiene cero**  $\rightarrow \beta_i$  es significativo
- ullet Si el intervalo **contiene cero**  $o eta_j$  no es significativo

# Relación con el test de hipótesis:

- Intervalo de confianza del 95%  $\equiv$  Test de hipótesis con  $\alpha=0.05$
- ullet Si 0 está en el IC del 95% o No se rechaza  $H_0$  al 5%



# Inferencia Global: Test F



## Hipótesis global:

$$H_0: \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_p = 0$$
 vs  $H_1: Al \text{ menos un } \beta_j \neq 0$ 

#### Estadístico F:

$$F = \frac{\mathsf{SSR}/p}{\mathsf{SSE}/(n-p-1)} = \frac{R^2/p}{(1-R^2)/(n-p-1)} \sim F_{p,n-p-1}$$

# Interpretación:

- **Rechazar**  $H_0$ : El modelo es globalmente significativo
- No rechazar  $H_0$ : El modelo no explica variabilidad significativa

**Relación con**  $\mathbb{R}^2$ : El test F evalúa si  $\mathbb{R}^2$  es significativamente diferente de cero

# Ejemplo: Inferencia en el Modelo de Viviendas



```
Call:
lm(formula = precio ~ superficie + habitaciones + antiguedad +
   distancia_centro + garaje, data = viviendas)
Residuals:
  Min
         10 Median
                    30
                         Max
-38847 -11074
              867
                   9898 38486
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
              53750.97
                        6666.71 8.063 7.53e-14 ***
(Intercept)
superficie
            1171.78
                         47.28 24.783 < 2e-16 ***
habitaciones 15072.31 1303.42 11.564 < 2e-16 ***
antiguedad
          -744.59 75.42 -9.872 < 2e-16 ***
25829.43
                        2349.44 10.994 < 2e-16 ***
garajeSí
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 15950 on 194 degrees of freedom
```

Multiple R-squared: 0.9094, Adjusted R-squared: 0.9071 F-statistic: 389.4 on 5 and 194 DF, p-value: < 2.2e-16

# Predicción con el Modelo Múltiple



**Predicción puntual:** Para un nuevo vector  $\mathbf{x}_0$ :

$$\hat{y}_0 = \mathbf{x}_0^T \hat{\boldsymbol{\beta}}$$

## Dos tipos de intervalos:

#### Intervalo de Confianza:

- Para la respuesta media  $E[Y|\mathbf{x}_0]$
- Incertidumbre en la estimación
- Más estrecho

### Intervalo de Predicción:

- Para una observación individual  $Y_0$
- Incertidumbre + variabilidad natural
- Más amplio

**Fórmulas:** Ambos dependen de  $\hat{\sigma}^2$  y de la matriz  $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$ 

# Intervalos de Confianza y Predicción



### Intervalo de confianza para la respuesta media:

$$\hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2, n-p-1} \cdot \hat{\sigma} \sqrt{\mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0}$$

Intervalo de predicción para una observación individual:

$$\hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2, n-p-1} \cdot \hat{\sigma} \sqrt{1 + \mathbf{x}_0^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0}$$

**Diferencia clave:** El "+1" en el intervalo de predicción refleja la variabilidad adicional de una observación individual

Amplitud: Intervalo de predicción > Intervalo de confianza

# Diagnóstico del Modelo Múltiple



Una vez ajustado el modelo, es **fundamental realizar un diagnóstico exhaustivo** para verificar que los supuestos se cumplen.

Base del diagnóstico: Análisis de los residuos - nuestra ventana a los errores teóricos no observables

## Supuestos a verificar:

#### 1. Normalidad

- Gráfico Q-Q de residuos
- Test de Shapiro-Wilk

## 2. Independencia

- Residuos vs tiempo
- Test de Durbin-Watson

#### 3. Homocedasticidad

- Gráfico Scale-Location
- Test de Breusch-Pagan

# 4. Linealidad

- Residuos vs valores ajustados
- Gráficos CPR (específicos de múltiple)

# Gráficos de Componente más Residuo



**Problema:** El gráfico residuos vs ajustados puede ocultar una relación no lineal con **una variable específica** 

**Solución:** Gráficos CPR para cada predictor  $X_j$ :

Residuo Parcial 
$$=e_i+\hat{eta}_jx_{ij}$$
 vs.  $x_{ij}$ 

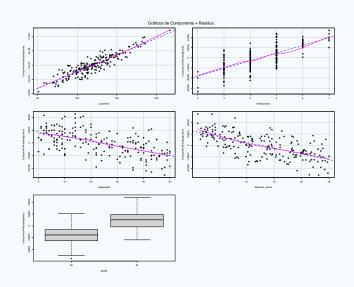
# Interpretación:

- **Línea sólida**: Relación lineal esperada (pendiente  $= \hat{eta}_j$ )
- Línea punteada: Suavizado no paramétrico
- Coincidencia: Linealidad adecuada
- ullet **Divergencia**: Posible no-linealidad o necesita transformación

**Ventaja:** Permite detectar no-linealidades específicas de cada variable

# Ejemplo: Diagnóstico con Gráficos CPR





# Interpretación de los Gráficos CPR



### ¿Qué observamos en las 5 variables?

## Superficie y Habitaciones:

- Líneas sólida y punteada coinciden
- Conclusión: Relación lineal adecuada

## Garaje:

- Separación clara entre grupos (No/Sí)
- Conclusión: Efecto categórico apropiado

**Clave:** Si las líneas divergen significativamente  $\rightarrow$  considerar transformaciones

### Antigüedad y Distancia:

- Líneas coinciden bien
- Conclusión: Linealidad confirmada

## Interpretación general:

- Relaciones lineales apropiadas
- No se necesitan transformaciones

## Multicolinealidad



¿Qué es? Correlación alta entre variables predictoras

#### Consecuencias:

- Varianza inflada: Errores estándar muy grandes
- Inestabilidad: Pequeños cambios en datos → grandes cambios en coeficientes
- Contradicciones: Modelo globalmente significativo pero ningún predictor individual significativo

**Nota importante:** La multicolinealidad **NO viola** los supuestos de Gauss-Markov, pero **arruina la interpretación práctica** 

#### Detección:

- Matriz de correlaciones: Correlaciones > 0.8 son señal de alerta
- VIF: Herramienta definitiva de diagnóstico

# Factor de Inflación de la Varianza



# Proceso de cálculo del VIF para $X_j$ :

- **Q** Regresar  $X_j$  sobre **todas las demás variables predictoras**
- ② Obtener el  $R_j^2$  de este modelo auxiliar
- Calcular:

$$VIF_j = \frac{1}{1 - R_j^2}$$

Interpretación: Factor por el cual se infla la varianza de  $\hat{\beta}_j$  debido a multicolinealidad

## Reglas prácticas:

- VIF = 1: Ausencia de colinealidad (ideal)
- VIF > 5: Valores preocupantes que requieren atención
- ullet VIF > 10: Multicolinealidad seria que debe ser tratada

# Ejemplo: Diagnóstico de Multicolinealidad



Caso 1: Sin problemas de multicolinealidad

superficie habitaciones antiguedad 1.40 1.40 1.01

distancia\_centro garaje 1.01 1.01

Caso 2: Con multicolinealidad problemática

superficie\_sim habitaciones\_sim metros\_cuadrados 86.4 8.5 81.2

Correlación superficie-metros\_cuadrados: 0.994

## Soluciones a la Multicolinealidad



## La estrategia depende del objetivo del análisis:

### 1. No hacer nada

- Si el objetivo es predicción
- Si variables colineales no son de interés

#### 2. Eliminar variables

- Quitar la menos relevante teóricamente
- Mantener la más correlacionada con Y

### 3. Combinar variables

- Crear índices compuestos
- Análisis de Componentes Principales

### 4. Métodos alternativos

- Ridge regression: Reduce varianza añadiendo sesgo
- Lasso/Elastic Net: Regresión penalizada

#### 5. Aumentar muestra

- Más datos pueden reducir correlaciones
- No siempre factible

# Observaciones Influyentes en Regresión Múltiple



## Conceptos básicos (como en regresión simple):

• Outlier: Residuo grande

Leverage: Valor atípico en predictores

• Influencia: Impacto en el modelo

## Herramientas específicas de regresión múltiple:

**DFBETAS**: Influencia sobre coeficientes individuales

$$\mathsf{DFBETA}_{j,i} = \frac{\hat{\beta}_j - \hat{\beta}_{j(-i)}}{\mathsf{se}(\hat{\beta}_{j(-i)})}$$

**Criterio:**  $|extDFBETA_{j,i}| > \frac{2}{\sqrt{n}}$  es problemático

**Ventaja:** Permite identificar qué observaciones afectan a qué coeficientes específicos

# Gráficos de Regresión Parcial



Objetivo: Visualizar la relación entre Y y  $X_j$  después de eliminar el efecto lineal de todos los demás predictores

#### Construcción:

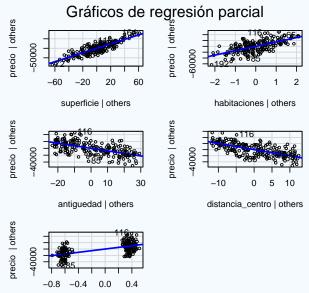
- Residuos de Y regresado sobre todos los predictores excepto  $X_j$ :  $e_{Y|X_{-j}}$
- ② Residuos de  $X_j$  regresado sobre todos los demás predictores:  $e_{X_j\mid X_{-j}}$
- **3** Graficar:  $e_{Y|X_{-j}}$  vs  $e_{X_j|X_{-j}}$

Propiedad mágica: La pendiente de la línea ajustada es exactamente  $\hat{\beta}_j$  Utilidades:

- Visualizar magnitud y significancia del efecto "ajustado"
- Detectar no-linealidades en relaciones parciales
- Identificar observaciones influyentes para coeficientes específicos

# Ejemplo: Gráficos de Regresión Parcial





# Interpretación de los Gráficos de Regresión Parcial



# ¿Qué vemos en cada gráfico?

- **Eje X**: Residuos de  $X_j$  vs. todos los demás predictores
- Eje Y: Residuos de Y vs. todos los demás predictores (excepto  $X_j$ )
- ullet Pendiente: Es exactamente el coeficiente  $\hat{eta}_j$  del modelo múltiple

### Interpretación por variable:

- Superficie: Relación lineal clara, pendiente positiva
- Habitaciones: Relación positiva, algunos puntos influyentes
- Antigüedad: Relación negativa evidente
- Distancia: Relación negativa clara
- Garaje: Separación clara entre grupos (No/Sí)

# Resumen y Conceptos Clave



### La regresión múltiple permite:

- Efectos parciales: Aislar el impacto de cada variable predictora
- Control de confusores: Reducir sesgos por variables omitidas
- Mejores predicciones: Incorporar múltiples fuentes de información
- Relaciones complejas: Modelar fenómenos multifactoriales

## Aspectos críticos:

- Interpretación condicional: Los coeficientes son efectos parciales (ceteris paribus)
- Notación matricial: Fundamental para la comprensión y computación
- Supuestos: Base para las propiedades de los estimadores
- ullet  $R^2$  ajustado: Mejor que  $R^2$  para comparar modelos
- Inferencia: Tests individuales (t) y global (F)

**Próximo paso:** Diagnóstico del modelo y tratamiento de problemas específicos

# Ingeniería de Características

Víctor Aceña - Isaac Martín

DSLab

2025-08-25





### La Ingeniería de Características como Arte y Ciencia



La **ingeniería de características** es el proceso fundamental que transforma y crea variables para maximizar la capacidad predictiva y la interpretabilidad de los modelos.

#### El problema:

- Los datos raramente están en forma óptima
- Relaciones no lineales ocultas
- Variables categóricas sin procesar
- Efectos de interacción ignorados

#### La solución:

- Transformaciones matemáticas precisas
- Codificación inteligente de categorías
- Creación de interacciones significativas
- Combinaciones y ratios informativos

**Principio clave:** "Los datos y la preparación de características determinan el límite superior del rendimiento; los modelos solo se aproximan a ese límite" - *Andrew Ng* 

### Objetivos de Aprendizaje



- Identificar cuándo aplicar transformaciones específicas según el problema detectado
- Aplicar transformaciones clásicas y avanzadas (logarítmica, Box-Cox, Yeo-Johnson) apropiadamente
- Interpretar modelos transformados comprendiendo cómo cambian los coeficientes
- Codificar variables categóricas usando ordinal encoding y one-hot encoding según su naturaleza
- Crear e interpretar interacciones entre variables continuas, categóricas y mixtas
- Aplicar ingeniería avanzada mediante combinaciones, ratios y transformaciones compuestas

# Diagnóstico: ¿Cuándo Transformar?



- Principio Clave: Diagnosticar antes de transformar.
- Riesgos de una Mala Práctica:
  - Sobreajuste: Se pierde capacidad de generalización.
  - Pérdida de Interpretabilidad: Se aplican transformaciones sin base teórica.
  - Violación de Supuestos: Solucionar un problema creando otro.
  - Sesgo de Selección: Elegir por "mejor resultado" sin justificación.

**Regla de oro**: No transformes sin un diagnóstico previo. Cada cambio debe estar justificado.

### El Enfoque Metodológico



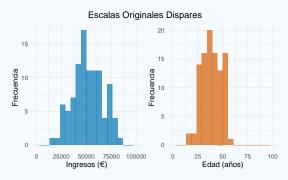
- Clave: Proceso sistemático basado en evidencia, no solo en métricas de ajuste (como el R<sup>2</sup>).
- Principios de Actuación:
  - Diagnóstico Previo: Análisis visual y estadístico.
  - Q Justificación Teórica: Base conceptual para cada transformación.
  - **3** Evaluación Integral: Medir ajuste, interpretabilidad y robustez.
  - Validación Posterior: Verificar la solución sin crear nuevos problemas.
  - **O Parsimonia:** Preferir siempre la solución más simple.

### Escalado y Normalización



### ¿Por qué escalar?

- Comparabilidad: Coeficientes en misma escala
- Regularización: Penalización justa en Ridge/Lasso
- Convergencia: Optimización más eficiente
- Interpretación: Efectos estandarizados



# Estandarización (Z-Score)



$$X_{std} = \frac{X - \bar{X}}{\sigma_X}$$

Es la técnica más común. Transforma los datos para que tengan una **media** de 0 y una desviación estándar de 1, pero preserva la forma de la distribución original.

#### **Propiedades Clave**

- Preserva la forma: Una distribución normal seguirá siendo normal.
- Comparación fácil: Permite evaluar el peso de variables con distintas unidades.
- Robustez moderada: Es menos sensible a outliers que la normalización Min-Max.

#### **Aplicaciones Comunes**

- En regresión, para comparar la importancia de los coeficientes.
- Como paso previo a PCA o análisis discriminante.
- Cuando las variables tienen distribuciones aproximadamente simétricas.

### Normalización Min-Max



$$X_{norm} = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}$$

Esta técnica escala los datos a un rango fijo, comúnmente [0, 1], donde 0 es el mínimo valor observado y 1 es el máximo.

#### Cuándo Usarlo:

- Algoritmos que requieren entradas en un rango específico, como las redes neuronales.
- Cuando la interpretación en términos de mínimo y máximo es útil para el problema.
- En datos con distribuciones uniformes o sin outliers extremos.

### Limitación Principal:

 Es muy sensible a outliers. Un solo valor extremo puede comprimir el resto de los datos en un rango muy pequeño, perdiendo información sobre su variabilidad.

#### Escalado Robusto



$$X_{robust} = \frac{X - \mathsf{mediana}(X)}{\mathsf{IQR}(X)}$$

Diseñado específicamente para datos con *outliers*. Utiliza la **mediana** y el **rango intercuartílico (IQR)**, que son medidas estadísticas no afectadas por valores extremos.

#### Principio Clave:

 Al no usar la media ni la desviación estándar, los outliers no distorsionan el resultado del escalado.

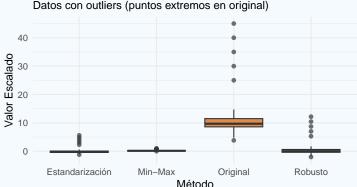
#### Cuándo Usarlo:

- Es la opción preferida cuando se sabe o se sospecha que los datos contienen outliers significativos.
- Cuando se quiere preservar la estructura de la mayor parte de los datos sin la influencia de los valores extremos.

# Comparación de Métodos de Escalado







**Observación:** El escalado robusto mantiene mejor la estructura central ante outliers

# Catálogo de Transformaciones según el Propósito



Una vez realizado el diagnóstico, debemos seleccionar la transformación más apropiada. La clave no está en *qué* transformación aplicar, sino en entender *por qué* esa transformación específica resuelve nuestro problema.

#### Exploraremos tres familias de transformaciones:

- Para linearizar relaciones no lineales.
- Para estabilizar la varianza (heterocedasticidad).
- Para normalizar residuos y controlar outliers.

# Transformación Logarítmica (Linearizar)



Es la transformación más versátil, ideal para linearizar relaciones de crecimiento exponencial o donde los efectos son multiplicativos.

#### Cuándo Usarla

- Relaciones exponenciales o multiplicativas.
- Procesos de crecimiento proporcional.
- Variables con rendimientos decrecientes (ingresos, precios).
- Casos Típicos: Economía, biología, finanzas.

### Diagnóstico y Aplicación

- Diagnóstico: Curva cóncava que se aplana o varianza que aumenta con Y.
- Aplicación: log(Y) ~ X, Y ~ log(X) o log(Y) ~ log(X).
- Interpretación: Los coeficientes se leen como cambios porcentuales o elasticidades.

### Transformación de Potencia (Linealizar)



Fundamental para relaciones curvilíneas que siguen una **ley de potencia** del tipo  $Y = a * X^b$ .

- Diagnóstico: La relación entre las variables se vuelve lineal al graficarla en una escala log-log.
   Aplicación: Se terren logaritmes en ambas variables para lineario
- Aplicación: Se toman logaritmos en ambas variables para linearizar el modelo: log(Y) = log(a) + b \* log(X).
- Interpretación: El exponente b representa la elasticidad o el exponente de escalamiento.
- **Ejemplos Clásicos:** Ley de Kleiber (relación masa-metabolismo), economía urbana (población-PIB).

### Transformación Raíz Cuadrada (Estabilizar Varianza)



Especialmente útil para **datos de conteo** (típicamente de una distribución de Poisson), donde la varianza es proporcional a la media.

### Cuándo Aplicarla

- Conteos de eventos: número de defectos, llamadas, ventas por período.
- Datos de frecuencia: visitas, clics, transacciones.
- Para conteos con muchos ceros puede requerir sqrt(Y + 0.5).

### Diagnóstico y Limitaciones

- Diagnóstico: Gráfico de residuos en forma de embudo donde la dispersión crece linealmente con la media.
- Limitaciones: La interpretación es menos directa y solo es apropiada para valores no negativos.

### Transformación Logarítmica (Estabilizar Varianza)



Es la solución natural cuando la **varianza es proporcional al cuadrado de la media**, lo que se conoce como heterocedasticidad multiplicativa.

### Cuándo Aplicarla:

- Variables monetarias (ingresos, precios, costos), donde el error relativo tiende a ser constante.
- Porcentajes de crecimiento o procesos donde los errores se acumulan multiplicativamente.

#### La Gran Ventaja (Efectos Múltiples):

 Con frecuencia, esta única transformación resuelve varios problemas a la vez: lineariza la relación, estabiliza la varianza, normaliza la distribución y reduce el impacto de *outliers*.

### Transformación Inversa (Controlar Outliers)



Útil para relaciones **hiperbólicas** (del tipo Y = 1/X) y para distribuciones con colas muy pesadas a la derecha.

#### Cuándo Usarla

- Relaciones que se aproximan a una asíntota horizontal.
- Tasas de decaimiento o relaciones dosis-respuesta en farmacología.
- Tiempo hasta un evento.

### Efecto y Precauciones

- Efecto en Outliers: Comprime fuertemente los valores grandes y expande los pequeños.
- Precaución: Amplifica errores en valores pequeños y requiere tratamiento especial para datos cercanos a cero.
- Solo aplicable a valores no nulos.

### Transformación de Box-Cox: La Teoría



Es un método que **optimiza automáticamente** el parámetro de transformación  $\lambda$  (lambda) para maximizar la normalidad y homocedasticidad de los residuos. En lugar de elegir manualmente, Box-Cox encuentra el valor  $\lambda$  que mejor normaliza los datos.

#### Definición Matemática:

$$Y(\lambda) = \begin{cases} \frac{Y^{\lambda} - 1}{\lambda}, & \lambda \neq 0\\ \log(Y), & \lambda = 0 \end{cases}$$

#### Casos Especiales de $\lambda$ :

- $\lambda = 1$ : Sin transformación (identidad).
- $\lambda = 0.5$ : Transformación de raíz cuadrada.
- $\lambda = 0$ : Transformación logarítmica.
- $\lambda = -1$ : Transformación inversa.



# Box-Cox: Propósito y Limitaciones



#### Propósito y Ventajas

- Encuentra la transformación óptima sin necesidad de prueba y error.
- Maximiza la verosimilitud del modelo, mejorando simultáneamente la normalidad y la homocedasticidad.
- Proporciona un método objetivo para seleccionar la transformación más apropiada.

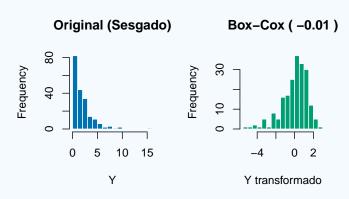
### **Limitaciones Importantes**

- Requiere que los datos (Y) sean estrictamente positivos.
   Esta es su principal restricción.
- La interpretación es compleja si λ no es un valor simple (0, 0.5, 1).
- El λ óptimo depende del modelo específico, por lo que puede cambiar si se modifican los predictores.

# Ejemplo Práctico: Aplicando Box-Cox



A continuación, se visualiza cómo la transformación Box-Cox corrige la asimetría de una distribución original.



#### La Extensión: Transformación de Yeo-Johnson



Fue desarrollada para superar la principal limitación de Box-Cox: acepta cualquier valor real (positivo, negativo o cero).

#### Cuándo Usar Box-Cox

- Cuando los datos son estrictamente positivos.
- Si se busca comparabilidad con literatura existente que la utilice.

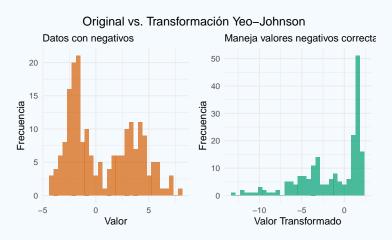
#### Cuándo Usar Yeo-Johnson

- Cuando los datos incluyen valores negativos o cero.
- Si se necesita mayor flexibilidad y no hay restricciones de dominio.

# Ejemplo Práctico: Yeo-Johnson con Datos Negativos



Este ejemplo muestra cómo Yeo-Johnson maneja un conjunto de datos que incluye valores negativos, algo que Box-Cox no podría hacer.



# Variables Categóricas: Principios de Codificación



La mayoría de los algoritmos estadísticos requieren entradas numéricas. El objetivo de la codificación es transformar las categorías de texto en números, **preservando su información semántica sin introducir supuestos erróneos**.

#### Criterios para Seleccionar el Método de Codificación:

- Naturaleza de la variable: ¿Existe un orden inherente entre las categorías? Esta es la pregunta más importante.
  - Nominal: Sin orden (ej. color, país).
  - Ordinal: Con orden (ej. nivel educativo, satisfacción).
- Número de categorías: Variables con muchas categorías ("alta cardinalidad") pueden requerir técnicas especiales.
- Interpretabilidad del modelo: ¿Qué método facilita una explicación clara de los resultados?

# One-Hot Encoding (Variables Nominales)



Transforma una variable con **k categorías sin orden** (ej. color, región) en **k-1 variables binarias** (0/1), también conocidas como *variables dummy*.

### La "Dummy Variable Trap":

- Problema: Usar k columnas (una para cada categoría) crea colinealidad perfecta en modelos lineales, ya que una columna es una combinación lineal de las otras.
- Solución: Siempre se omite una categoría, que se convierte en la categoría de referencia del modelo.

#### Ventajas

- No asume un orden entre categorías.
- Cada nueva variable tiene un coeficiente directamente interpretable (la diferencia con la categoría de referencia).

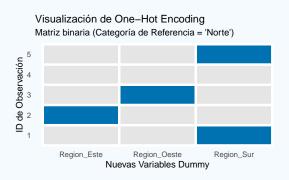
#### Desventajas

- Aumenta mucho la dimensionalidad si hay muchas categorías.
- Genera matrices de datos con muchos ceros (dispersas).

# Ejemplo Práctico: One-Hot Encoding



Imaginemos una variable Region con 4 categorías. Al codificarla, elegimos "Norte" como categoría de referencia.



En un modelo de regresión, el coeficiente de Region\_Sur se interpretaría como la diferencia promedio en la variable respuesta al estar en la región "Sur" en comparación con la región "Norte".

# Codificación Ordinal (Variables Ordinales)



Asigna números enteros consecutivos a las categorías, **respetando su orden o jerarquía natural**.

### Ejemplo Práctico:

- Variable: Nivel\_Satisfaccion con categorías ["Bajo", "Medio", "Alto"].
- Codificación: Se asignan los valores [1, 2, 3].

### Ventajas

- Preserva la información jerárquica de la variable.
- Es muy eficiente: crea una sola columna, sin importar el número de categorías.

#### Desventajas

- Supone que la "distancia" entre niveles es uniforme (asume que el cambio de "Bajo" a "Medio" es igual que de "Medio" a "Alto").
- Puede imponer un orden artificial si se aplica por error a una variable nominal.

# Comparación: Ordinal vs. One-Hot Encoding



La elección incorrecta del método puede llevar a modelos con menor rendimiento e interpretaciones erróneas.

#### Usar Codificación Ordinal

- Cuándo: Para variables con un orden natural y significativo
   (ej. nivel educativo, satisfacción del cliente, grado de severidad).
- Resultado: Una sola columna numérica (1, 2, 3, ...).
- Riesgo Principal: Asumir que los intervalos entre categorías son iguales.

### **Usar One-Hot Encoding**

- Cuándo: Para variables nominales, sin un orden inherente (ej. color, género, país).
- **Resultado:** k-1 columnas binarias (0 o 1).
- Riesgo Principal: Aumento excesivo del número de variables si la cardinalidad es alta.

# ¿Qué es una Interacción?



Mientras los efectos principales miden el impacto promedio de una variable, las **interacciones** revelan cómo el efecto de una variable **cambia según el nivel de otra**.

#### Modelo con Interacción:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1 \times X_2 + \varepsilon$$

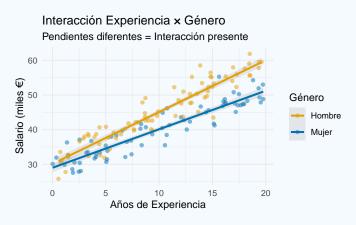
### Interpretación de $\beta_3$ :

- Si  $\beta_3 > 0$ : Los efectos se **potencian** (sinergia).
- Si  $\beta_3 < 0$ : Los efectos se **atenúan** (compensación).

# Ejemplo Visual: Interacción Experiencia × Género



Un ejemplo clásico es cómo la relación entre experiencia y salario no es la misma para todos los grupos. La interacción permite que la pendiente de la experiencia sea diferente para cada género, como se ve en el gráfico.



### Tipos de Interacciones: Continua $\times$ Continua



Este tipo de interacción ocurre cuando el efecto de una variable continua sobre el resultado depende del valor de otra variable continua.

- Concepto: El efecto de una variable se amplifica o atenúa a medida que otra variable cambia.
- Modelo:  $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1 \times X_2$ . El coeficiente  $\beta_3$  captura la interacción.

#### Sintaxis en R:

```
modelo <- lm(ventas ~ precio * publicidad, data = datos)
# Interpretación: El efecto del precio sobre las ventas varía
# según el nivel de inversión en publicidad.</pre>
```

### Tipos de Interacciones: Categórica × Categórica



Ocurre cuando el efecto de pertenecer a una categoría depende de la pertenencia a otra categoría.

- Concepto: Existe un efecto específico para una combinación de categorías que no se puede explicar sumando los efectos individuales.
- **Ejemplo:** El efecto del género en el salario puede ser diferente en cada departamento de una empresa.

#### Sintaxis en R:

```
modelo <- lm(salario ~ genero * departamento, data = datos)
# Interpretación: La brecha salarial de género es diferente
# en cada departamento.</pre>
```

# Tipos de Interacciones: Continua $\times$ Categórica (Mixta)

Este es uno de los tipos más comunes e intuitivos. Permite que la relación entre una variable continua y el resultado sea diferente para distintos grupos.

- Concepto: La pendiente de la variable continua es diferente para cada nivel de la variable categórica.
- **Ejemplo:** La relación entre los años de experiencia y el salario puede tener una pendiente más pronunciada para un grupo que para otro.

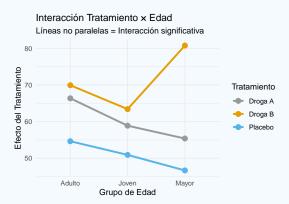
#### Sintaxis en R:

```
modelo <- lm(rendimiento ~ horas_estudio * metodo, data = dato
# Interpretación: La efectividad de las horas de estudio
# (la pendiente)
# sobre el rendimiento varía según el método de estudio
# utilizado.</pre>
```

# Caso Práctico: Visualizando una Interacción Categórica



Los interaction plots son la mejor herramienta para entender interacciones entre variables categóricas. Las líneas no paralelas son una señal visual clara de una posible interacción.



La Droga B es especialmente efectiva en el grupo de "Mayor", un efecto que no se podría ver analizando las variables por separado.

### Detección y Estrategia de Modelado



No debemos buscar interacciones al azar. El enfoque correcto combina la teoría con la evidencia de los datos.

#### ¿Cómo Detectarlas?

- Justificación Teórica: El conocimiento del dominio es la guía principal para saber dónde buscar.
- Exploración Visual: Usar gráficos de dispersión por grupos o interaction plots.
- Tests Estadísticos: Utilizar el Test F para comparar formalmente un modelo con y sin la interacción.

### El Principio de Jerarquía

- Regla de Oro: Si incluyes una interacción A × B, siempre debes incluir los efectos principales A y B por separado.
- Justificación: Preserva la interpretabilidad del modelo y evita sesgos en los coeficientes.

### Riesgos y Consideraciones Prácticas



Las interacciones son poderosas, pero su uso requiere cuidado para no complicar el modelo innecesariamente.

#### Riesgo de Complejidad:

- El número de interacciones posibles crece exponencialmente.
- **Recomendación:** Limitar el modelo a las 2 o 3 interacciones más importantes y con justificación teórica.

#### Riesgo de Multicolinealidad:

- Las interacciones pueden hacer que los coeficientes sean inestables.
- Mitigación: Centrar las variables continuas antes de crear el término de interacción.

#### Interpretación con Transformaciones:

 Advertencia: Una interacción en una escala log no significa lo mismo que en una escala lineal y requiere una interpretación mucho más cuidadosa.

### Ingeniería Avanzada



Consiste en crear nuevas variables mediante **combinaciones, ratios y transformaciones compuestas**. El objetivo es capturar relaciones complejas que no son evidentes en las variables originales.

A menudo, las variables individuales contienen información parcial. Al combinarlas de forma inteligente, podemos revelar **patrones predictivos mucho más potentes**.

#### Técnicas Clave que Exploraremos:

- Combinaciones: Creación de nuevas variables a partir de sumas o productos de las existentes.
- Ratios y Proporciones: Normalización de variables para revelar relaciones estructurales.
- Manejo de Colinealidad: Estrategias para condensar información de predictores correlacionados.

### Creación de Features por Combinación



#### **Combinaciones Lineales**

- Concepto: Sumas ponderadas de variables que miden aspectos de un mismo fenómeno.
- Ejemplo (Índice Compuesto):
  Un índice de riesgo
  cardiovascular. Índice\_Riesgo
  = 0.4\*Presión +
  0.3\*Colesterol + 0.3\*IMC
- Aplicación: Crear un score único a partir de múltiples indicadores para capturar un constructo multidimensional.

#### **Combinaciones No Lineales**

- Concepto: Productos, cocientes o funciones complejas que capturan sinergias o efectos multiplicativos.
- Ejemplo (Producto de Eficiencia): Rendimiento = Capacidad × Utilización × Calidad
- Aplicación: Modelar efectos donde el resultado depende de la combinación simultánea de varios factores.

#### El Poder de los Ratios



Los ratios son muy potentes porque **normalizan automáticamente las diferencias de escala** y revelan relaciones estructurales que las variables absolutas ocultan.

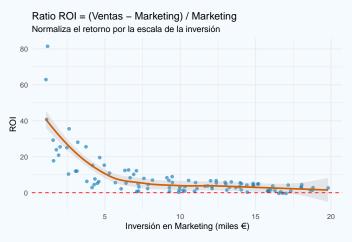
### Ventajas Principales:

- Normalización Automática: Permiten comparar entidades de diferentes tamaños (ej. una startup vs. una multinacional).
- Interpretación Intuitiva: Tienen significados claros y directos (ej. Deuda / Patrimonio).
- Robustez: Suelen ser menos sensibles a valores atípicos (outliers).

# Ejemplo Práctico: Retorno de Inversión (ROI)



Un ratio clásico en negocio es el ROI, que mide la eficiencia de una inversión normalizando el beneficio obtenido por el coste de la misma.



# Manejo de Colinealidad con Features



**El Problema:** Simplemente eliminar variables correlacionadas es una mala práctica, ya que **se pierde información predictiva valiosa**.

La Solución: Condensar la información redundante en nuevas variables, preservando la información única de cada predictor original.

# **Estrategias Principales**

- Componentes Principales (PCA): Extrae la máxima varianza común en componentes ortogonales. Su principal desventaja es que pierde interpretabilidad directa.
- Ratios Informativos: Capturan la relación estructural entre dos variables (ej. Deuda / Patrimonio). Preservan la interpretabilidad económica.
- Índices Ponderados: Crean un *score* único a partir de varias variables, usando pesos teóricos o empíricos.

# El Trade-Off: Complejidad vs. Interpretabilidad



A medida que aumenta la complejidad de la técnica, generalmente se gana poder predictivo pero se pierde facilidad de interpretación.

# Técnicas Más Simples

- Estandarización: La pérdida de interpretación es mínima (solo cambia la escala).
- Transformación Logarítmica:
   La pérdida es baja, ya que se
   puede interpretar como cambios
   porcentuales.

### Técnicas Más Potentes

- Box-Cox (con λ complejo): La escala transformada no es intuitiva, dificultando la interpretación.
- PCA (Componentes
   Principales): La pérdida es muy
   alta, ya que los componentes
   son constructos abstractos.
- Interacciones Múltiples: La interpretación se complica al haber efectos condicionales.
- Si buscas EXPLICAR → Prioriza la Interpretabilidad.
- Si buscas PREDECIR → Prioriza el Rendimiento.

### Errores Comunes a Evitar



- Transformar sin Diagnóstico Previo
  - Aplicar log() "por si acaso" en lugar de identificar un problema específico que lo justifique.
- Ignorar el Dominio del Problema
  - Usar transformaciones que no tienen sentido teórico (ej. log(edad)).
- Caer en la "Dummy Variable Trap"
  - Incluir k columnas para k categorías en lugar de k-1 (categoría de referencia).
- Usar Interacciones sin Efectos Principales
  - Modelar Y ~ A:B en lugar de la forma correcta y jerárquica Y ~ A + B + A:B.
- Sobreingeniería (Over-engineering)
  - Crear cientos de *features* automáticamente sin una justificación clara y validada para cada uno.

# Flujo de Trabajo Recomendado



Un proceso sistemático garantiza resultados robustos y reproducibles.

- Análisis Exploratorio
  - Visualizar distribuciones, patrones y outliers.
- O Diagnóstico de Problemas
  - Buscar no linealidad, heterocedasticidad, asimetría, etc., en los datos.
- Selección de Transformaciones
  - Elegir la técnica adecuada para el problema diagnosticado.
- Aplicación y Validación
  - Transformar las variables y verificar si el problema original se ha resuelto.
- Comparación de Modelos
  - Usar métricas (R², RMSE, AIC) y validación cruzada para evaluar la mejora.
- Interpretación Final
  - Traducir los resultados del modelo final al contexto del negocio o la investigación.

# Mejores Prácticas en Feature Engineering



### O Documentación Rigurosa

 Registrar cada transformación y su justificación para mantener la trazabilidad.

#### Validación en Datos Nuevos

 Guardar los parámetros de transformación del set de entrenamiento (ej. media, sd, lambda) y aplicarlos al de test.

### Evitar Data Leakage

 Calcular todos los parámetros de las transformaciones únicamente con los datos de entrenamiento.

### Considerar el Contexto

 Asegurarse de que las nuevas variables creadas son interpretables para los stakeholders.

#### Parsimonia

 Preferir siempre el modelo más simple que funcione adecuadamente. No añadir complejidad por mejoras marginales.

# Resumen y Conceptos Clave



### ¿Por Qué es Fundamental?

- Resuelve problemas específicos de los datos (no linealidad, etc.).
- Mejora el rendimiento del modelo significativamente.
- Revela relaciones ocultas mediante interacciones y combinaciones.
- Adapta los datos a los requisitos de los algoritmos.

### **Principios Clave**

- Diagnóstico antes que transformación.
- Justificación teórica o empírica.
- Validación rigurosa.
- Balance entre complejidad e interpretabilidad.
- **Documentación** exhaustiva.

**Próximo tema:** Métodos de regularización para manejar la complejidad agregada.

# Selección de Variables, Regularización y Validación

Víctor Aceña - Isaac Martín

DSLAB

2025-09-02





# El Problema de la Selección de Variables



En modelos de regresión con gran número de variables predictoras enfrentamos el desafío crítico de identificar qué variables son realmente relevantes

### Los problemas principales:

- Inclusión de demasiadas variables → sobreajuste, pérdida de interpretabilidad, complejidad innecesaria
- Exclusión de variables importantes → modelos subóptimos
- Con p variables explicativas:  $2^p$  modelos diferentes posibles
- Exploración exhaustiva computacionalmente inviable cuando p es grande

**El objetivo del tema:** Seleccionar el subconjunto óptimo de variables predictoras y validar la calidad del modelo resultante

# Enfoques Principales del Tema



### Seis enfoques sistemáticos:

- Filtrado basado en información básica
  - Eliminación preliminar de variables irrelevantes
  - Criterios: variabilidad, correlación, VIF
- Criterios de bondad de ajuste
  - Métricas para comparar modelos: AIC, BIC, Cp de Mallows
- Métodos de selección exhaustiva
  - Evaluación sistemática: Best Subset Selection
- Métodos automáticos paso a paso
  - Selección iterativa: forward, backward, stepwise
- Métodos basados en regularización
  - Penalización de complejidad: Ridge, Lasso, Elastic Net
- Validación del modelo
  - División train/test y validación cruzada



# Proceso Completo de Construcción del Modelo



# Etapas del proceso sistemático:

- Definición del problema y variables de interés
- Recogida de datos (fiabilidad, validez, ética, control de sesgos)
- Análisis Exploratorio de Datos (EDA)
- Ajuste del modelo inicial
- Evaluación del modelo (R², ANOVA, significancia)
- Diagnóstico del modelo (residuos, observaciones atípicas)
- lacktriangle Validación del modelo  $\leftarrow$  Enfoque principal del tema

Este tema se centra en las etapas 7 y 8

# Tipos de Experimentos para Recogida de Datos



### Clasificación según el diseño:

- Experimentos controlados: Manipulación deliberada de variables independientes
- Estudios observacionales exploratorios: Sin intervención, registro natural
  - Transversales (un momento temporal)
  - Longitudinales (seguimiento temporal)
- Estudios observacionales confirmatorios: Testear hipótesis específicas
- Encuestas y cuestionarios: Datos estructurados sobre actitudes/comportamientos
- Experimentos naturales: Fenómenos naturales como intervención
- Estudios de simulación: Modelos matemáticos/computacionales
- Datos secundarios: Bases de datos existentes

# Filtrado Basado en Información Básica



Objetivo: Filtrado preliminar antes de métodos sofisticados

#### Criterios de eliminación básicos:

Variabilidad de las variables predictoras

$$Var(X_j) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \bar{x}_j)^2 < \epsilon$$

(típicamente  $\epsilon = 0.01$ )

2 Correlación con la variable respuesta

$$r_{X_j,Y} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

Umbral mínimo:  $|r_{X_i,Y}| > \delta$  (ej:  $\delta = 0.1$ )



# Filtrado por Multicolinealidad



### Detectar y eliminar variables redundantes:

- $\begin{tabular}{ll} \hline \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} \hline \end{tabular} = \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} \\ \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} \hline \end{tabular} = \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} \\ \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} = \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} = \begin{tabular}{ll} \hline \end{tabular} \\ \begin{tabular}{ll} \hline \en$
- Factor de Inflación de la Varianza (VIF)

$$VIF_j = \frac{1}{1 - R_j^2}$$

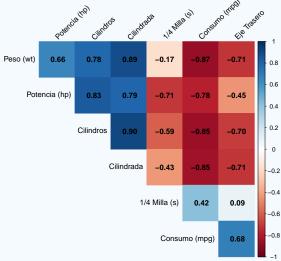
Valores  $VIF_j > 10$  indican multicolinealidad problemática

**Estrategia:** Eliminar variables con mayor VIF iterativamente hasta que todos los VIF sean aceptables

# Visualización: Matriz de Correlación

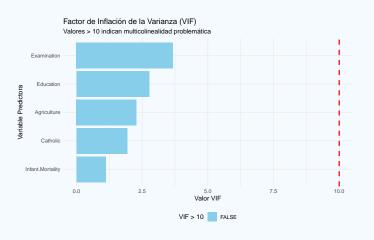






# Visualización: Diagnóstico de Multicolinealidad





# Criterios de Bondad de Ajuste



**Problema:** Equilibrar capacidad explicativa vs complejidad del modelo

**Subajuste vs Sobreajuste:** - Muy pocas variables  $\rightarrow$  subajuste (underfitting) - Demasiadas variables  $\rightarrow$  sobreajuste (overfitting)

# Tres criterios principales:

- Criterio de Información de Akaike (AIC)
- Oriterio de Información Bayesiano (BIC)
- Estadístico Cp de Mallows

**Estrategia:** Seleccionar el modelo que minimice el criterio elegido

# Criterio de Información de Akaike (AIC)



Fundamento: Teoría de la información de Hirotugu Akaike

Objetivo: Estimar la pérdida de información del modelo

Fórmula:

$$AIC = n \ln \left( \frac{SSE}{n} \right) + 2(p+1)$$

### **Componentes:**

- $\bullet$   $n \ln(SSE/n)$ : Bondad de ajuste (relacionado con log-verosimilitud)
- 2(p+1): Penalización por complejidad (aumenta 2 unidades por parámetro)

# Interpretación:

- Menor AIC = mejor modelo
- Asintóticamente eficiente
- Orientado a predicción



# Criterio de Información Bayesiano (BIC)



**Fundamento:** Estadística bayesiana (Gideon Schwarz)

Objetivo: Encontrar el modelo más probable de ser el "verdadero"

Fórmula:

$$BIC = n \ln \left( \frac{SSE}{n} \right) + (p+1) \ln(n)$$

#### Diferencia clave con AIC:

- Penalización:  $(p+1)\ln(n)$  en lugar de 2(p+1)
- Más restrictivo cuando n > 7 (ya que  $\ln(n) > 2$ )

#### Características:

- Consistencia: Si el modelo verdadero está entre candidatos,  $\mathsf{P}(\mathsf{selección}) o 1$
- Orientado a explicación
- Favorece modelos más simples (parsimonia)



# Estadístico Cp de Mallows



Fundamento: Error cuadrático medio de predicción

Objetivo: Modelo con bajo sesgo y baja varianza

Fórmula:

$$C_p = \frac{SSE_p}{MSE_{full}} - n + 2(p+1)$$

donde  $MSE_{full}$  es el error cuadrático medio del modelo completo

### Interpretación:

- Modelo bien especificado:  $C_p \approx p+1$
- $C_p > p+1$ : modelo sesgado (variable importante omitida)
- $C_p \leq p+1$ : buen ajuste

**Estrategia:** Buscar modelos donde  $C_p \approx p+1$ , elegir el menor entre ellos

# ¿Cuándo Usar Cada Criterio?



### Si el objetivo principal es la predicción:

- AIC es la opción preferida
- Diseñado para minimizar error de predicción
- Penalización más moderada
- Ideal en contextos de pronóstico

# Si el objetivo es la explicación/inferencia:

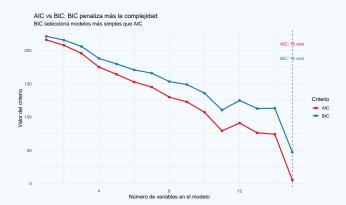
- BIC es la elección más sólida.
- Identifica el modelo más parsimonioso
- Penalización más fuerte contra sobreajuste
- Propiedad de consistencia en muestras grandes

# Para análisis exploratorio:

- Cp de Mallows es especialmente valioso
- Compromiso explícito entre sesgo y varianza
- Visualización clara del "codo" de complejidad óptima

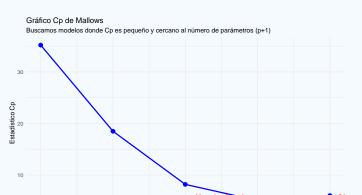
# Visualización: Criterios de Información (AIC vs BIC)





# Visualización: Selección con Cp de Mallows





Número de Parámetros (p+1)

# Métodos de Selección Exhaustiva



### Best Subset Selection: Evalúa todos los subconjuntos posibles

#### Proceso:

- Para k = 1, 2, ..., p variables
- Construir todos los modelos posibles con k variables
- Seleccionar el mejor modelo de cada tamaño según criterio elegido

### Ventajas:

- Garantiza encontrar el modelo óptimo según el criterio
- Evaluación completa de todas las combinaciones
- Estándar para comparar otros métodos

#### Limitaciones:

- Complejidad computacional:  $2^p$  modelos posibles
- Impracticable para p > 15-20
- Puede seleccionar modelos sobreajustados sin validación cruzada

# Métodos Automáticos Paso a Paso



**Principio:** Construir modelo iterativamente, añadiendo o quitando predictores uno a uno

#### **Forward Selection:**

- Comenzar con modelo nulo (solo intercepto)
- Añadir variable que más mejora el criterio
- Repetir hasta que ninguna variable mejore significativamente
- Problema: No puede eliminar variables una vez incluidas

#### **Backward Elimination:**

- Comenzar con modelo completo (todas las variables)
- Eliminar variable menos significativa
- Repetir hasta que todas las variables sean significativas
- **Output** Problema: Requiere n > p



# Métodos Automáticos Paso a Paso



### Stepwise Regression:

- Combina forward + backward
- Puede añadir y eliminar variables
- Problema: Solo encuentra óptimo local

### Limitaciones importantes de métodos automáticos:

- Inestabilidad: Pequeños cambios en datos pueden alterar el modelo
- Invalidez de p-valores: Múltiples comparaciones sesgan la inferencia
- Óptimo local: No garantizan la mejor combinación
- Inflación del error tipo I: Sin corrección para comparaciones múltiples

**Uso recomendado:** Como herramientas exploratorias, no para inferencia final

# Métodos Basados en Regularización



Principio: Introducir penalización en la función de ajuste del modelo

# **Objetivos:**

- Controlar el sobreajuste reduciendo complejidad
- Forzar selección de subconjunto más parsimonioso
- Mejorar estabilidad y precisión del modelo

# Tres métodos principales:

- Ridge Regression: Penalización  $L_2 = \lambda \sum \beta_j^2$
- Lasso: Penalización  $L_1 = \lambda \sum |\beta_j|$
- Elastic Net: Combina  $L_1 + L_2$

Ventaja clave: Control automático del balance sesgo-varianza

# Ridge Regression



**Fundamento:** Penalización  $L_2$  en la estimación de coeficientes

Formulación:

$$SSE_{ridge} = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\,\boldsymbol{\beta}\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2$$

Estimación:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathsf{ridge}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \, \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

# Interpretación del parámetro $\lambda$ :

- $\lambda = 0$ : equivalente a regresión lineal tradicional (OLS)
- $\lambda$  aumenta: coeficientes se reducen en magnitud
- $\bullet$   $\lambda$  muy grande: coeficientes se acercan a cero

# **Propiedades:**

- Manejo de multicolinealidad
- Menor varianza en predicciones
- No realiza selección de variables (no anula coeficientes)

# Regresión Lasso



**Fundamento:** Penalización  $L_1$  que permite eliminación de variables

Formulación:

$$SSE_{\mathsf{lasso}} = \|\mathbf{y} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$

### Diferencia clave con Ridge:

- Ridge reduce magnitud de coeficientes
- Lasso puede eliminar variables por completo (coeficientes = 0)

# Interpretación del parámetro $\lambda$ :

- $\lambda = 0$ : regresión lineal tradicional
- $\lambda$  aumenta: más coeficientes  $\rightarrow$ 0
- $\bullet$   $\lambda$  muy grande: elimina demasiadas variables

# **Propiedades:**

- Selección automática de variables
- Manejo de multicolinealidad
- Simplicidad e interpretabilidad
- Reduce sobreajuste

# Elastic Net: Combinando lo Mejor de Ridge y Lasso



**Fundamento:** Combinación de penalizaciones Ridge  $(L_2)$  y Lasso  $(L_1)$ 

#### Formulación:

$$SSE_{\mathsf{Elastic Net}} = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\,\boldsymbol{\beta}\|^2 + \lambda \left[ \alpha \sum_{j=1}^p |\beta_j| + (1 - \alpha) \sum_{j=1}^p \beta_j^2 \right]$$

#### Parámetro $\alpha$ controla la mezcla:

- $\alpha = 1 \rightarrow \mathsf{Comportamiento}$  como Lasso
- $\alpha = 0 \rightarrow \mathsf{Comportamiento}$  como Ridge
- $0 < \alpha < 1 \rightarrow$  Combinación de ambos métodos

### Ventajas principales:

- Manejo superior de multicolinealidad
- Selección de variables más estable
- Evita selección arbitraria cuando hay grupos correlacionados



# Cuándo Usar Cada Método de Regularización



# Ridge Regression:

- Todas las variables aportan información
- Fuerte multicolinealidad presente
- Objetivo: reducir varianza sin eliminar variables

#### Lasso:

- Muchas variables irrelevantes esperadas
- Selección sparse deseable
- Interpretabilidad prioritaria

#### **Elastic Net:**

- Variables correlacionadas en grupos
- Balance entre selección y estabilidad
- Rendimiento predictivo como objetivo principal

**Estrategia práctica:** Optimizar  $\alpha$  mediante validación cruzada junto con  $\lambda$ 

# Selección del Parámetro de Regularización



El problema: ¿Cómo elegir el valor óptimo de lambda?

La solución: Validación cruzada

### Proceso:

- Definir secuencia de valores lambda candidatos
- Para cada lambda, calcular error de validación cruzada
- Seleccionar lambda que minimiza el error

#### Dos criterios principales:

- lambda\_min: Valor que minimiza el error de CV
- lambda\_1SE: Valor más grande cuyo error está dentro de 1 error estándar del mínimo

**Regla 1-SE:** Preferir modelo más simple (mayor lambda) si su error es comparable al mínimo

# Estrategias de Validación: Visión General



# Partición inicial (paso obligatorio):

Antes de cualquier análisis, dividir datos originales en:

- Datos de modelado (80%): Para todo el proceso de construcción
- Conjunto de prueba final (20%): Guardado para evaluación final

Dentro de los datos de modelado, tres estrategias principales:

- División Train/Test simple
- Validación cruzada k-fold
- Leave-One-Out Cross-Validation (LOOCV)

Cada estrategia tiene sus ventajas e inconvenientes según el contexto del problema

# División Train/Test Simple



Concepto: División única de los datos de modelado

#### Proceso:

- Conjunto de entrenamiento (70-80%): Ajustar el modelo
- Conjunto de test (20-30%): Evaluar rendimiento

### Ventajas:

- Computacionalmente muy eficiente
- Fácil de implementar y entender
- Apropiado para datasets grandes

### Desventajas:

- Alta variabilidad: Resultados dependen de la división específica
- Puede ser optimista o pesimista según qué observaciones caigan en test
- Menos datos disponibles para entrenamiento

**Cuándo usar:** Datasets grandes (n > 1000), recursos limitados, evaluación rápida

# Validación Cruzada k-fold



Concepto: Múltiples evaluaciones para obtener estimación más estable

#### Proceso de k-fold CV:

- $lue{}$  Dividir datos en k particiones de tamaño similar
- ② Para cada partición i = 1, 2, ..., k:
  - ullet Usar partición i como conjunto de test
  - Usar las k-1 particiones restantes como entrenamiento
  - Calcular métrica de error
- **3** Error de CV:  $CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} Error_i$

Valores típicos: k = 5 o k = 10

# Ventajas:

- Estimación más estable y menos sesgada
- Todos los datos se usan para entrenamiento y test
- Reduce variabilidad de la estimación

#Esquema del Proceso de Validación Cruzada (k=5)



# Leave-One-Out Cross-Validation (LOOCV)



**Concepto:** Caso extremo donde k = n (número de observaciones)

#### Proceso:

- Para cada observación i:
  - Entrenar modelo con n-1 observaciones
  - Predecir la observación i excluida
  - Calcular error de predicción
- Error LOOCV:  $CV_{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\frac{y_i \hat{y}_i}{1 h})^2$

# Ventajas:

- Estimación prácticamente insesgada
- Determinística (no depende de divisiones aleatorias)
- Máximo uso de datos para entrenamiento

### **Desventajas:**

- Computacionalmente costoso
- Alta varianza en la estimación



# Cuándo Usar Cada Estrategia de Validación



### Train/Test Split:

- Dataset grande (n > 1000)
- Recursos computacionales limitados
- Necesidad de evaluación rápida
- Primera aproximación al problema

#### Validación Cruzada k-fold:

- Dataset de tamaño moderado (100 < n < 1000)
- Balance entre eficiencia y precisión
- Estimación robusta del rendimiento
- Más recomendado en general

# LOOCV:

- Dataset pequeño (n < 100)
- Necesidad de estimación menos sesgada
- Recursos computacionales abundantes

# Métricas de Rendimiento en Validación



Una vez obtenidas las predicciones, necesitamos "calificar" el modelo Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE):

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

#### Características del RMSE:

- Penaliza desproporcionadamente errores grandes
- Sensible a valores atípicos
- Mismas unidades que la variable respuesta
- Interpretación: "desviación típica de los residuos"

# Métricas de Rendimiento en Validación



#### **Error Absoluto Medio:**

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |y_i - \hat{y}_i|$$

#### Características del MAE:

- Trata todos los errores proporcionalmente
- Más robusto frente a valores atípicos
- Interpretación directa: "error promedio en valor absoluto"

# ¿Cuándo usar cada métrica?

- RMSE: Cuando errores grandes son especialmente problemáticos
- MAE: Cuando se prefiere robustez frente a valores atípicos
- Ambas: Para análisis completo del rendimiento predictivo

# Interpretación de Errores: Diagnóstico del Ajuste



# La comparación clave: Error en entrenamiento vs Error en validación Sobreajuste (Overfitting):

- Síntoma: Error entrenamiento bajo + Error validación mucho más alto
- Causa: Modelo memoriza ruido específico de los datos de entrenamiento
- Solución: Simplificar modelo, usar regularización, más datos

# Subajuste (Underfitting):

- Síntoma: Error entrenamiento alto + Error validación alto y similar
- Causa: Modelo demasiado simple, no captura estructura subyacente
- **Solución:** Aumentar complejidad, añadir variables, términos de interacción

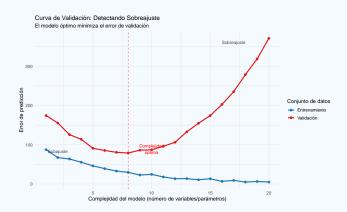
#### Modelo bien calibrado:

- **Síntoma:** Error entrenamiento y validación similares y bajos
- Interpretación: Buen equilibrio entre sesgo y varianza



# Error de Entrenamiento vs Validación





# El Conjunto de Prueba Final: La Evaluación Definitiva



### Después de todo el proceso de modelado:

- Filtrado de variables
- Selección del mejor método
- Optimización de hiperparámetros
- Validación cruzada para elegir modelo final

El paso final: Evaluar el modelo seleccionado en el conjunto de prueba final

### ¿Por qué es necesario?

- La validación cruzada se usó para tomar decisiones sobre el modelo
- Existe riesgo de sobreajuste al proceso de validación mismo
- Necesitamos una evaluación completamente independiente

### Interpretación:

- Error similar a validación cruzada → modelo robusto
- ullet Error mucho mayor o posible sobreajuste al proceso de modelado

# Advertencias Importantes



# Los métodos stepwise (forward, backward, stepwise) requieren precaución especial

#### **Problemas fundamentales:**

- **Invalidez de p-valores:** Los p-valores y errores estándar están sesgados
- Inestabilidad: Pequeños cambios en datos pueden cambiar radicalmente el modelo
- Optimo local: No garantizan encontrar la mejor combinación de variables
- Inflación del error tipo I: Múltiples comparaciones sin corrección

#### Uso recomendado:

- Como herramientas exploratorias únicamente
- Generar modelos candidatos para evaluación posterior
- Siempre validar con técnicas robustas
- No reportar p-valores del modelo final como definitivos

# Proceso Completo de Selección y Validación



### Flujo de trabajo recomendado:

- Partición inicial: Separar conjunto de prueba final (20%)
- En datos de modelado (80%):
  - Filtrado básico de variables
  - Aplicar métodos de selección (exhaustivos, stepwise, regularización)
  - Comparar modelos con validación cruzada
  - Seleccionar modelo final
- Sevaluación final: Probar modelo seleccionado en conjunto de prueba
- Reportar: Error de validación cruzada Y error en conjunto de prueba

#### Criterios de decisión:

- ullet Número de variables vs tamaño de muestra o método de selección
- Objetivo (predicción vs explicación) → criterio de información
- ullet Multicolinealidad o regularización vs selección clásica



# Consideraciones Prácticas



#### Antes del modelado:

- EDA completo para entender los datos
- Conocimiento del dominio para variables importantes
- Objetivo claro: ¿predicción o explicación?
- Relación entre tamaño muestral y número de variables

#### Durante la selección:

- Usar validación cruzada para todos los hiperparámetros
- Comparar múltiples métodos de selección
- No guiarse solo por métricas: considerar interpretabilidad
- Documentar todas las decisiones tomadas.

# Después de la selección:

- Diagnóstico completo de residuos del modelo final
- Análisis de sensibilidad a observaciones influyentes
- Intervalos de confianza para coeficientes importantes

### Conclusiones



#### Lo aprendido en este tema:

- Filtrado inicial: Elimina problemas básicos de forma eficiente
- Criterios de información: Guían comparación objetiva de modelos
- Métodos exhaustivos: Garantizan óptimo pero son computacionalmente costosos
- Regularización: Controla sobreajuste y realiza selección automáticamente
- Validación: Indispensable para evaluar capacidad de generalización

# Recomendaciones principales:

- Combinar métodos: Ningún método es perfecto en todas las situaciones
- Validar siempre: Con datos que el modelo no ha visto
- Preferir simplicidad: Cuando el rendimiento es comparable
- Incorporar conocimiento del dominio: Los datos no lo dicen todo

El mejor modelo es aquel que resuelve el problema con la mayor simplicidad.