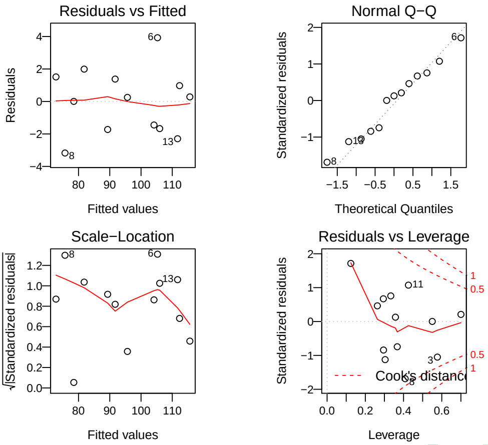
7 Validación del Modelo



Contenido

Ejemplo: Producción de ácido[1]

i	x_1	x_2	x_3	y	$y - \hat{y}$
1	80	27	89	42	3.235
2	80	27	88	37	−1.917
3	75	25	90	37	4.556
4	62	24	87	28	5.698
5	62	22	87	18	−1.712
6	62	23	87	18	−3.007
7	62	24	93	19	−2.389
8	62	24	93	20	−1.389
9	58	23	87	15	−3.144
10	58	18	80	14	1.267
11	58	18	89	14	2.636
12	58	17	88	13	2.779
13	58	18	82	11	−1.429
14	58	19	93	12	−0.050
15	50	18	89	8	2.361
16	50	18	86	7	0.905
17	50	19	72	8	−1.520
18	50	19	79	8	−0.455
19	50	20	80	9	−0.598
20	56	20	82	15	1.412
21	70	20	91	15	−7.238

El ejemplo son datos de 21 días de operación de una planta de oxidación de amonio en la producción de ácido nítrico.

variable	concepto
i	día
x_1	flujo de aire
x_2	temperatura del agua
x_3	concentración del ácido
y	amonio no convertido

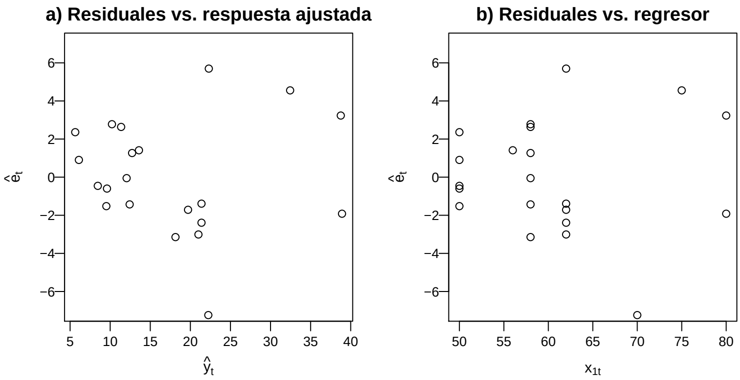
Ajuste:

```
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -39.9197    11.8960  -3.356  0.00375
x1            0.7156     0.1349   5.307  5.8e-05
x2            1.2953     0.3680   3.520  0.00263
x3           -0.1521     0.1563  -0.973  0.34405

Residual standard error: 3.243 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9136,     Adjusted R-squared: 0.8983
F-statistic:  59.9 on 3 and 17 DF,  p-value: 3.016e-09
```

[1] A. C. Atkinson (1985)

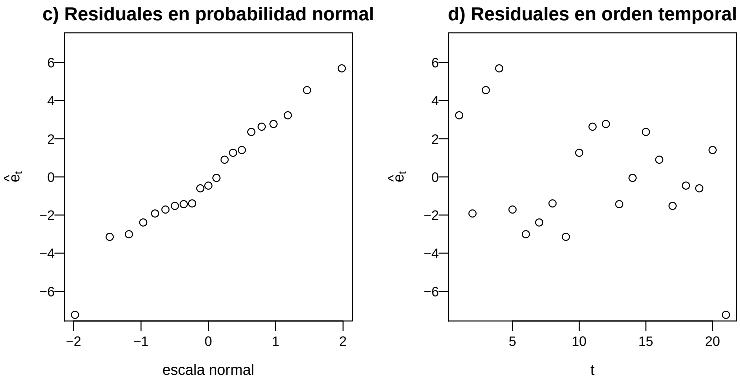
Ejemplo: Producción de ácido (cont.)

Análisis de residuales



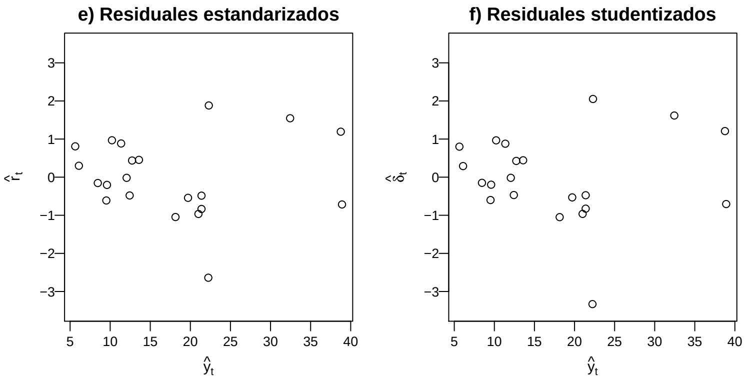
Ejemplo: Producción de ácido (cont.)

Análisis de residuales



Ejemplo: Producción de ácido (cont.)

Análisis de residuales

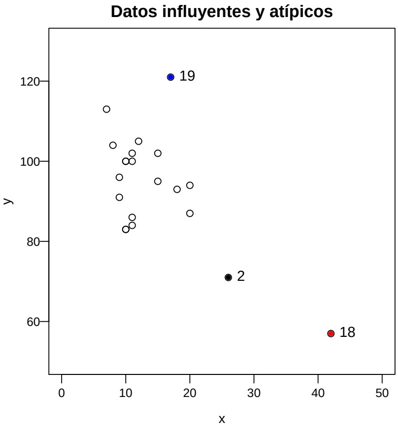


−ebz

Ejemplo: Score de aptitud de Gesell[2]

n: Observación
x: Edad primera palabra (meses)
y: Score de aptitud de Gesell

n	*x*	*y*	*n*	*x*	*y*
1	15	95	11	7	113
2	26	71	12	9	96
3	10	83	13	10	83
4	9	91	14	11	84
5	15	102	15	11	102
6	20	87	16	10	100
7	18	93	17	12	105
8	11	100	18	42	57
9	8	104	19	17	121
10	20	94	20	11	86
			21	10	100



[2] Draper y Smith (1998) p 210.

Considere el modelo

$$y_i = x_i'\beta = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i; \qquad i = 1, \ldots, n$$

Si el ajuste de *mínimos cuadrados* se denota por $\hat{y}_i = x_i'\hat{\beta}$, el correspondiente *residual* está dado por $\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - x_i'\hat{\beta}$. Se tiene entonces que

$$\mathbb{E}[\hat{e}_i] = 0; \qquad \text{var}(\hat{e}_i) = \sigma^2(1 - h_{ii}); \qquad i = 1, \ldots, n$$

donde $(h_{ij}) = X(X'X)^{-1}X' = H$ se le conoce como la *matriz "gorro"*.

- h_{ii} se conoce como el *apalancamiento* de la i-ésima observación.

Criterio

Valores con *apalancamiento* "grandes" ($|h_{ii}| > 2p/n$) indica una observación potencialmente influyente.

Asimismo, observaciones con *apalancamiento* "grandes" indican dato atípico, pero no viceversa. (Pues éstos tendrán un valor alejado en el espacio de las x y los datos atípicos tienen un valor alejado en las x, y o en ambas).

−ebz

La matriz H

Propiedades:

- H es simétrica ($H' = H$) e idempotente ($H^2 = H$).
- rango$(H) = q$.
- $\hat{e} = (y - \hat{y}) = (I - H)y = My$.
- $M = I - H$ es simétrica e idempotente.
- $\text{cov}(\hat{e}) = \sigma^2 M = \sigma^2 (I - H)$.
- $\text{corr}(\hat{e}_i, \hat{e}_j) = \frac{-h_{ij}}{\sqrt{(1-h_{ii})(1-h_{jj})}}, \quad i \neq j.$

  Esto es, la correlación de los residuales depende exclusivamente de los regresores.

Definición de residuales

⋆ Se definen los *residuales estandarizados* a los residuales divididos por la estimación de la desviación estándar del error: $\hat{r}_i = \hat{e}_i/s$. Luego,

$$\mathbb{E}[\hat{r}_i] = 0, \quad \text{var}(\hat{r}_i) = \frac{1}{s^2}\text{var}(\hat{e}_i) = \frac{1}{s^2}\,\sigma^2(1 - h_{ii}) \approx 1$$

Criterio

Residuales estandarizados *"grandes"* ($|\hat{r}_i| > 3$) indica un potencial valor atípico.

⋆ Se define el i-ésimo *residual studentizado (internamente)* como el residual dividido por la estimación de la desviación estándar del mismo. A saber,

$$\hat{\delta}_i = \frac{\hat{e}_i}{\sqrt{\widehat{\text{var}(\hat{e}_i)}}} = \frac{\hat{e}_i}{s\sqrt{1 - h_{ii}}}$$

Entonces,

$$\mathbb{E}[\hat{\delta}_i] = 0, \quad \widehat{\text{var}(\hat{\delta}_i)} = \frac{1}{(s\sqrt{1 - h_{ii}})^2}\widehat{\text{var}(\hat{e}_i)} = \frac{1}{s^2(1 - h_{ii})}\,s^2(1 - h_{ii}) = 1$$

−ebz

Definición de residuales

⋆ Denotamos por $s^2_{(i)}$, la estimación de la varianza σ^2 (constante) de los errores *sin* considerar la i-ésima observación. Se puede mostrar que

$$s^2_{(i)} = \frac{(n-q)s^2 - \hat{e}_i^2/(1-h_{ii})}{n-1-q}$$

es una estimación insesgada de σ^2, sin considerar la i-ésima observación.
⋆ Se define el i-ésimo *residual studentizado (externamente)* al residual dividido por la estimación de la desviación estándar del residual sin incluir precisamente la i-ésima observación. A saber,

$$\hat{t}_i = \frac{\hat{e}_i}{s_{(i)}\sqrt{1-h_{ii}}} \sim t_{(n-1-q)}$$

bajo la hipótesis esférica de los errores ($\epsilon \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$).

Criterio

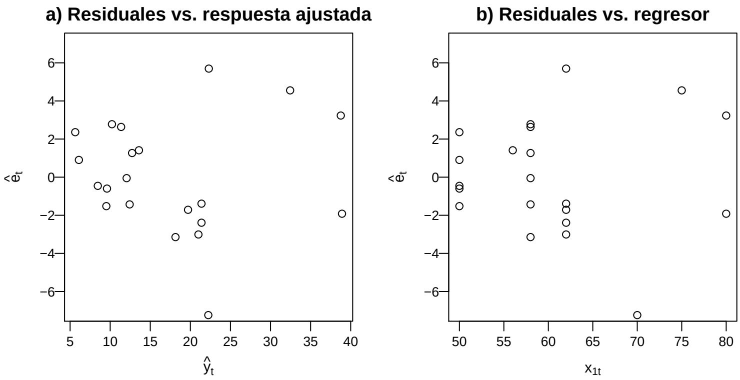
Si $\hat{t}_i$ es grande, llama la atención pues ϵ_i no fue considerado en el ajuste.

$n < 30$, se recomienda hacer análisis con los residuales studentizados; en otro caso, con los estandarizados.

−ebz

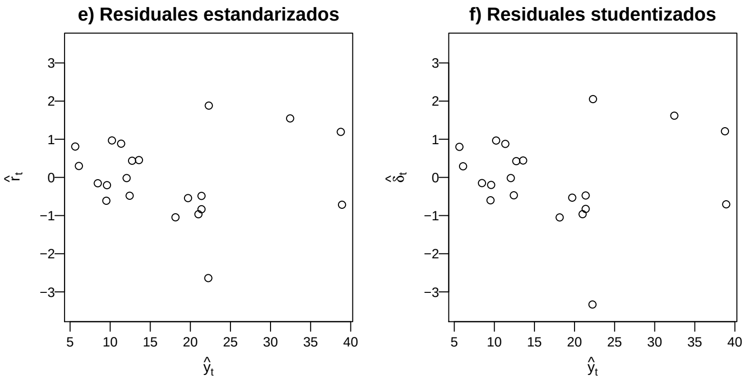
Ejemplo: Producción de ácido (cont.)

Análisis de residuales



Ejemplo: Producción de ácido (cont.)

Análisis de residuales



Residuales y Datos Influyentes

En cualquier juego de datos cuando la estimación de uno o más parámetros dependen “mucho” de unos “pocos” datos, éstos se llaman *datos influyentes* y son síntoma de problemas potenciales. Si es el caso, las conclusiones son muy *sensibles* y posiblemente se necesite de más información. Una medida de la influencia de los datos es la *distancia de Cook*:

$$d_i = \frac{||\hat{y} - \hat{y}_{(i)}||^2}{qs^2}, \quad i = 1, \ldots, n$$

donde $\hat{y}_{(i)}$ es el valor estimado del vector respuesta sin considerar la i-ésima observación en el ajuste.

Criterio

Si la i-ésima observación no es muy importante, se espera que d_i sea pequeño. Valores grandes de d_i son motivo de cuidado.

$$d_i = \left[\frac{\hat{e}_i}{s\sqrt{1-h_{ii}}}\right]^2 \left[\frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}\right] \frac{1}{q} = \left[\hat{\delta}_i\right]^2 \left[\frac{\mathrm{var}(\hat{y}_i)}{\mathrm{var}(\hat{e}_i)}\right] \frac{1}{q}$$

Criterio

Si $d_i > 1$ es posible que la i-ésima observación sea de influencia.

–ebz

Notas a la distancia de Cook

La distancia de Cook tiene dos componentes:

- El primero, refleja qué tan bien se ajusta el modelo a la i-ésima observación.
- El segundo, nos indica qué tan lejos se encuentra el i-ésimo punto del resto de los datos.

Cada uno de los componentes anteriores (o ambos) contribuyen a una distancia de Cook "grande".

Extensiones a la distancia de Cook

Belsley, Kuh y Welsch (1980), proponen varias medidas para estudiar la influencia de la i-ésima observación sobre las estimaciones y ajustes. A saber:

1. *DFBETAS*: El cambio del coeficiente $\hat{\beta}_j$ en unidades de desviaciones estándar. (Qué tanto cambia el j-ésimo coeficiente si se realiza el ajuste sin la i-ésima observación).

$$DFBETAS_{j,i} = \frac{\hat{\beta}_j - \hat{\beta}_{j(i)}}{s_{(i)}\sqrt{C_{jj}}}, \quad j = 1, \ldots, p; \ i = 1, \ldots, n$$

donde C_{jj} es el j-ésimo elemento de la diagonal de la matriz $(X'X)^{-1}$.

Criterio

Si $|DFBETAS_{j,i}| > 2/\sqrt{n}$, entonces la i-ésima observación debe ser examinada.

Extensiones a la distancia de Cook

2. *DFFITS*: Dice cuánto cambia $\hat{y}_i$, en desviaciones estándar, si no se considera la i-ésima observación.

$$DFFITS_i = \frac{\hat{y}_i - \hat{y}_{(i)}}{s_{(i)}\sqrt{h_{ii}}}, \quad i = 1, \ldots, n$$

Criterio

Si $|DFFITS_i| > 2\sqrt{q/n}$, entonces la i-ésima observación debe ser examinada. (Se considera influyente.)

La distancia de Cook, *DFFITS* y *DFBETAS* no dan una medida en la precisión del modelo.

Extensiones a la distancia de Cook

3. *COVRATIO*: Dice cuánto cambia la precisión de las estimaciones si no se considera la i-ésima observación.

$$COVRATIO_i = \frac{|(X'_{(i)}X_{(i)})^{-1}s^2_{(i)}|}{|(X'X)^{-1}s^2|} = \left[\frac{s^2_{(i)}}{s^2}\right]^q \left(\frac{1}{1-h_{ii}}\right), \quad i = 1, \ldots, n$$

Criterio

Si $COVRATIO_i > 1 + 3q/n$, o bien, $COVRATIO_i < 1 - 3q/n$ ($n > 3q$) entonces la i-ésima observación debe ser examinada.

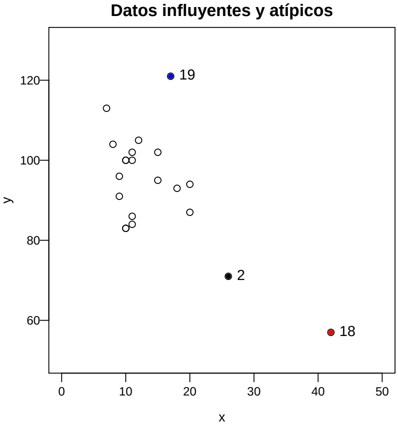
De acuerdo a Montgomery et al. (2001),

- Si $COVRATIO_i < 1$, indica que incluir la i-ésima observación en el modelo *mejora* la precisión en la estimación.
- Si $COVRATIO_i > 1$, indica que incluir la i-ésima observación en el modelo *empeora* la precisión en la estimación.

Ejemplo: Score de aptitud de Gesell (cont.)x

n: Observación
x: Edad primera palabra (meses)
y: Score de aptitud de Gesell

n	x	y	n	x	y
1	15	95	11	7	113
2	26	71	12	9	96
3	10	83	13	10	83
4	9	91	14	11	84
5	15	102	15	11	102
6	20	87	16	10	100
7	18	93	17	12	105
8	11	100	18	42	57
9	8	104	19	17	121
10	20	94	20	11	86
			21	10	100

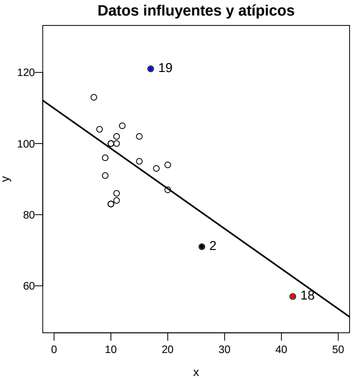


Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Ajuste

Datos completos

```
lm(formula = y ~ x, data = dat)

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 109.8738     5.0678  21.681 7.31e-15
x            -1.1270     0.3102  -3.633  0.00177

Residual standard error: 11.02 on 19 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.41,      Adjusted R-squared: 0.3789
F-statistic:  13.2 on 1 and 19 DF,  p-value: 0.001769
```



Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Estadístico de Cook y Residuales

Datos completos

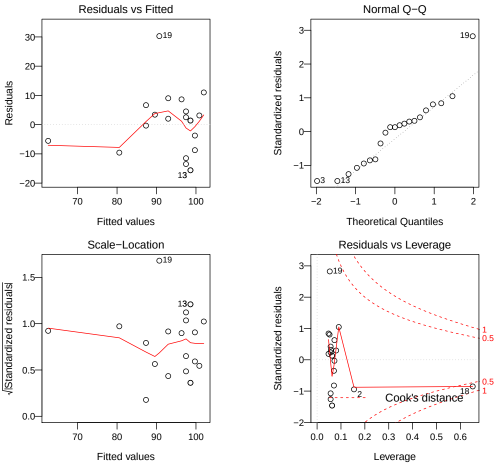
```
> print(influence.measures(lm(y ~ x, data=dat))
Influence measures of lm(formula = y ~ x, data = dat) :

    dfb.1_    dfb.x    dffit cov.r   cook.d    hat inf
1   0.01664  0.00328  0.04127 1.166 8.97e-04 0.0479
2   0.18862 -0.33480 -0.40252 1.197 8.15e-02 0.1545
3  -0.33098  0.19239 -0.39114 0.936 7.17e-02 0.0628
4  -0.20004  0.12788 -0.22433 1.115 2.56e-02 0.0705
5   0.07532  0.01487  0.18686 1.085 1.77e-02 0.0479
6   0.00113 -0.00503 -0.00857 1.201 3.88e-05 0.0726
7   0.00447  0.03266  0.07722 1.170 3.13e-03 0.0580
8   0.04430 -0.02250  0.05630 1.174 1.67e-03 0.0567
9   0.07907 -0.05427  0.08541 1.200 3.83e-03 0.0799
10 -0.02283  0.10141  0.17284 1.152 1.54e-02 0.0726
11  0.31560 -0.22889  0.33200 1.088 5.48e-02 0.0908
12 -0.08422  0.05384 -0.09445 1.183 4.68e-03 0.0705
13 -0.33098  0.19239 -0.39114 0.936 7.17e-02 0.0628
14 -0.24681  0.12536 -0.31367 0.992 4.76e-02 0.0567
15  0.07968 -0.04047  0.10126 1.159 5.36e-03 0.0567
16  0.02791 -0.01622  0.03298 1.187 5.74e-04 0.0628
17  0.13328 -0.05493  0.18717 1.096 1.79e-02 0.0521
18  0.83112 -1.11275 -1.15578 2.959 6.78e-01 0.6516   *
19  0.14348  0.27317  0.85374 0.396 2.23e-01 0.0531   *
20 -0.20761  0.10544 -0.26385 1.043 3.45e-02 0.0567
21  0.02791 -0.01622  0.03298 1.187 5.74e-04 0.0628
```

−ebz

Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Análisis de residuales

Datos completos

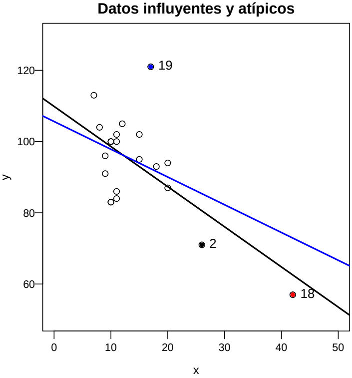


Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Ajuste

Datos incompletos

```
lm(formula = y ~ x, data = dat[-18, ])

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-14.838  -8.477   1.779   4.688  28.617

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 105.6299     7.1619  14.749 1.71e-11
x            -0.7792     0.5167  -1.508    0.149

Residual standard error: 11.11 on 18 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.1122,     Adjusted R-squared: 0.06284
F-statistic: 2.274 on 1 and 18 DF,  p-value: 0.1489
```



Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Estadístico de Cook y Residuales
Datos incompletos

```
> print(influence.measures(lm(y ~ x, data=dat[-18,]))
Influence measures of lm(formula = y ~ x, data = dat[-18, ]) :
      dfb.1_    dfb.x   dffit cov.r   cook.d    hat inf
1  -0.000958  0.00916  0.0238 1.190 0.000301 0.0587
2   1.149535 -1.41963 -1.5135 1.357 1.019719 0.4158   *
3  -0.307690  0.20602 -0.3891 0.962 0.071604 0.0695
4  -0.186220  0.13747 -0.2149 1.156 0.023752 0.0846
5  -0.007407  0.07081  0.1843 1.118 0.017423 0.0587
6   0.072145 -0.10309 -0.1250 1.315 0.008237 0.1561
7  -0.019187  0.03173  0.0440 1.249 0.001025 0.1041
8   0.045157 -0.02549  0.0664 1.181 0.002322 0.0587
9   0.133687 -0.10516  0.1459 1.225 0.011144 0.1041
10 -0.093841  0.13409  0.1626 1.306 0.013889 0.1561
11  0.456492 -0.37549  0.4811 1.076 0.112130 0.1279
12 -0.063165  0.04663 -0.0729 1.217 0.002804 0.0846
13 -0.307690  0.20602 -0.3891 0.962 0.071604 0.0695
14 -0.208747  0.11785 -0.3068 1.005 0.045752 0.0587
15  0.076149 -0.04299  0.1119 1.163 0.006552 0.0587
16  0.042432 -0.02841  0.0537 1.199 0.001521 0.0695
17  0.099366 -0.03815  0.1873 1.099 0.017898 0.0522
19 -0.343415  0.65879  1.0298 0.437 0.335261 0.0846   *
20 -0.174596  0.09857 -0.2566 1.056 0.032811 0.0587
21  0.042432 -0.02841  0.0537 1.199 0.001521 0.0695
```

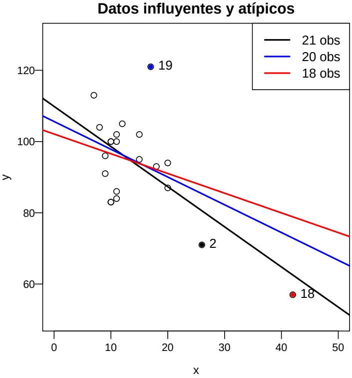
−ebz

Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Ajuste

Datos incompletos

```
lm(formula = y ~ x, data = dat[-c(2, 18, 19), ])

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-13.582  -5.614   2.069   5.471  14.757 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 102.1177     6.6940  15.255 5.93e-11
x            -0.5535     0.5295  -1.045    0.311

Residual standard error: 8.553 on 16 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.06394,    Adjusted R-squared: 0.005439
F-statistic: 1.093 on 1 and 16 DF,  p-value: 0.3114
```



Ejemplo: Score de Aptitud de Gesell (cont.)

Estadístico de Cook y Residuales

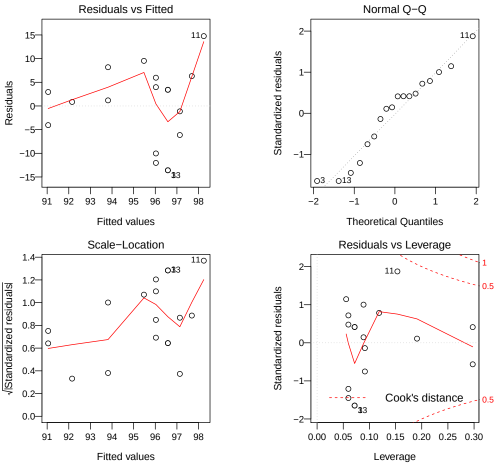
Datos incompletos

```
> print(influence.measures(lm(y ~ x, data=dat[-c(2,18,19),])))
Influence measures of lm(formula = y ~ x, data = dat[-c(2, 18, 19), ]) :

    dfb.1_   dfb.x   dffit cov.r   cook.d    hat inf
1  -0.0152  0.0269  0.0439 1.245 0.001027 0.0888
3  -0.3496  0.2313 -0.4869 0.845 0.104990 0.0717
4  -0.1956  0.1472 -0.2352 1.165 0.028464 0.0913
5  -0.1080  0.1915  0.3130 1.097 0.048964 0.0888
6   0.2621 -0.3239 -0.3592 1.556 0.067444 0.2974   *
7  -0.0332  0.0436  0.0518 1.404 0.001428 0.1910   *
8   0.0642 -0.0315  0.1178 1.176 0.007295 0.0598
9   0.2566 -0.2075  0.2847 1.193 0.041547 0.1186
10 -0.1904  0.2353  0.2609 1.585 0.035916 0.2974   *
11  0.8254 -0.6992  0.8754 0.818 0.318850 0.1535
12 -0.0356  0.0268 -0.0428 1.249 0.000975 0.0913
13 -0.3496  0.2313 -0.4869 0.845 0.104990 0.0717
14 -0.2072  0.1016 -0.3801 0.913 0.066932 0.0598
15  0.0974 -0.0478  0.1788 1.133 0.016494 0.0598
16  0.0806 -0.0533  0.1122 1.200 0.006648 0.0717
17  0.0885 -0.0041  0.2809 1.015 0.038629 0.0556
20 -0.1689  0.0828 -0.3099 0.999 0.046525 0.0598
21  0.0806 -0.0533  0.1122 1.200 0.006648 0.0717
```

Ejemplo: Score de aptitud de Gesell (cont.)

Análisis de residuales

Datos incompletos



Residuales y datos influyentes

- *¿Qué hacer con las observaciones influyentes?*
  El análisis de residuales de apalancamiento de los datos ayuda a conocerlos mejor y a saber qué observaciones hay que examinar más detenidamente.
- *¿Se deben eliminar?*
  De acuerdo a Montgomery (2001), si se sabe que existió un error de captura o que la observación no es parte de la población que se pretende muestrear, sí se debe eliminar. Sin embargo, si es una observación válida no hay justificación para eliminarla.

−ebz