

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

# Análisis Avanzado de Datos

Nicolás López

Primer semestre de 2026

## ① Introducción a la clase

## ② Principios de R

## ③ Estadística introductoria

## ④ Aprendizaje estadístico

## ⑤ RLS

## ⑥ Inestabilidad en la Estimación: Multicolinealidad y Complejidad

## ⑦ Regresión ridge

## ⑧ Regresión lasso

## ⑨ Extensiones del método

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Introducción a la clase

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

# Introducción a la clase

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Detalles del curso:

- Análisis avanzado de datos (AAD)
- 8 sesiones. Sede Claustro UR. Salón BOOLE.
- Horario: Sábados: 7am a 10am.
- Modalidad: Presencial.
- Profesor: Nicolás López.

## Pre requisitos

- Fundamentos de programación en R.
- Fundamentos AED (Análisis Estadístico de Datos): Estadística introductoria.
- Contenido AED.
  - Modelos lineales: RLS y RLM.
  - Análisis en componentes principales.
  - Distribución normal multivariada.
  - Métodos de clasificación: kmeans y aglomeramiento jerárquico.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

Programa: Disponible en eaulas.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Principios de R

# Principios de R

Herramienta de gran importancia en el análisis de datos, particularmente en el contexto de AAD:

- Innovación en investigación y modelamiento: ej BTM.
- Gran trayectoria en visualización efectiva y manipulación de datos: ej tidyverse y ggplot.
- Modelamiento avanzado altamente documentado: gamlss.

Instrucciones de instalación local disponible en eaulas. También existe opción remota (antiguo Rstudio Cloud).

Laboratorios introductorios están disponibles en eaulas. Se recomienda realizar los laboratorios introductorios 0 y 1.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Estadística introductoria

# Estadística introductoria

Introducción  
a la clase

Principios de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

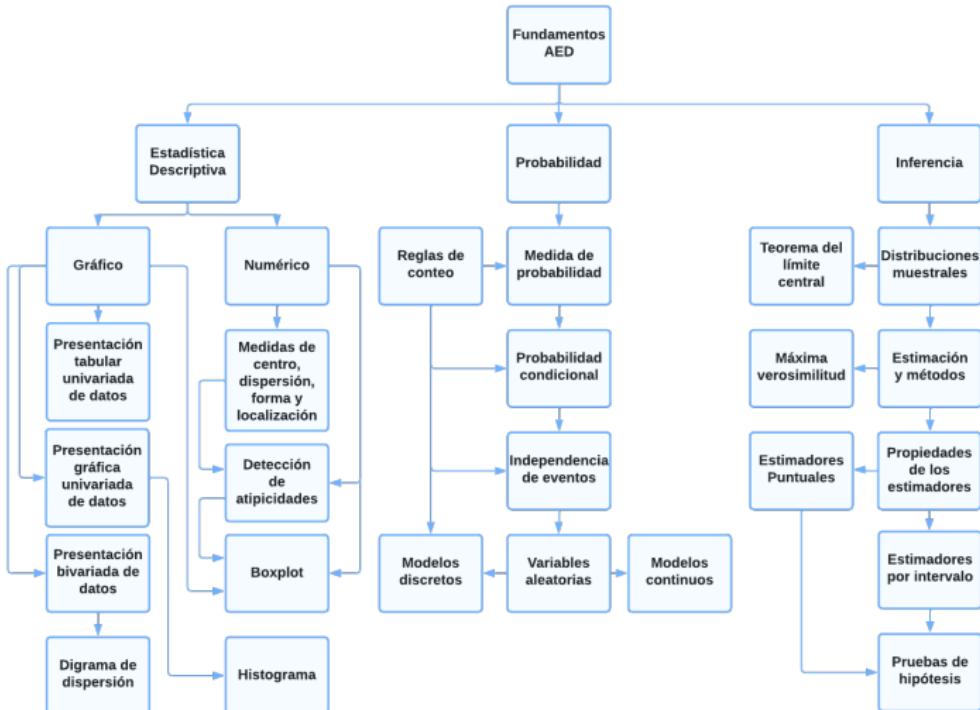
RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método



Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Aprendizaje estadístico

# Introducción

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad  
y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

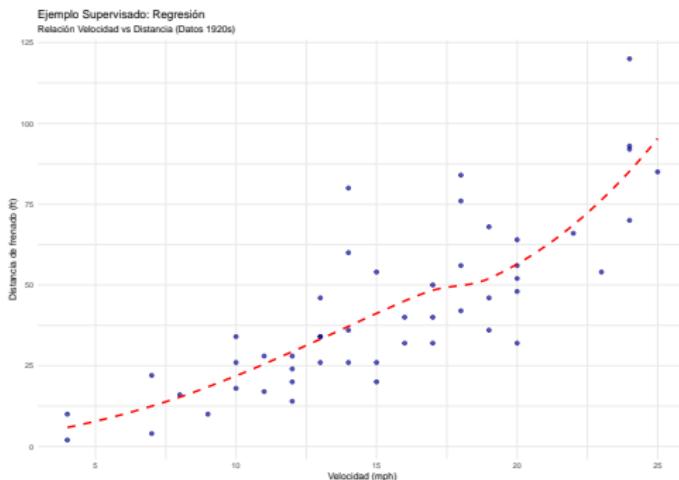
Aprender el proceso subyacente generador de datos. El proceso es formalizado matemáticamente en el aprendizaje estadístico y se clasifica en dos grupos:

- Aprendizaje supervisado: Se tiene un resultado (*outcome*) que guía el proceso de aprendizaje (ej. identificación de dígitos).
- Aprendizaje no supervisado. No se tiene una medición de un resultado para guiar el aprendizaje (ej. clasificación de carros basado en características).

En ambos escenarios se cuenta con un conjunto de covariables (*features*) que permiten el aprendizaje.

# ¿Aprendizaje supervisado o no supervisado?

## Ejemplo 1



función  $f$  tal que  $Y \approx f(X)$ .

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

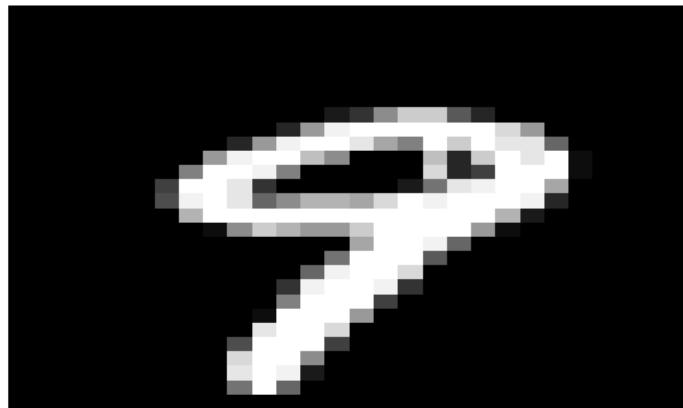
Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Ejemplo 2

**Etiqueta Real: 9**



## Tipos de variables

Dependiendo de la naturaleza de las variables (Cuantitativas vs Cualitativas), seleccionamos el método:

- Cuantitativas
- Cualitativas

Esto tanto para las covariables como para la variable respuesta. Existe un mayor refinamiento en la categorización, pero por ahora basta entender que **el mismo problema de aprendizaje (supervisado o no) puede darse para diferente naturaleza de las variables**:

- Análisis de regresión lineal (simple/múltiple): Supervisado con respuesta cuantitativa.
- Análisis de componentes principales: No supervisado con covariables cuantitativas.
- Análisis de correspondencias (simple/múltiple): No supervisado con covariables cualitativas.
- Árbol de decisión: Supervisado con respuesta cualitativa.

Recurso recomendado: YouTube: Supervised vs Unsupervised Learning

## Definiciones importantes

Se destacan 4 elementos fundamentales en el aprendizaje estadístico dada la revisión anterior:

- Proceso generador  $P$ .
- Variable de entrada/covariable/input:  $X$  (uni/multivariada).
- Variable de salida/variable respuesta/output:  $Y$  (univariada usualmente).
- Observaciones/realizaciones/mediciones:  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ .

Estas mediciones son arregladas en una matriz diseño  $\mathbf{X}$ .

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

**RLS**

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

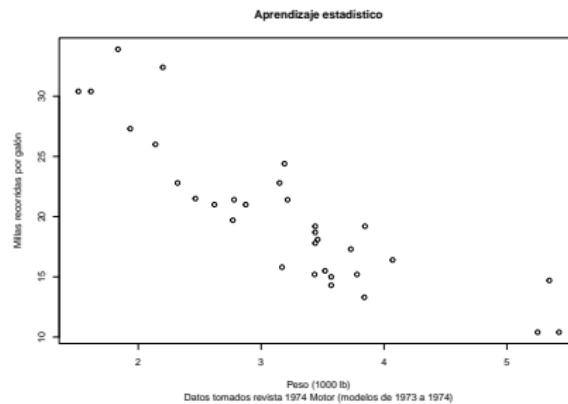
Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

**RLS**

## Introducción

Si analizamos con detenimiento la gráfica de dispersión de los datos de velocidad podemos establecer con claridad una relación entre estas dos variables.



Si  $Y$  representa 'Millas recorridas por galón' y  $X$  es igual a 'Peso (1000 lb)', podemos representar una relación **determinística** entre las variables de la siguiente forma:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X$$

Por lo tanto una relación **aleatoria** que ajusta por el error está formulado por:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \epsilon$$

La ecuación anterior se llama *Modelo de Regresión Lineal Simple*.

El modelo aleatorio está completamente especificado cuando definimos las características aleatorias del error, suponemos que  $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$ . Tanto el error como la respuesta son aleatorias, bajo normalidad de  $\epsilon$ ,  $Y$  también es normal (¿por qué?). Entonces la respuesta esperada de  $Y$  dado  $X$  es:

$$E(Y|X) = \mu_{Y|X} = E(\beta_0 + \beta_1 X + \epsilon) = \beta_0 + \beta_1 X$$

Con una varianza igual a

$$V(Y|X) = \sigma_{Y|X} = V(\beta_0 + \beta_1 X + \epsilon) = V(\epsilon) = \sigma^2$$

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

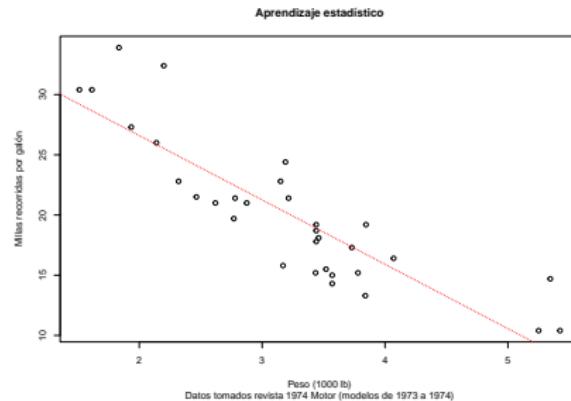
Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

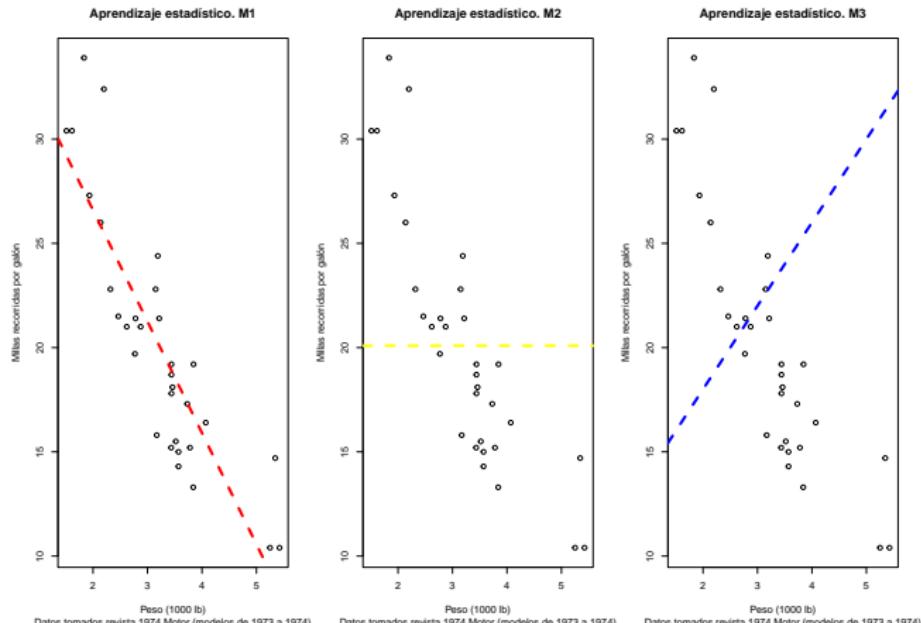
El modelo de regresión  $\mu_{Y|X}$  es una línea recta de valores promedios, esto es, la altura de la línea de regresión en  $X$  es el valor esperado  $\beta_0 + \beta_1 X$ . Esto implica que hay una distribución de valores de  $Y$  para cada  $X$ , y que la varianza  $\sigma^2$  de esta distribución es igual en cada  $X$ .



Con una realización de  $n$  observaciones  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  se estiman los parámetros del modelo:  $\hat{\beta}_0$ ,  $\hat{\beta}_1$ , y  $\hat{\sigma}$ .

## Ajuste por mínimos cuadrados

Para encontrar la línea que se ajusta mejor a los datos, necesitamos una medida de calidad del ajuste. Bajo estos tres candidatos es claro cual resulta en una menor **suma de cuadrados**:



Es claro que:

$$SC(M1) < SC(M2) < SC(M3)$$

Con

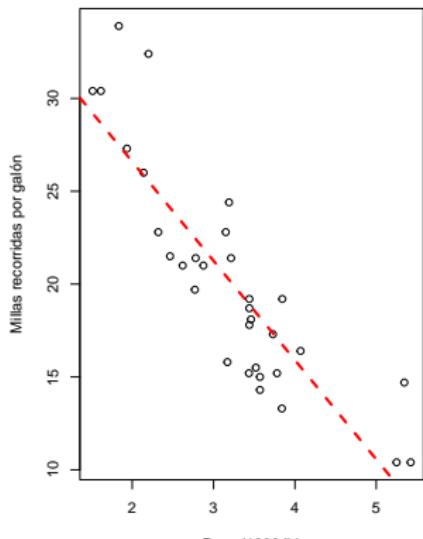
$$SC(Mj) = \sum_i (y_i - \hat{y}_{i,Mj})^2$$

En dónde

- El **modelo simple o reducido** (M2) no utiliza información de  $X$  para encontrar el valor de  $Y$ , asume el valor promedio de  $Y$  como modelo marginal. Este es considerado la línea base (*baseline*).
- La estimación por mínimos cuadrados consiste en encontrar  $\beta_0$  y  $\beta_1$  de tal forma que minimicen la suma de cuadrados, es decir, los **residuales cuadrados**. (¿qué sucedió con  $\sigma$  en la estimación?).

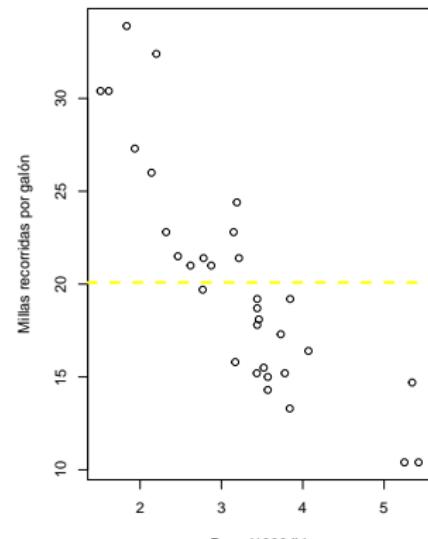
Es evidente que hay menor variabilidad alrededor de  $M1$  que alrededor de  $M2$ , es decir que la variación de las millas recorridas es explicada por el peso del vehículo. ¿Cómo formalizar esta noción?

Aprendizaje estadístico. M1



Datos tomados revista 1974 Motor (modelos de 1973 a 1974)

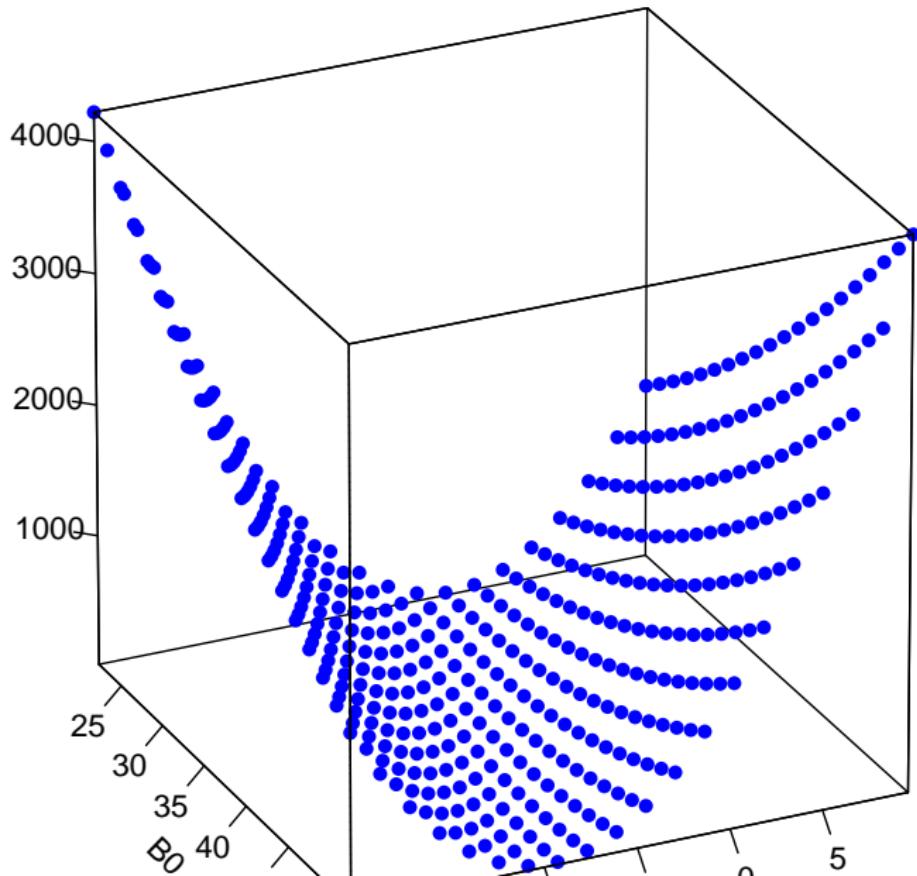
Aprendizaje estadístico. M2



Datos tomados revista 1974 Motor (modelos de 1973 a 1974)

La  $SC$  del modelo simple ( $SC(M2) = SC_T$ ) cuantifica la variabilidad total de  $Y$  respecto a su media. Por su parte  $SC(M1) = SC_E$  mide la variación remanente al ajustar el modelo mediante mínimos cuadrados.

Fíjese que para cada modelo se tiene un intercepto y una pendiente ( $\beta_0, \beta_1$ ), y con ello se obtiene  $SC_E$ , es decir  $SC_E(\beta_0, \beta_1)$ . Los valores estimados ( $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ ) por mínimos cuadrados minimizan la función de error:



Para cualquier pareja de parámetros, comparar  $SC_T$  con  $SC_E$  cuantifica la reducción de la variabilidad bajo el modelo lineal en  $X$ . La reducción de la varianza en  $Y$  explicada por  $X$  bajo el modelo es igual a:

$$SC_M = SC_T - SC_E$$

Así  $SC_M$  cuantifica la reducción en la variación total al ajustar el modelo lineal en  $X$ . Al igual que  $SC_E$ ,  $SC_M$  es función de  $(\beta_0, \beta_1)$ , es decir  $SC_M(\beta_0, \beta_1)$ , la cual es maximizada en  $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$  por mínimos cuadrados (¿qué unidades tiene  $SC_M$ ?).

La  $SC_M$  es estandarizada como:

$$R^2 = \frac{SC_M}{SC_T}$$

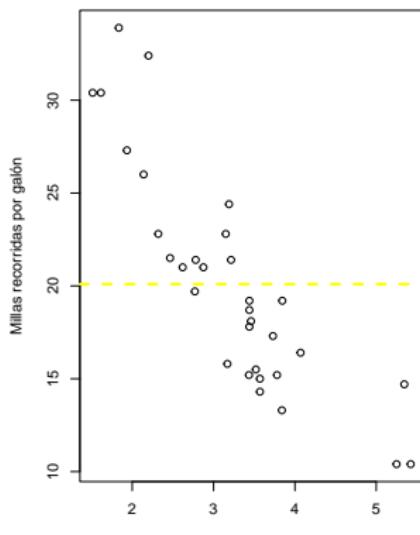
- Con  $R^2$  cuantificamos la **proporción** de la varianza en  $Y$  explicada por el regresor  $X$ .
- Al ser  $R^2$  cercano a 1,  $SC_M$  se acerca a  $SC_T$ , es decir que el *modelo explica* la variabilidad en  $Y$  (*¿cómo lo medimos objetivamente?*).
- Al ser  $R^2$  cercano a 0,  $SC_M$  se aleja de  $SC_T$ , es decir que el *modelo no explica* la variabilidad en  $Y$  (*¿cómo lo medimos objetivamente?*).

En nuestro ejemplo  $R^2 = 0.75$ , con lo cual hay una reducción de la varianza de un 75% en las millas recorridas al considerar linealmente el peso del vehículo.

Note que esta definición de  $R^2$  aplica para situaciones aún más generales, por ejemplo, para un modelo con componente lineal y **cuadrático** en  $X$ :

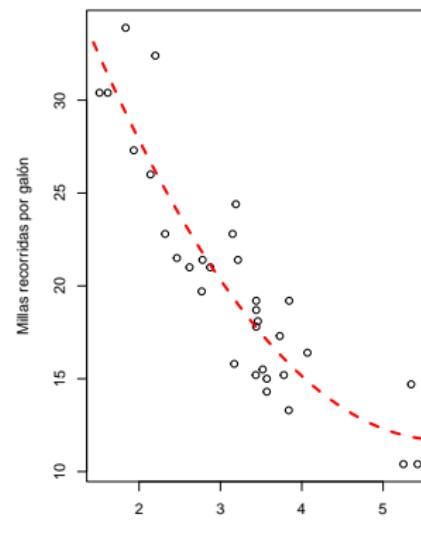
$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2$$

Aprendizaje estadístico. Modelo generador



Datos tomados revista 1974 Motor (modelos de 1973 a 1974)

Aprendizaje estadístico. Modelo reducido

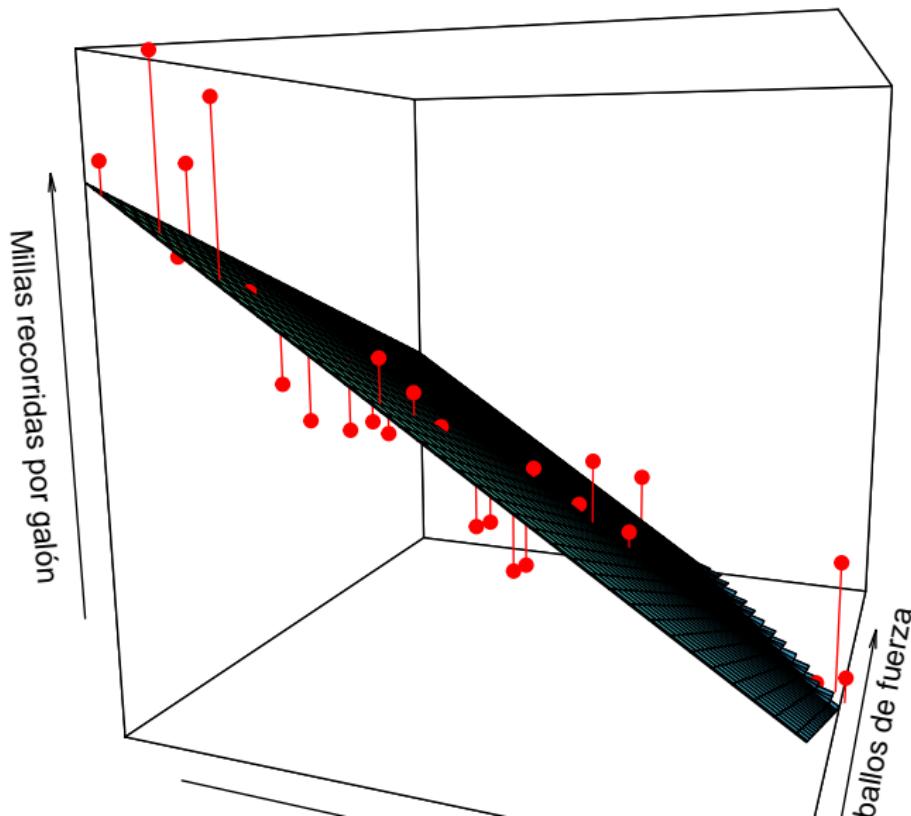


Datos tomados revista 1974 Motor (modelos de 1973 a 1974)

Y bajo este modelo, tenemos un  $R^2 = 0.81$ .

También para el escenario multivariado, con  $Z$  igual a los caballos de fuerza del vehículo

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 Z$$



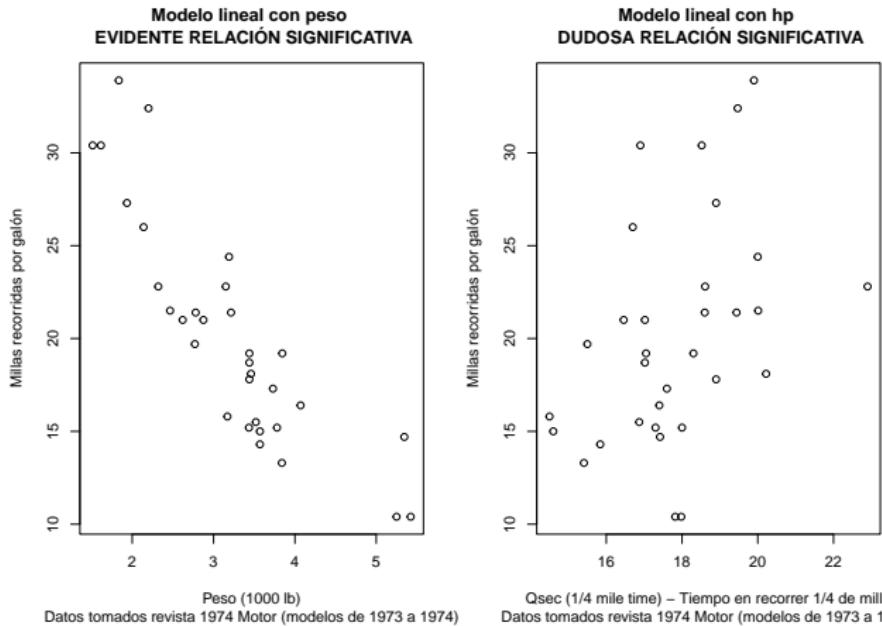
Note que incorporar una variable al modelo, esta puede o no ser relevante para explicar la variabilidad en  $Y$ . Si la variable  $Z$  no tiene efecto en la respuesta:

- Al minimizar  $SC_M$ , se lleva a  $\beta_2 = 0$  y así  $Y = \beta_0 + \beta_1 X + 0Z = Y = \beta_0 + \beta_1 X$  tenemos el modelo de RLS.
- $SC_M$  es la misma bajo los dos modelos, es decir añadir  $Z$  no mejoró, ni empeoró  $R^2$ .
- Añadir variables mantiene igual o incluso **mejora**  $R^2$  aunque no sean de utilidad para explicar  $Y$ .
  - Variables irrelevantes pueden estar correlacionadas con la variable  $Y$  por coincidencia.
  - Mas variables irrelevantes aumentan la probabilidad de que esto suceda, mejorando artificialmente  $R^2$ .

En la práctica se reporta usualmente un  $R^2$  ajustado por en número de variables.

## Significancia de la regresión

Volviendo a RLS, no es claro cómo determinar o medir qué tan significativo resulta el valor de  $R^2$ , ¿en qué punto de  $R^2$  el modelo es realmente mejor con o sin la covariante?



## Recuerde que:

- La variación o error total en los datos,  $SC_T$ , corresponde a la variación total al asumir el modelo reducido.
- Al considerar la covariante mediante el modelo lineal disminuimos este error, la nueva variación la llamamos  $SC_E$ .
- La diferencia entre  $SC_T$  y  $SC_E$  corresponde a la variabilidad explicada por el modelo, o  $SC_M$ .

$SC_T$  es una suma de cuadrados, por lo cual tiene **grados de libertad** ( $gl$ ) asociados. Los  $gl(SC_T)$  indican la cantidad de unidades de información relacionadas con los  $n$  números independientes  $y_1, \dots, y_n$  necesarios para calcular  $SC_T$ :

- Para el cálculo de  $SC_T$  hacen falta  $gl(SC_T) = n - 1$  unidades para determinarlo:
  - $y'_1 = y_1 - \bar{y}$ .
  - $\dots$ .
  - $y'_{n-1} = y_n - \bar{y}$ .
  - Como  $\sum_i y'_i = 0$  se tiene  $y'_n = -\sum_{i=1}^{n-1} y'_i$ .
  - $y'_n = f(y'_1, \dots, y'_{n-1})$ .

Con lo cual  $SC_T = \sum_i (y_i - \bar{y})^2 = \sum_i y_i'^2 = f(y'_1, \dots, y'_{n-1})$  tiene  $n - 1$  grados de libertad. Note que hace falta un parámetro (el promedio), para estimar  $SC_T$ , por eso se pierde un  $gl$  de los  $n$  que tienen los datos  $y_1, \dots, y_n$ .

$SC_E$  es una suma de cuadrados, por lo cual tiene **grados de libertad** ( $gl$ ) asociados. Los  $gl(SC_E)$  indican la cantidad de unidades de información relacionadas con los  $n$  números independientes  $y_1, \dots, y_n$  necesarios para calcular  $SC_E$ :

- Para el cálculo de  $SC_E$  hacen falta  $p = 2$  parámetros (pendiente e intercepto, en RLS) para ser estimado, por lo cual perdemos 2 grados de libertad, es decir  $gl(SC_E) = n - p$ .

$SC_M$  es una suma de cuadrados, por lo cual tiene **grados de libertad** ( $gl$ ) asociados. Los  $gl(SC_M)$  indican la cantidad de unidades de información relacionadas con los  $n$  números independientes  $y_1, \dots, y_n$  necesarios para calcular  $SC_M$ :

- Como vimos,  $SC_M = SC_T - SC_E$ , se tiene de la misma forma  $gl(SC_M) = gl(SC_T) - gl(SC_E) = (n - 1) - (n - p) = p - 1$ , en RLS,  $p - 1 = 2 - 1 = 1$ .

De manera semejante a  $R^2$ , podemos definir una relación entre las sumas de cuadrados, esta vez entre  $SC_M$  y  $SC_E$ , para establecer un estadístico que caracterice la calidad del ajuste:

$$F' = \frac{SC_M}{SC_E}$$

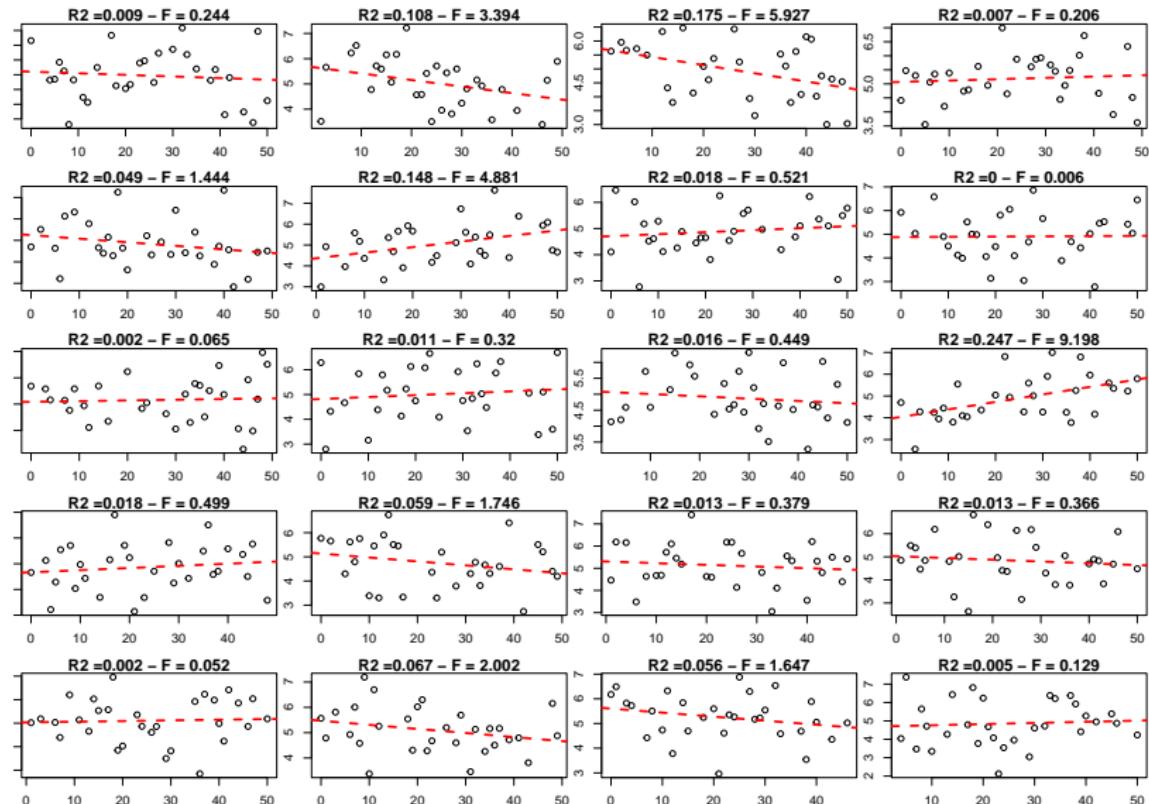
- $F'$  es fácilmente interpretable: a medida que aumente, la variabilidad explicada por el modelo aumenta respecto a la que este deja de explicar.
- $F'$  es una razón en lugar de una proporción, pero su diferencia con  $R^2$  es de forma, más no de fondo. De hecho sus numeradores son iguales.

Al normalizar por los  $g_l$  de cada  $SC$  en  $F'$ , tenemos el estadístico  $F$  como un cociente de varianzas:

$$F = \frac{SC_M/g_l(SC_M)}{SC_E/g_l(SC_E)}$$

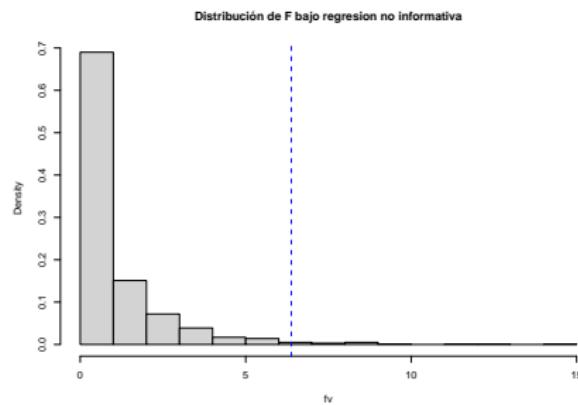
- Tanto  $F$  como  $F'$  tienen la misma interpretación.
- Su diferencia radica en que, cuando la regresión no es informativa (es decir, los parámetros de las covariables son iguales a cero),  $F$  sigue una distribución estadística conocida, la distribución  $F$ -
- Los parámetros de  $F$  bajo la *hipótesis nula* son  $g_l(SC_M)$  en el numerador y  $g_l(SC_E)$  en el numerador y denominador.

Si la regresión no es informativa  $\beta_1 = 0$  y los datos podrían verse como:



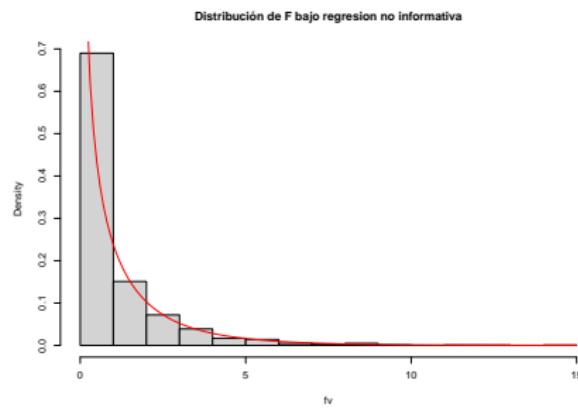
Podemos encontrar la distribución empírica de  $F$  bajo dicha **hipótesis** y agregar a esta los valores  $F$  observados para los modelos de regresión encontrados en la motivación de la sección

```
fv = NULL
set.seed(10)
for(i in 1:1000){
  xv    = sample(0:50,size=32) ; yv    = rnorm(32)
  lm_0  = lm(yv~xv)
  fv[i] = summary(lm_0)$fstatistic['value']
}
lm_sig = lm(mpg~wt,data=mtcars)
lm_nsig = lm(mpg~qsec,data=mtcars)
hist(fv,prob=TRUE,main = 'Distribución de F bajo regresión no informativa')
abline(v = summary(lm_sig)$fstatistic['value'],col='red',lty=2,lwd=2)
abline(v = summary(lm_nsig)$fstatistic['value'],col='blue',lty=2,lwd=2)
```



No es necesario encontrar manualmente la distribución, ya que bajo la **hipótesis nula**  $F$  sigue una distribución estadística conocida, la distribución  $F$ , con  $gI(SC_M) = 1$  en el numerador y  $gI(SC_E) = n - 2 = 32 - 2 = 30$  en el denominador:

```
hist(fv,prob=TRUE,main = 'Distribución de F bajo regresión no informativa')
xval = seq(0,15,by=0.1)
yval = df(xval,df1=1,df2=30)
lines(xval,yval,col='red',lty=1,lwd=2)
```



Y con esta hacer inferencia (cálculo de  $p$  valor). Note que, nuevamente, esta cuantificación es también aplicable para RLM.

Finalmente se destaca que hay una lista de premisas bajo el modelo lineal:

- Relación (aproximadamente) lineal.
- Error con media cero.
- Error con varianza constante.
- Errores no correlacionados - correlación bajo RLS/RLM implica una disminución artificial de la varianza - falsa significancia.
- Errores normalmente distribuidos - necesaria para probar, entre otras, la hipótesis sobre  $F$ .

Los cuales no son detectados mediante  $R^2$ , o  $F$ , al ser propiedades globales del modelo. Un modelo inadecuado puede resultar en conclusiones incluso opuestas a las reales bajo el proceso real generador de datos.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Inestabilidad en la Estimación: Multicolinealidad y Complejidad

# Inestabilidad en la Estimación: Multicolinealidad y Complejidad

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolin-  
ealidad y  
Compleji-  
dad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

Multicolinealidad (Varianza Inflada): Ocurre cuando las covariables están correlacionadas linealmente.

- Métrica: Se manifiesta a través del Factor de Inflación de la Varianza (VIF).

$$V(\hat{\beta}_j) \propto \frac{1}{1 - R_j^2} = VIF_j$$

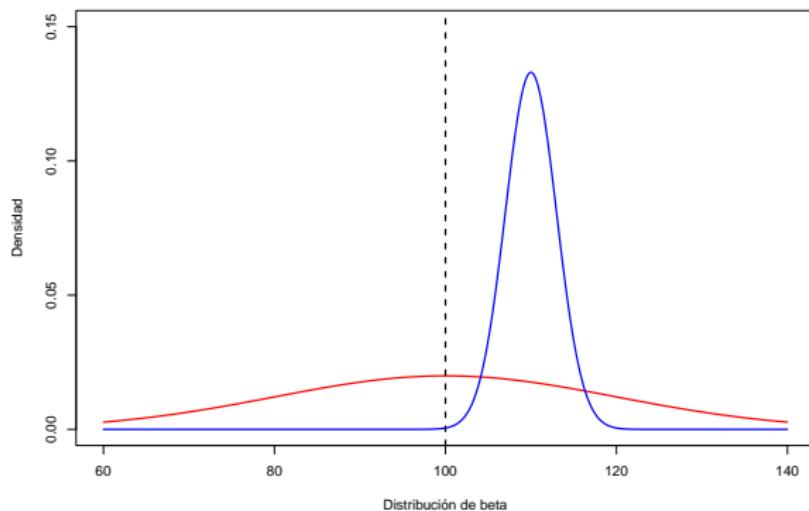
Con  $\beta' = (\beta_1, \dots, \beta_p)$  se tiene  $(\hat{\beta} - \beta)'(\hat{\beta} - \beta)$  como la distancia al cuadrado entre el parámetro y su estimación por mínimos cuadrados:

$$E(\hat{\beta} - \beta)'(\hat{\beta} - \beta) = \sigma^2 \sum_i \frac{1}{\lambda_i}$$

Con  $\{\lambda\}_i$  conjunto de valores propios de  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ . Este valor esperado es llamado **error cuadrático medio** de  $\hat{\beta}$  (o  $ECM(\hat{\beta})$ ).

La multicolinealidad hace que  $ECM(\hat{\beta})$  aumente. Esto no es bueno, ya que coeficientes muy grandes positivos se cancelarían con sus contrapartes correlacionadas con coeficientes muy grandes negativos.

Los estimadores de los parámetros  $\beta_i$  encontrados minimizando  $SC_E$  resultan ser de **varianza mínima** respecto a los demás estimadores lineales **insesgados** (BLUE). Esto es cierto tanto para RLS como para RLM (teorema de Gauss-Markov). Sin embargo, esto no es siempre bueno, pues no garantiza que la varianza sea pequeña.



Permitir menor varianza a costa de admitir sesgo en la estimación puede resultar en una estimación más consistente.

## Pregunta clave

Es decir que si  $P$  sigue una forma cuadrática, pero ajusto por MCO una linea recta (sin el cuadrado), obtengo un modelo insesgado (por el teorema de Gauss Markov)? .

- Si el mundo real es cuadrático y usas una línea recta: has violado el supuesto de Exogeneidad Estricta. El error ya no es “ruido”, es “información”. El teorema dice que MCO es el BLUE SI el modelo está bien especificado.
- No importa si recolectas un millón de datos ( $n \rightarrow \infty$ ); la línea recta siempre pasará por el lugar equivocado. Eso es sesgo puro.

Lo métodos a continuación (Ridge y Lasso) no arreglan el sesgo causado por un modelo mal especificado. Estas técnicas (llamadas regularización) fueron diseñadas para combatir la varianza alta (overfitting), no el sesgo.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Regresión ridge

## Regresión ridge

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

Asumiendo un modelo lineal con alta varianza. Agregar sesgo en la estimación de los parámetros es muy conveniente, El modelo lineal es el mismo que antes:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 Z$$

Esta vez con  $Z$  igual al cilindraje del vehículo. Sin embargo, en contraste con mínimos cuadrados, buscaremos ajustar los valores a los datos y además reducir la **magnitud** de los coeficientes. **No porque exista multicolinealidad el modelo lineal es un mal modelo para los datos.**

Como se mencionó anteriormente,  $ECM(\hat{\beta})$  aumenta bajo multicolinealidad. Después de una manipulación algebraica, este puede ser escrito como:

$$ECM(\hat{\beta}) = V(\hat{\beta}) + (E(\hat{\beta}) - \beta)^2 = V(\hat{\beta}) + B(\hat{\beta})^2$$

Suponiendo que se tiene otro estimador de  $\beta$ , llamado  $\hat{\beta}^*$  y permitimos que sea sesgado,  $E(\hat{\beta}^*) - \beta \neq 0$ , podríamos encontrar una menor varianza de aquella del BLUE. La **regresión ridge** es uno de los métodos para obtener estimadores sesgados de los coeficientes de regresión.

**Surgen dos preguntas respecto al método:**

- Qué tanto sesgo es necesario?
- Cómo a~nadir el sesgo en la estimación de mínimos cuadrados?

Surgen dos preguntas respecto al método:

- Qué tanto sesgo es necesario?. Aquél que resulte en una menor varianza y menor sesgo.
  - Para la varianza, imagine que tiene un **conjunto de datos de prueba** disponible. Con dichos datos puede calcular la  $SC_E$  bajo varios sesgos. Aquel que incurra en el menor  $SC_E$  será un buen candidato.
- Cómo a~nadir el sesgo en la estimación de mínimos cuadrados?. Depende el método: Ridge, Lasso, Elastic net son ejemplos de ello.

Agregar el sesgo en la estimación de  $\beta$  resulta en una generalización del estimador de mínimos cuadrados.

En regresión Ridge tenemos una constante  $\lambda \geq 0$  llamada **parámetro de sesgo**. Este parámetro penaliza la estimación de mínimos cuadrados:

$$SC_{E_R} = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_j \beta_j^2 = SC_E + \lambda \sum_j \beta_j^2$$

Note que

- $SC_{E_R} \geq SC_E$ , y como  $SC_T$  se mantiene fijo, la regresión ridge disminuye el  $R^2$  de mínimos cuadrados a medida que  $\lambda$  aumenta. Esto no es necesariamente malo -> Puede resultar en mayor poder de predicción fuera de la muestra (**reduce sobreajuste**).
- Al minimizar  $SC_{E_R}$  motivamos no solo a un buen ajuste a los datos, sino además una menor magnitud de los parámetros.
- Si  $\lambda = 0$  volvemos a RLS.

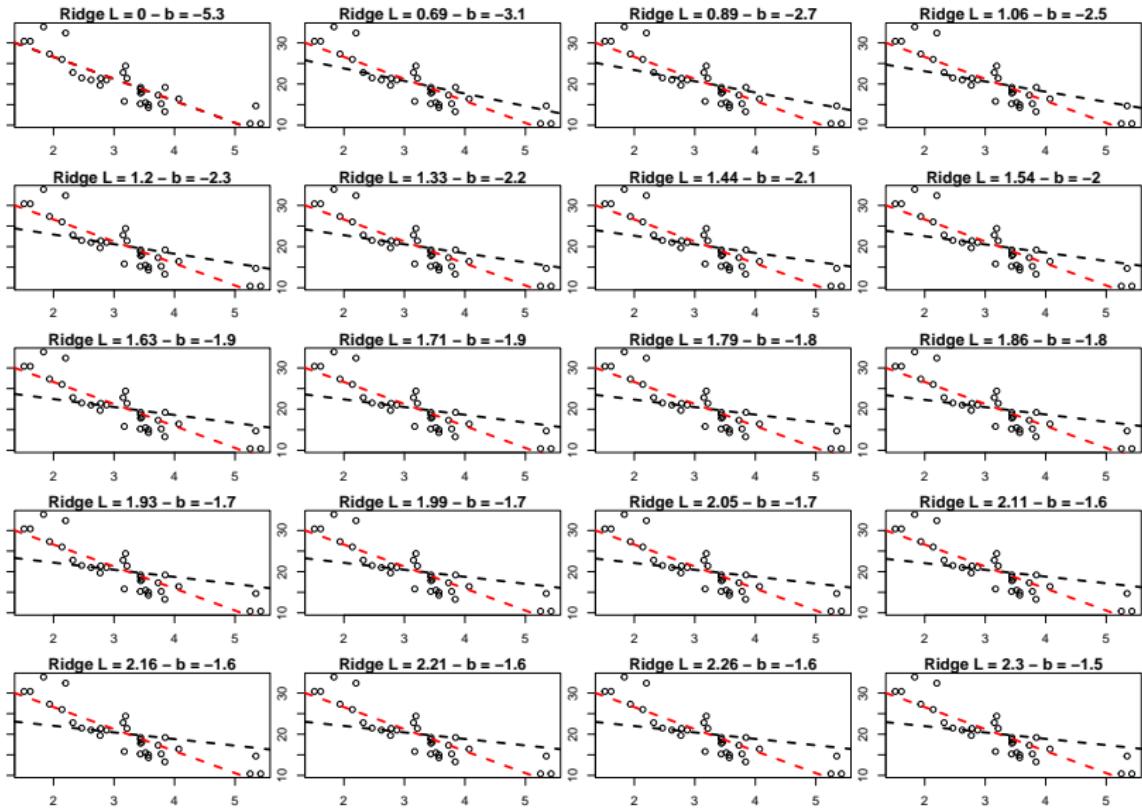
A  $\sqrt{\sum_j x_j^2} = |x|_2$  se le llama la norma  $l^2$  (minúscula) del vector  $x$ . A  $\sqrt{\sum_j |x_j|} = |x|_1$  la norma  $l^1$  de  $x$ .

```
lambda_val = c(0,log(seq(2,4,length.out = 19)))
lm_cars   = lm(mpg~wt,data=mtcars)
X         = cbind(rep(1,nrow(mtcars)),mtcars$wt)
y         = mtcars$mpg

ridge <- function(beta,X,y,lambda = 0) {
  beta_pen = beta[2:length(beta)]
  crossprod(y - X %*% beta) + lambda * length(y) * crossprod(beta_pen)
}

old_mai = par()$mai
par(mfrow=c(5,4), mai = c(0.35, 0.15, 0.15, 0.15))
for(i in 1:length(lambda_val)){
  result_ridge = optim(rep(0, ncol(X)),
                        ridge,
                        X = X,
                        y = y,
                        lambda = lambda_val[i],
                        method = 'BFGS')
  plot(mtcars$wt,
        mtcars$mpg,
        main = paste0("Lambda = ", round(lambda_val[i],2)," - m = ", round(result_ridge$par[2],2)))
  abline(a=result_ridge$par[1],b=result_ridge$par[2],lty=2,lwd=2)
  abline(lm_cars,col='red',lty=2,lwd=2)
}

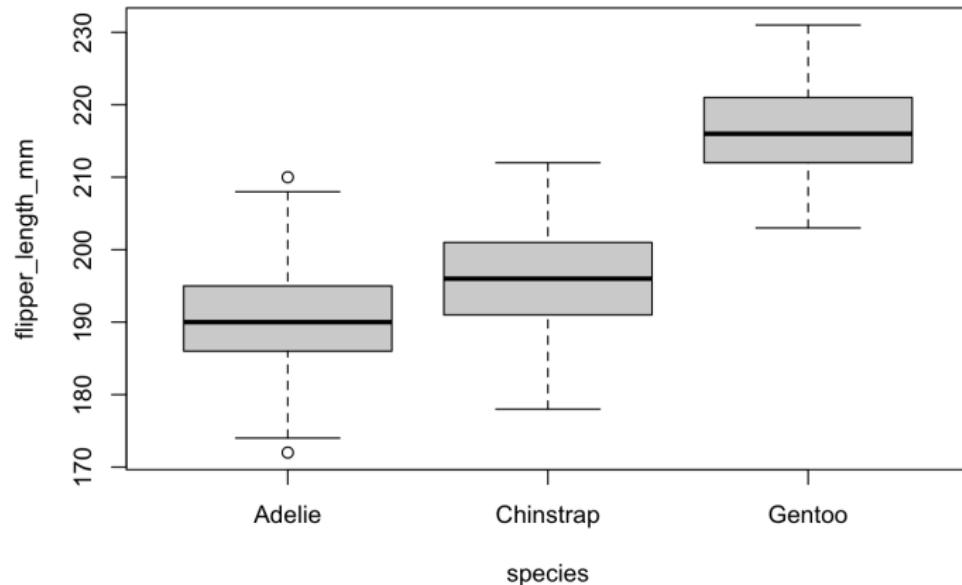
par(mfrow=c(1,1),mai = old_mai)
```



- A medida que  $\lambda$  aumenta, el efecto del peso del vehículo en las millas recorridas por galón disminuye (la pendiente, en valor absoluto, disminuye), hasta el punto que llega a cero aproximadamente.
- La predicción de las millas recorridas por galón se ve cada vez menos afectada por el peso del vehículo.

Esto es importante, pues al reducir el efecto de la covariable en la variable respuesta, se mitiga un posible sobreajuste a los datos.

- ¿Cómo se penalizan los coeficientes cuando contamos con variables cualitativas? ¿Tiene sentido pensar en un ANOVA ridge?



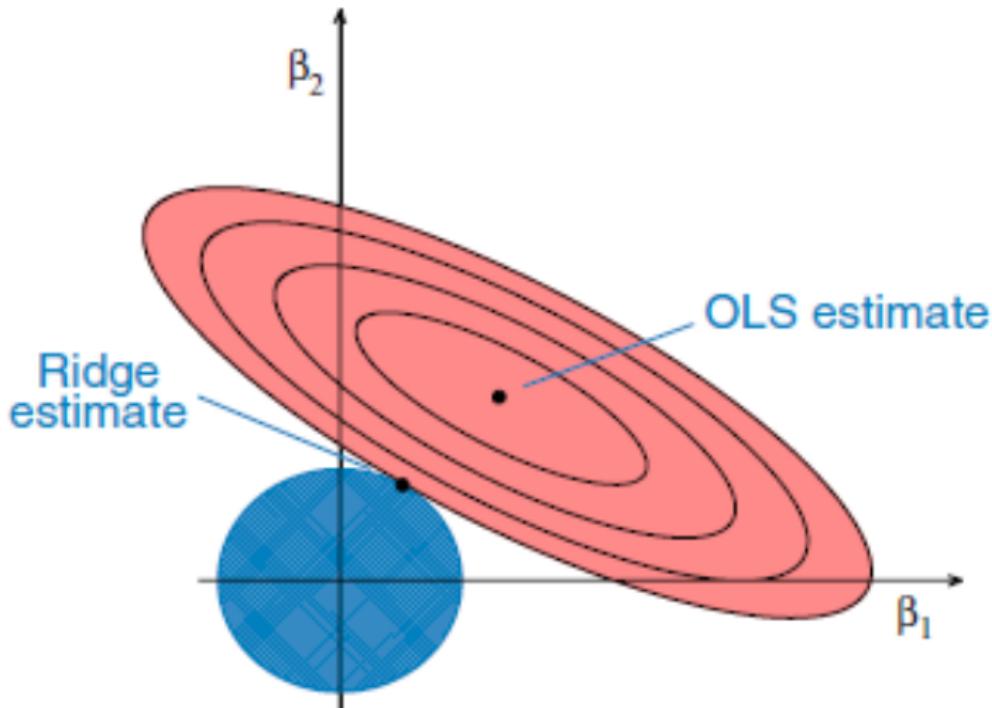
La estimación ridge dada mediante la minimización de  $SC_{E_R}$  dada por:

$$\hat{\beta}_R = \operatorname{argmin}_{\beta} \{SC_{E_R}(\beta)\} = \operatorname{argmin}_{\beta} \left\{ \sum_i (y_i - \hat{y})^2 + \lambda \sum_j \beta_j^2 \right\}$$

Puede verse de manera equivalente como una optimización con restricción (note la generalización de Lagrange con desigualdad):

$$\hat{\beta}_R = \operatorname{argmin}_{\beta} \left\{ \sum_i (y_i - \hat{y})^2 \right\} \text{ restr. } \sum_j \beta_j^2 \leq t$$

Hay una correspondencia 1-1 entre  $\lambda$  y  $t$ . Esta representación del problema ridge con restricción permite una representación geométrica del problema de minimización de  $SC_E$  para  $p = 2$ .



Bajo el modelo de regresión lineal  $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p$ , con  $X$  igual a la matriz diseño y  $y$  el vector de respuestas, se tiene que:

- Estimador sesgado de  $\beta$  es  $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}Xy$ .
- Estimador insesgado de  $\beta$  con sesgo ridge es  $\hat{\beta}_R = (X'X + \lambda I)^{-1}Xy$ .
- De manera Bayesiana  $\beta_i \sim N(0, \sigma^2/\lambda)$ , a medida que  $\lambda$  aumenta, penalizamos la varianza de  $\beta$ , que con valor esperado 0, tiende a 0.  
 $E(\beta|(y, \lambda)) = \hat{\beta}_R$ .

```
library('glmnet')
lambda_val = sort(c(0,log(seq(2,10,length.out = 9))),decreasing = TRUE)

x1 <- mtcars$wt
x2 <- mtcars$disp
y <- mtcars$mpg

fit_ols <- lm(y ~ x1 + x2)
fit_ridge <- glmnet(cbind(x1,x2),y,alpha=0,lambda=lambda_val)

round(fit_ols$coefficients,2)

## (Intercept)          x1          x2
##      34.96       -3.35       -0.02
round(coef(fit_ridge),2)

## 3 x 10 sparse Matrix of class "dgCMatrix"

##
## (Intercept) 31.96 32.06 32.17 32.30 32.45 32.64 32.89 33.22 33.75 34.95
## x1         -2.45 -2.47 -2.49 -2.52 -2.56 -2.61 -2.67 -2.76 -2.91 -3.35
## x2         -0.02 -0.02 -0.02 -0.02 -0.02 -0.02 -0.02 -0.02 -0.02 -0.02
```

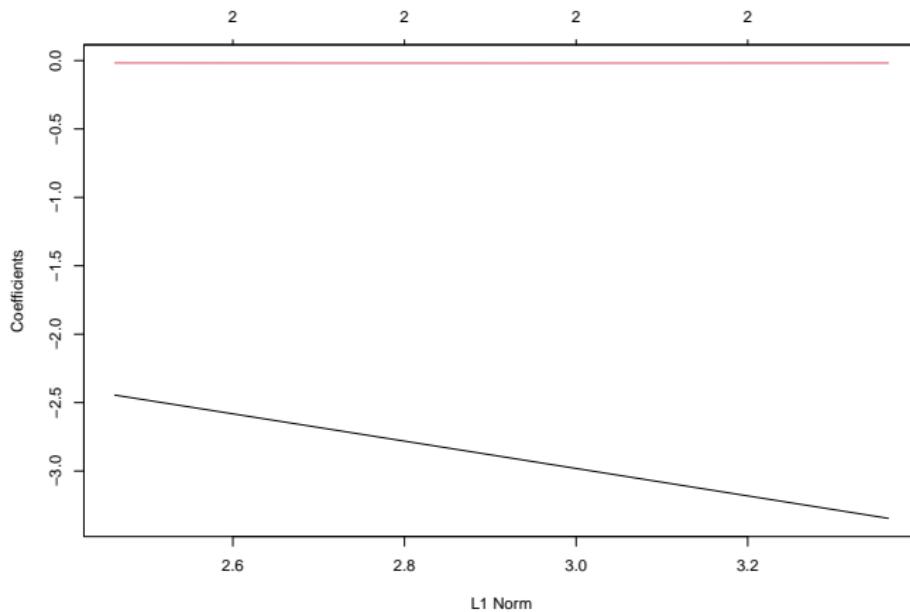
## Estimación para un valor determinado de $\lambda$

```
coef(fit_ridge, s=0)
```

```
## 3 x 1 sparse Matrix of class "dgCMatrix"
##                               s1
## (Intercept) 34.95294813
## x1          -3.34607109
## x2          -0.01775807
```

Hay una diferencia sutile con MCO (mínimos cuadrados ordinarios), dado el algoritmo de estimación implementado en `glmnet` (coordinado descendente).

## Y gráficas de las trazas en función de $\lambda$



No siempre se tienen suficientes UE para la regresión tradicional (por ejemplo: modelos de cáncer en líneas celulares). Una de las grandes ventajas de la regresión ridge es que no requiere mas datos que parámetros en la recta para ser estimado. En RLS y RLM, se necesita  $n \geq p$  para estimar los parámetros de la ecuación. Piense para la regresión tradicional:

- $n = 1$  y  $p = 2$ .
- $n = 2$  y  $p = 2$ .
- $n = 2$  y  $p = 3$ .
- $n = 3$  y  $p = 3$ .
- $n = p$  y  $p = p$ .

Para la regresión ridge con  $n \leq p$ , los puntos no requieren “caer” en el espacio estimado. Basta que minimicen el error en un conjunto de datos de prueba.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Regresión lasso

Es una alternativa al problema de alta varianza en los parámetros de la estimación por mínimos cuadrados. También introduce un sesgo en la estimación, como la regresión ridge, pero penaliza los parámetros de manera diferente:

$$\hat{\beta}_L = \operatorname{argmin}_{\beta} \{SC_{E_L}(\beta)\} = \operatorname{argmin}_{\beta} \left\{ \sum_i (y_i - \hat{y})^2 + \lambda \sum_j |\beta_j| \right\}$$

Puede verse de manera equivalente como una optimización con restricción (note la generalización de Lagrange con desigualdad):

$$\hat{\beta}_L = \operatorname{argmin}_{\beta} \left\{ \sum_i (y_i - \hat{y})^2 \right\} \text{ restr. } \sum_j |\beta_j| \leq t$$

Nuevamente hay una correspondencia 1-1 entre  $\lambda$  y  $t$ . Esta representación del problema lasso con restricción permite una representación geométrica del problema de minimización de  $SC_E$  para  $p = 2$ .

La única diferencia con la regresión ridge es que la restricción tiene forma de diamante.

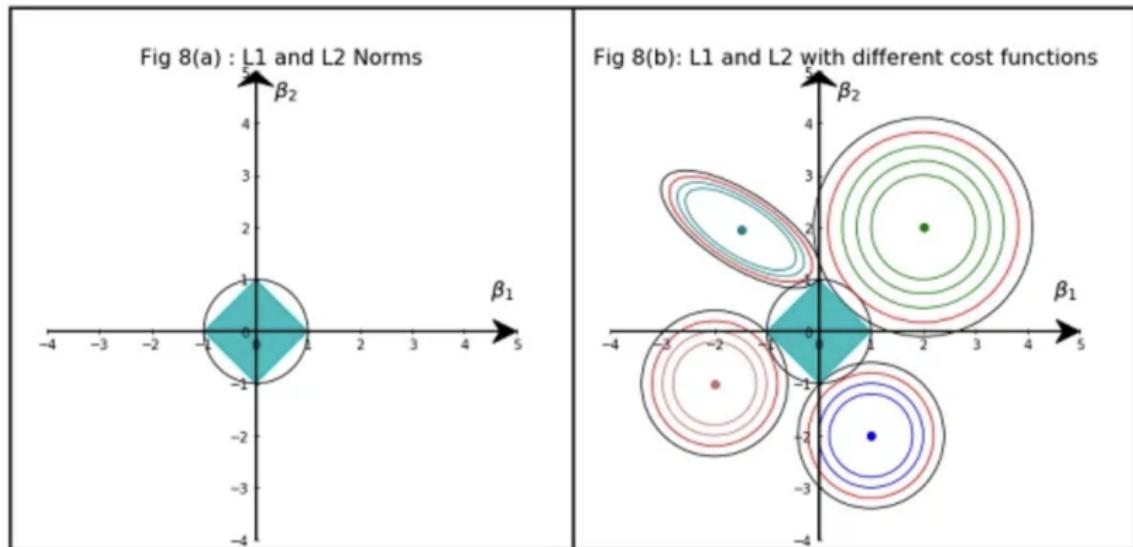
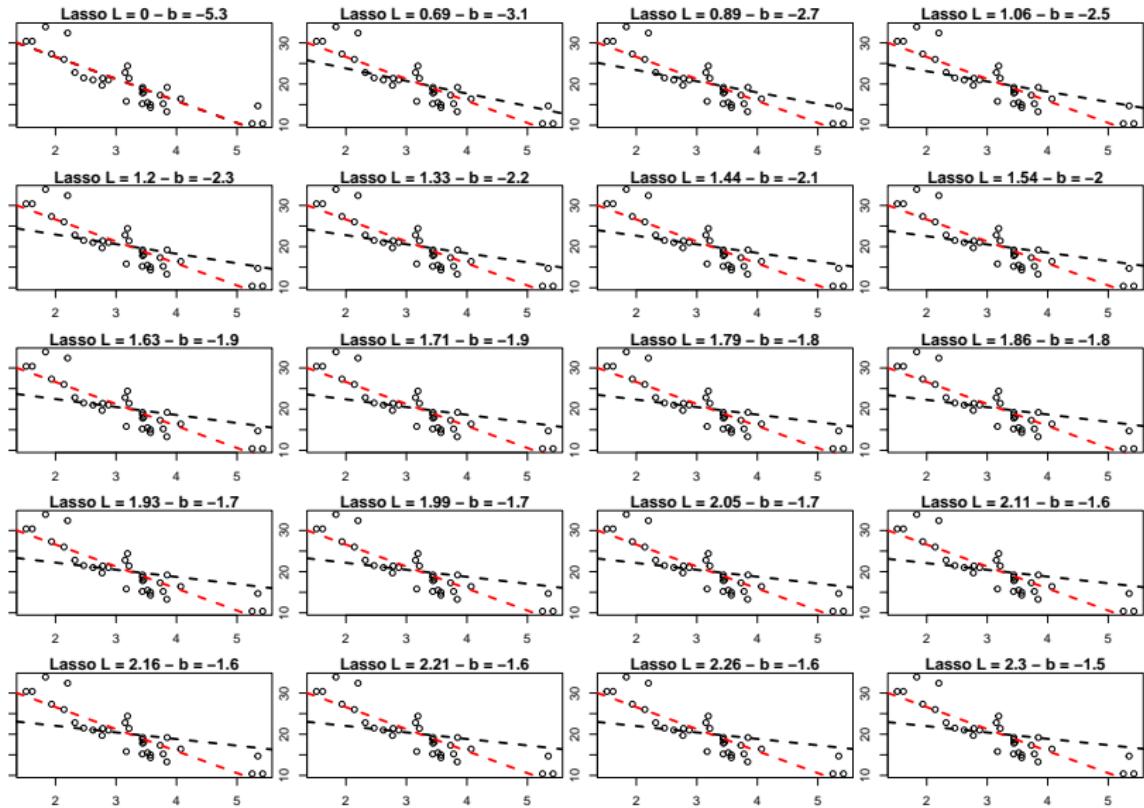


Figure 1: Funciones de costo lasso y ridge



## En resumen:

- Ambos procedimientos hacen que la predicción de  $Y$  sea menos sensible a las covariabes  $X_1, \dots, X_p$
- Lasso lleva las pendientes a 0, mientras que ridge las lleva asintóticamente a 0. Esto permite selección de variables que bajo el modelo de RLS/RLM son poco importantes, pero sus coeficientes son diferentes a cero. Esto es muy útil cuando se esperan covariables que por azar inflan el  $R^2$  de RLS/RLM.
- Ridge nunca lleva las pendientes a 0, por lo cual es útil en el escenario en el que se considera que todas las variables son mas o menos informativas.

Análisis  
Avanzado  
de Datos

Nicolás  
López

Introducción  
a la clase

Principios  
de R

Estadística  
introducto-  
ria

Aprendizaje  
estadístico

RLS

Inestabilidad  
en la  
Estimación:  
Multicolinealidad y  
Complejidad

Regresión  
ridge

Regresión  
lasso

Extensiones  
del método

## Extensiones del método

## Extensiones del método

- Regresión Elastic Net.
- Grouped Lasso.
- Reducción de dimensionalidad penalizada: NMF.