Regresión: Modelos Estadísticos

Conjunto de Datos: Cheddar Faraway

true true true true

25/03/2022

Abstract

Hemos analizado con las herramientas proporcionadas en el curso de Modelos Estadísticos el conjunto de datos, *Cheddar*, distribuido en la librería Faraway de R. Para ello hemos utilizado diversas técnicas de regresión lineal y no lineal.

1 Introducción

En un estudio de queso Cheddar realizado en el Valle de Latrobe (Victoria, Australia), se estudiaron muestras de queso en las que se analizó su composición química y fueron dadas a probar a distintos sujetos para que valoraran su sabor. Los valores asignados a cada queso son el resultado de combinar las distintas valoraciones.

El DataFrame **cheddar** de la librería **faraway** consiste de 30 muestras de queso Cheddar en las que se ha medido el sabor (taste) y las concentraciones de ácido acético (Acetic), ácido sulfhídrico (H2S) y lactosa (Lactic).

Tenenemos un conjunto de datos en el que se recogen observaciones de una cata de quesos, nuestras variables son:

- · Taste: una valoración subjetiva de los jueces.
- · Acetic: la concentración de ácido acético en un queso de terminado en esca la logarítmica
- · H2S: la concentración de sulfito de hidrógeno en escala logarítmica.
- · Lactic: Concentración de ácido láctico

A lo largo del documento hacemos uso de las siguientes librerias de R:

Vamos a utilizar el dataset Cheddar. Cargamos los datos y enseñamos las primeras observaciones.

Si en nuestro dataset tuviesemos entradas vacías (NA), tenemos varias posibilidades para lidiar con este problema:

- No utilizar/Eliminar las observación que contienen valores.
- No utilizar/Eliminar las variables que contienen las entradas vacías.
- Intentar completar los valores. Existen métodos menos y más sofisitcados:
 - Remplezar con la **media**, **media** o **moda**.
 - Crear una **nueva categoría** para valores vacíos.
 - Utilizar algún modelo de **regresión**.
 - Usar un modelo de K-Nearest Neighbors (KNN).

A continuación, comprobamos que no hay entradas vacías,

[1] FALSE

Toas las variables son numéricas (**cuantitativas**). No hay que transformar las variables no cuantitativas (**cualitativas**), conviertiendolas en variables binarias. Para ello, podríamos deberíamos hacer encoding a variables binarias, el lenguage de programación R nos permite utilizar *as.numeric*.

Con estas variables vamos a intentar **explicar** cómo los valores observados de una variable Y (taste) dependen de los valores de otras variables (Acetic, H2S, Latcic), a través de una relación funcional del tipo Y = f(X) También vamos a intentar **predecir** el valor de la variable Y para valores no observados de las variables X.

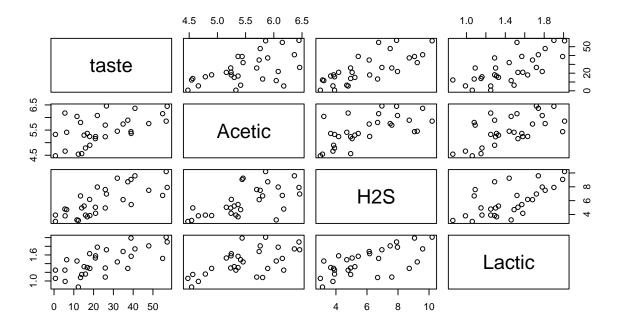
Usamos el número de observaciones para determinar los conjuntos de train y test.

Tenemos 30 observaciones en nuestro dataset. Ahora procedemos a divirlo en el conjunto de train y test. El primero lo utilizaremos para entrenar nuestros modelos y el segundo lo usamos para cuantificar el error de los modelos.

Ahora nos hacemos las siguientes preguntas: ¿Podemos suponer que la distribución de las variables es normal?,¿Tenemos alguna en la que falten datos?, ¿Tenemos outliers?, etc. En las siguientes secciones trataremos de responder a estas preguntas y muchas otras acercar de nuestro conjunto de datos.

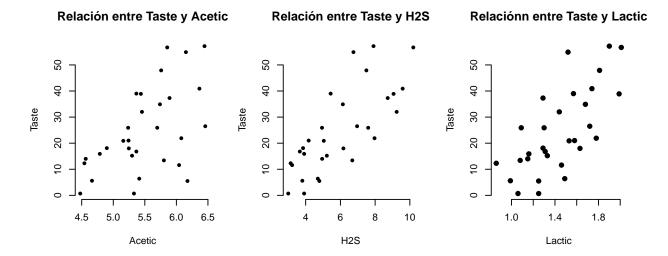
Para asegurar que sea reproducible utilizamos una semilla, que permite fijar los valores pseudoaleatorios obtenidos en muchas de las funciones utilizadas.

Hacemos un pequeño estudio preliminar de nuestras variables. Mostramos un scatter plot de las cada variable contrastada con el resto. Esto permite ver a ojo si algún par de variables tiene correlación.



Ahora, utilizamos la funcón summary de R, la cual nos permite estimar algunos de las características de la distribución del dataset. La siguiente tabla nos muestra los estadísticos más comunes: el mínimo, máximo, mediana, media y el 1er y 3er cuartil.

Ploteamos las gráficas de dispersion entre la variable respuesta taste y las variables predictoras Acetic, H2S, Lactic.



Podemos observar que la que aperentemente guarda una menor relación lineal con taste es la variable Acetic, esto será comprobado con distintos tests

2 Estudio y evaluación del modelo completo.

Simplificamos nuestra notación para las variables. Intentaremos predecir la variable taste usando el resto de variables. Para empezar, definimos el modelo completo, el cual se usan todas las variables para nuestro modelo lineal múltiple.

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_{p-1} x_{i(p-1)} + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

donde Y_i es el valor de la variable respuesta para el individuo i-ésimo,

 β_0 y los β_j son los par'ametros j = 1, ..., p - 1,

 x_{ij} son los elementos de la matriz de las variables explicativas

 ϵ_i es el término del error aleatorio que suponemos que se distribuye como una $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, donde σ^2 es la varianza que suele ser desconocida.

2.1 Resolución mediante matrices

Utilizamos el método de mínimos cuadrados que estima los valores $\hat{\beta}$ intentando minimizar los errores ϵ . Como hemos visto en clase, la fórmula que se deduce es:

$$\hat{\beta} = (X^t X)^{-1} X^t Y$$

donde X es una columna de 1's concatenada con las variables que usamos para predecir. Es importante clarificar que en este proceso solo usamos el training set.

Por tanto, aproximamos las β modelo lineal completo con los valores de $\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_3$ con los siguientes valores:

$$\hat{\beta}_0 = -28.8767696, \quad \hat{\beta}_1 = 0.3277413, \quad \hat{\beta}_2 = 3.911841, \quad \hat{\beta}_3 = 19.6705434$$

2.2 Resolución usando librerias de R

Podemos utilizar la función lm, ya programada en R. Definimos el modelo completo:

 $taste \sim Acetic + H2S + Lactic, \ data = cheddar$

	Intercept	Acetic	H2S	Lactic
Coeficientes	-28.87677	0.3277413	3.911841	19.67054

Evidentemente los resultados son los mismos.

Estudiemos preliminarmente si es un modelo lineal adecuado, para ello comprobaremos las hipótesis estándar del modelo lineal de regresión usando el **test de normalidad Shapiro-Wilk**. La función shapiro.test le pasamos por parámetro el residuo/error de cada una de las muestras y nos devuelve un p-valor.

Observamos que estamos en la hipótesis de que el error nuestro modelo se distribuye de manera normal, ya que el p-valor es 0.8865 > 0.05.

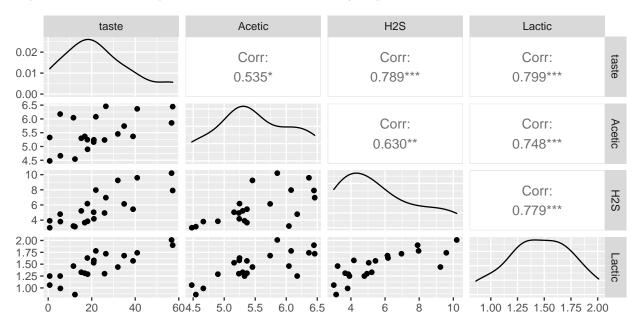
Ahora nos preguntamos si hay variables que tienen un mayor impacto en el modelo. Estas variables podrían ser *outliers* y podríamos deshecharlas del training set ya que podrían estar perjudicando la predicción del modelo negativamente.

Obervamos el p-valor de Acetic en el resumen del modelo nos indica que con casi toda seguridad Acetic no tiene impacto real en el modelo (>0.94)

Los p-valores son lo suficientemente bajos como para rechazar varianza constante

Una vez hemos concluido que aunque estamos en las hipótesis de regresión lineal el modelo completo a pesar de ser el más complejo probablemente da resultados similares a otro más simple.

2.2.0.1 Correlaciones y tabla de resultados con el estudio de sus p-valores Usamos el paquete *GGplot* de R, el cual nos permite visualizar la correlación y dispersión entre las distintas variables.



Ahora utilizamos el anális **anova** (Analysis of Variance), para justificar si podemos eliminar alguna variable del modelo.

	Acetic	H2S	Lactic
p-valor	6.53 e-05	0.0001035	0.0310795

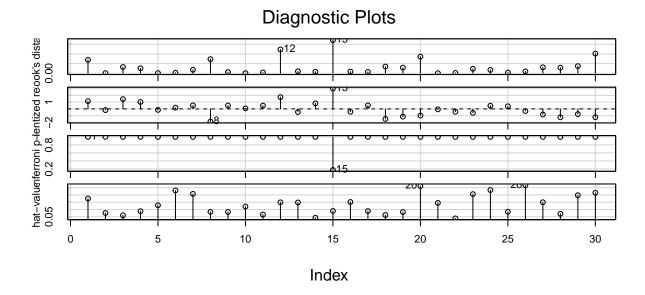
Todos nuestros p-valores son adecuados a un nivel $\alpha = 0.05$. En nuestro caso nos vale, sin embargo, la variable *Lactic* no lo cumpliría si disminuimos el nivel de α a una cota inferior como 0.01.

2.3 ¿Tiene outliers nuestra muestra?

Para comprobarlo basta realizar el test de Bonferroni sobre nuestro modelo completo:

Concluimos con un nivel $\alpha = 0.05$ que no tenemos ningún outlier en nuestra. Lo más cercano a un *outlier* que tenemos es la observación número 15, que tiene un valor **Bonferroni p** de 0.17453 (no se acerca a 0.05). Por tanto, no tenemos razones por las que eliminar alguna observación inusual de nuestro conjunto de datos.

Esto se puede comprobar graficamente a través del siguiente gráfico, el cual mide la influencia de cada observación sobre cada una de las betas de nuestro modelo.



Vemos que la que más influye es la antes mencionada obsercación 15 y por tanto es posible que en el resto de modelos que estudiemos con más detalles salga de la muestra como observación influyente, si está en el conjunto train

3 ¿Cuál es el mejor modelo?

Como dice el **Principio de la Navaja de Ockham**, a menudo la explicación más simple es la correcta. Queremos seleccionar predictores que explican los datos de la manera más simple posible, sin disminuir la calidad de las predicciones mucho.

3.0.1 Separación del dataset en conjuntos de entrenamiento y test (70-30%)

Hemos escogido distintas semillas para estar en condiciones de realizar un estudio más amplio, en la elección de las mismas se ha intentado evitar aquellas que generaban muestras demasiado similares. Las semillas usadas son 1, 1100 y 5 posteriormente se introducirán dos más.

Consideremos los conjuntos de entrenamiento resultantes de las semillas: train.1 (semilla 1), train.2 (semilla 1100), train.3 (semilla 5)

3.0.2 Método Backward

Partimos del modelo completo estudiado en la sección anterior y aplicamos con $\alpha=0.05$, el metodo de Backward, que consiste en eliminar la variable que *menos influya* a la predicción. Primero realizamos una iteración explícita del método, posteriormente se construyen a través de la libreria *mixlm* de R.

	Acetic	H2S	Lactic
p-valor	6.53e-05	0.0001035	0.0310795

Eliminamos Acetic del modelo debido que su p-valor es > 0.05.

	H2S	Lactic
p-valor	0.0017429	0.0188499

Repetimos el proceso con la variable H2S, ya que tiene un p-valor mayor que $\alpha=0.05$

1	Lactic
p-valor	1.4e-05

El p-valor es menor que $\alpha = 0.05$, por lo que hemos concluido, ya que no tenemos suficiente certeza para poder eliminar otra variable. Por tanto, tenemos como resultado que la variable que mejor explica el *taste* es *Lactic*. Modelo resultante: **taste** ~ **Lactic**, **data** = **cheddar**[**train.1**,].

Por otro lado los modelos backward resultantes por mixlm son:

 $taste \sim H2S + Lactic, data = cheddar[train.2,]$ y por otro lado $taste \sim H2S + Lactic, data = cheddar[train.3,].$

3.0.3 Método Forward

El método Forward consiste en empezar con un modelo de una variable y vamos añadiendo las que más influyan, desarrollaremos el primer modelo de forma explícita y el resto los generaremos con *mixlm*. De esta manera tenemos:

	Acetic	H2S	Lactic
p-valor	0.0125179	2.12e-05	1.39e-05

Actualizamos añadiendo Lactic por tener el menor p-valor.

	Acetic	H2S
p-valor	0.5039877	0.0512171

Con nivel de significación $\alpha = 0.05$ este sería nuestro modelo final. Modelo resultante = taste ~ Lactic, data = cheddar[train.1,]

Por otro lado los modelos forward resultantes por *mixlm* son:

 $taste \sim H2S + Lactic, data = cheddar[train.2,]$ y por otro lado $taste \sim H2S + Lactic, data = cheddar[train.3,].$

3.1 Construcción por criterios

En esta subsección trataremos de encontrar un candidato a mejor modelo, construyendo nuestros modelos usando distintos enfoques. Tras aplicar los siguientes criterios a la hora del desarrollo de modelos: R^2 ajustado, Cp de Mallows, Criterio de Informacion de Bayes (BIC), Criterio de Informacion de Akaike (AIC) (los desarrolos se pueden encontrar en el script), llegamos a las siguientes conclusiones:

solo aparece un modelo nuevo usando el criterio del estadístico R^2 , taste ~ H2S + Lactic, data = cheddar[train.1,].

Notamos que la combinación de H2S + L aparece en todos nuestros conjuntos de entrenamiento en algón momento, es candidata a ser nuestra mejor elección.

Comparamos los modelos obtenidos hasta ahora en su respectiva muestra de entrenamiento con el modelo completo en ese conjunto de entrenamiento.

Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
19	1853.543	NA	NA	NA	NA
17	1410.701	2	442.8415	2.668285	0.0982145

	train1: L vs	train1: H2S + L vs	train2: H2S + L vs	train1: H2S+ L vs
	Completo	Completo	Completo	Completo
p- valor	0.0982145	0.3362689	0.9551123	0.5551292

Con un estos p-valores podemos decir que con un nivel de significación α ningún modelo es notablemente diferente de su contraparte salvo en el caso de los modelos resultantes en train2 esto puede ser por la cantidad de observaciones influyentes presentes en la muestra, lo trataremos en la siuigente sección.

4 Diagnostico: Comprobaciones de hipotesis, outliers y observaciones influyentes

En esta sección estudiaremos si nuestros modelos cumplen las condiciones necesarias de un modelo de regresión lineal.

Nuestro enfoque consistirá en un analisis gráfico, acompañado de tests estadísticos en los casos en los que se aprecie una discrepancia notable.

4.1 ¿Son nuestros *modelos*, modelos de regresión lineal?: Comprobación de hipótesis.

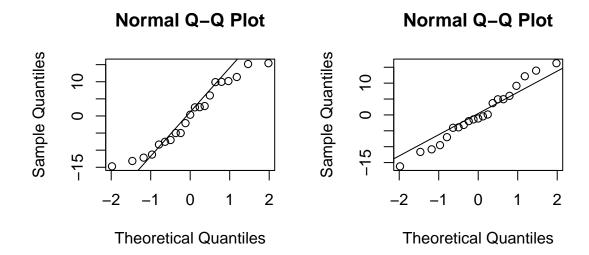
En la sección 3 se toma un enfoque $na\"{i}ve$ a la hora de construir los modelos, ya que no hemos estudiado si hay observaciones influyentes, podríamos tener una muestra que no es la adecuada para el estudio de nuestros datos.

Un modelo de regresión lineal debe satisfacer las siguientes hipótesis con nivel de siginificación α adecuado:

- 1. Los errores ϵ_i tienen distribución normal.
- 2. Los errores ϵ_i tienen media cero.
- 3. Los errores ϵ_i tienen varianza constante.
- 4. Los errores ϵ_i no están correlacionados.

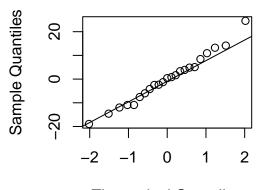
	train1: L	train1: H2S + L	train2: H2S + L	train3: H2S + L	Nivel de siginificación	Test utilizado
Linealidad	0.14	0.609	0.812	0.816	0.05	Resettest
Normalidad	0.255	0.933	0.982	0.452	0.05	Test Shapiro Wilk
Media = 0	1	1	1	1	0.05	t-test
Varianza constante	0.63	0.438	0.392	0.483	0.05	Test ncv
Correlación	0.608	0.508	0.924	0.958	0.05	Test de Durbin-Watson

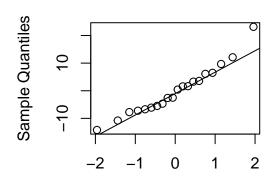
Podemos observar que se verifican a nivel de significación $\alpha=0.05$ se verifican todas las hopótesis de modelo de regresión lineal. En las siguientes gráficas podemos obsrevar como los residuos de los modelos **taste** \sim **H2S** + **L** de los conjuntos train2 y train3 se comportan mejor que cualquiera de los modelos propuestos en la muestra train1



Normal Q-Q Plot

Normal Q-Q Plot





Theoretical Quantiles

Theoretical Quantiles

4.2 Estudio de outliers

A fin de obtener distintos puntos de vista utilizaremos dos métodos, un valor de Bonferroni en un estadístico $t_{1-\frac{\alpha}{2n};n-p-1}$ y la función *outlierTest* que utiliza p-valores de Bonferroni obtenidos a través de t-tests.

En los cuatro modelos y bajo los dos criterios no se obtiene ninguna observación que se pueda aceptar como outlier a nivel de significación $\alpha=0.05$

4.3 Estudio de observaciones Influyentes

Al igual que en la anterior sección a fin de poder encontrar el criterio que mejor se ajuste a nuestro modelo, en el que hay que tener en cuenta que es una muestra de tamaño reducido, utilizaremos tres criterios, además de distintas técnicas gráficas. Los criterios usados serán:

1. Criterio 1: valores leverage (hii) mayores que $\frac{2p}{n}$.

2. Criterio 2: valores |DFFITS| son mayores que $2 \cdot \sqrt{\frac{2p}{n}}$.

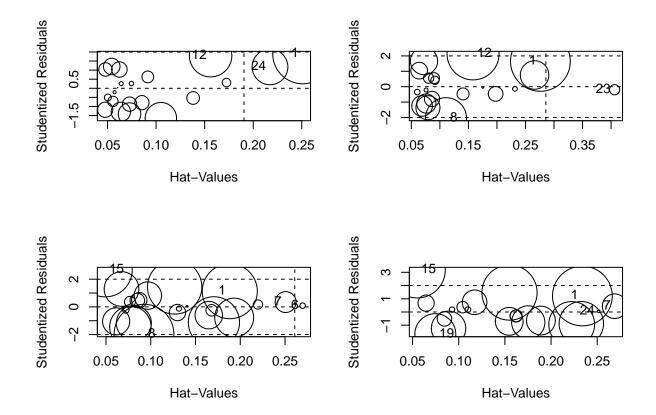
3. Criterio 3: valores |
DFBETAS| mayores que $2\cdot\sqrt{\frac{2p}{n}}.$

4. Criterio 4: InfluencePlot.

En la siguiente tabla observamos las observaciones influyebtes obtenidas por cada criterio.

	Criterio 1	Criterio 2	Criterio 3
train1: L	1,5,16,23,24,26	1,12,24	1,3,5,8,9,12,13,14,16,19,23,24,27,28,30
train1: $H2S + L$	23	12	COMPLETAR
train2: $H2S + L$	6	COMPLETAR	COMPLETAR
$\frac{\text{train3: H2S} + L}{\text{train3: H2S}}$	COMPLETAR	COMPLETAR	COMPLETAR

Evidentemente el criterio 3 no es adecuado para nuestra muestra, la muestra resultante sería demasiado pequeña para ser apta para la regresión lineal. Tomaremos como criterio para eliminar de la muestra aquellas observaciones que hayan sido marcadas como influyentes en al menos dos criterios de influyentes.



Estas observaciones también serán usadas a la hora de decidir las que consideramos influyentes.

Realizamos un estudio de la colinealidad. Se observa que el modelo $taste \sim Lactic$, data=cheddar[train.1,] solo tiene un predictor luego no hay presente ningún tipo colinealidad

	H2S	Lactic
train1: L	Solo tiene un predictor	Solo tiene un predictor
train1: $H2S + L$	2.54626778688363	2.54626778688363
train2: $H2S + L$	1.79449729956943	1.79449729956943
train3: $H2S + L$	1.73307700400943	1.73307700400943

Nuestros valores son muy buenos, entendiendo por bueno VIF < 10, por lo tanto no tenenemos que preocuparnos de una colinealidad grave entre las variables.

Estamos en condiciones de considerar como influyentes las siguientes observaciones:

	Observaciones influyentes
train1: L	1,12
train1: $H2S + L$	1,12,23
train2: $H2S + L$	2,6
train3: $H2S + L$	No se repite ninguno

Un detalle interesante es que la observación número 15, que a priori iba a ser la observación influyente por excelencia, acaba siendo descartada de serlo por el criterio.

Y ahora comparamos los modelos con las muestras de entrenamiento sin eliminar influyentes y con las muestras modificadas.

4.3.1 taste ~ + Lactic, data = cheddar[train.1,] vs taste ~ Lactic, data = cheddar[train.1inf,]

train1: L	train1: L, sin influyentes	Test utilizado
0.14	0.558	Resettest
0.255	0.933	Test Shapiro Wilk
1	1	t-test
0.63	0.357	Test ncv
0.562	0.664	Test de Durbin-Watson
	0.14 0.255 1 0.63	0.255 0.933 1 1 0.63 0.357

Nuestras hipótesis del modelo lineal se ven notablemente mejoradas, tenemos una distribución más parecida a una normal, mejor distribuida en torno a una lineal.

Realizamos un pequeño intercambio en el que nuestra varianza parece menos constante pero se mantiene por encima de todos los niveles de significación habituales.

Tomamos la decisión de actualizar cheddar[train.1,] con cheddar[traininf.1,], que es la versión sin observaciones influyentes. ### taste ~ H2S + Lactic, data = cheddar[train.1,] vs taste ~ H2S + Lactic, data = cheddar[train.1critinf,]

	train1: $H2S + L$	train1: $H2S + L$, sin influyentes	Test utilizado
Linealidad	0.609	0.358	Resettest
Normalidad	0.933	1	Test Shapiro Wilk
Media = 0	1	1	t-test
Varianza constante	0.439	0.376	Test ncv
Correlación	0.476	0.772	Test de Durbin-Watson

Este es un caso un tanto particular, tenemos unos datos perfectamente distribuidos, pero ya lo estaban antes practicamente. A cambio de eso perdemos un cierto grado de linealidad que hay que tener en cuenta, en este caso no hay una diferencia tan notable con el modelo como en que solo incorporaba a Lactic.

Tomamos la decisión de actualizar *cheddar[train.1,]* con *cheddar[train.1critinf,]*, que es la versión sin observaciones influyentes.

4.3.2 taste \sim H2S + Lactic, data = cheddar[train.2,] vs taste \sim H2S + Lactic, data = cheddar[train.2inf,]

	train2: $H2S + L$	train2: $H2S + L$, sin influyentes	Test utilizado
Linealidad	0.812	0.83	Resettest
Normalidad	0.982	0.984	Test Shapiro Wilk
Media = 0	1	1	t-test
Varianza constante	0.392	0.419	Test ncv
Correlación	0.928	0.966	Test de Durbin-Watson

En cierta manera es notable que al eliminar nuestras influyentes y en un dataset tan pequeño no genere a penas diferencia, en todo caso nos mejora todas las hipótesis del modelo lineal, se puede afirmar que es un modelo mejor para trabajar sobre el a priori.

Tomamos la decisión de actualizar cheddar[train.2,] con cheddar[traininf.2,], que es la versión sin observaciones influyentes.

4.3.3 taste $\sim H2S + Lactic$, data = cheddar[train.3,]

En este modelo, bajo el criterio de elección de observaciones influyentes que elegimos para tratar nuestros datos, este modelo no presentaba ninguna observación influyente, por lo que se mantiene como está.

5 Errores de Test. Comparación de Modelos

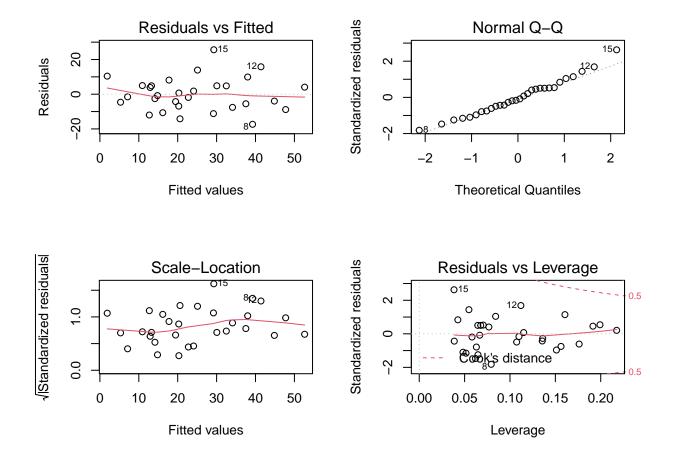
```
# INTRODUCIR SECCION 5
# COMPLETAR TABLA OUTLIERS
# CREO QUE TENIA QUE PONER HOMOEST ARRIBA
# JUSTO EN EL SUMMARY DE LA SECCION 6 CREO QUE EL DATA NO DEBERIA SER CHEDDAR
```

6 Conclusión: presentación del modelo final

Finalmente por comparación de los errores sabemos que el modelo final que presenatmos es: taste \sim H2S + Lactic , que tiene sentido ya que Acetic no era significativa y que en la construcción de modelos salieron en todos los criterios salvo en uno este modelo.

term	estimate	std.error	statistic	p.value
(Intercept)	-27.591815	8.981825	0	0.0048129
H2S	3.946267	1.135692		0.0017429
Lactic	19.887204	7.959009		0.0188499

A su vez enseñamos los graficos de este modelo:



Ahora vamos a asegurarnos que verifica las hipótesis para una regresión lineal y nos aseguramos con outlierTest que no tenemos outliers. Y además de hacer una hipótesis de la media de los errores y ver que su varianza es constante, calculamos dicha varianza.

p-	p-	p-Media	p-	Valor de	p-	p-
Outliers	Normalidad	nula	Homocedasticidad	varianza	Autocorrelación	Linealidad
model.y 0.0060495	0.8106746	1	0.2770139	9.942362	0.222	0.9497967

Dicho esto procedemos a la presentación del modelo con sus betas asociados, que si bien se pueden recoger del summary, también se pueden calcular de forma matricial igual que se hizo con el modelo completo en su momento.

El resultado sería taste \sim -27.591815 +3.9946267 H2S +19.887204 Lactic Notese que sigue siendo acorde al modelo completo donde el β de Lactic es muy superior en comparación al de H2S.

Presentamos ahora R^2 y R^2_{adj} , estas si bien se pueden recoger directamente del summary, también las calculamos a partir de los errores y la tabla anova, dando el resultado de 0.6517024 y 0.6259025 respectivamente. Además presentamos el vector de p-valores

	Intercept	H2S	Lactic
Coeficientes	0.0048129	0.0017429	0.0188499

También presentamos intervalos para las betas de Bonferroni y Scheffé, así como sus elipsoides

	Bonferroni	Bonferroni	Scheffé	Scheffé
H2S	1.39408948776095	6.49844518328319	0.958193950963627	6.93434072008051
Lactic	2.00136600296324	37.7730429494495	-1.0534199984135	40.8278289508262
Porcentaje	5%	95%	5%	95%

Y finalmente buscamos una representación de la regresión que tenemos en 3 dimensiones ya que el modelo completo tenia tres variables y vemos el plano de regresión, marcando en rojo las observaciones que peor se ajustan.

