# IECD-325: Modelos lineales y diseños de experimentos

Felipe Osorio

felipe.osorio@uv.cl

#### Información

#### Horario:

Clases: MA 08:30-10:00 hrs Sala 3, MI 08:30-10:00 hrs Lab. Computación, JU 12:00-13:30 y 14:30-16:00 hrs Sala 3.

#### Contacto:

E-mail: felipe.osorio@uv.cl.

Web: https://github.com/faosorios/Curso-Regresion y AULA

#### Evaluación:

Se realizará 3 Pruebas: 4-Sep, 30-Oct, 4-Dic. Exámen: 11-Dic.

#### Criterio de aprobación

#### Criterio de aprobación:

Considere NP como la nota de presentación, a saber:

$$NP = 0.25 \cdot P_1 + 0.25 \cdot P_2 + 0.25 \cdot P_3 + T_*,$$

donde  $P_1$ ,  $P_2$  y  $P_3$  representan las notas en las pruebas 1, 2 y 3, mientras que  $T_*$  representa el promedio ponderado de tareas, es decir:

$$T_* = 0.08 \cdot T_1 + 0.08 \cdot T_2 + 0.09 \cdot T_3.$$

Aquellos estudiantes que obtengan NP mayor o igual a 50, aprobarán la asignatura con nota final, NF=NP.

#### Criterio para rendir el Exámen:

En caso contrario, los estudiantes podrán rendir el Examen. En cuyo caso, la nota final es calculada como sigue:

$$NF = 0.7 \cdot NP + 0.3 \cdot Examen.$$

## Reglas adicionales

- Se llevará un control de asistencia.
- ▶ Se puede realizar preguntas sobre la materia en cualquier momento.
- Los alumnos deben apagar/silenciar su celular durante clases.
- Conversaciones sobre asuntos ajenos a la clase no serán tolerados. Otros estudiantes tiene derecho a asistir clases en silencio.
- Alumnos que lleguen tarde o se retiren deben hacerlo en silencio.
- Al enviar algún e-mail al profesor, identificar el código de la asignatura en el asunto (IECD325).
- E-mail será el canal de comunicación oficial entre el profesor y los estudiantes.

## Reglas: sobre los certámenes

- Todas las hojas necesarias para responder las pruebas serán entregadas por el profesor.
- Será permitido el uso de una calculadora científica simple (no del celular).
- Es derecho del estudiante conocer la pauta de corrección la que será publicada en la página web del curso.
- Use principalmente lapiz pasta (no utilice lapiz rojo).
- Pedidos de recorrección deben ser argumentados por escrito.
- Cualquier tipo de fraude en prueba (copia, uso de WhatsApp, suplantación, etc.) será sancionado.

#### Orientaciones de estudio

- Mantener la frecuencia de estudio de inicio a final del semestre. El ideal es estudiar el contenido luego de cada clase.
- Estudiar primeramente el contenido dado en clases, buscando apoyo en las referencias bibliográficas.
- Las referencias son fuentes de ejemplos y ejercicios. Resuelva una buena cantidad de ejercicios. No deje esto para la víspera de la prueba.
- Buscar las referencias bibliográficas al inicio del semestre, dando preferencia a las principales y complementarias.

## **Prerrequisitos**

- Los requisitos formales son:
  - ► IECD-312: Inferencia.
  - ► IECD-315: Distribución de formas cuadráticas.
- ▶ Se asume un conocimiento básico de los siguientes aspectos:
  - Variables aleatorias.
  - Convergencia de variables aleatorias.
  - Manipulación de matrices y vectores aleatorios.

# Programa del curso<sup>1</sup>

- 1. Modelos de regresión lineal simple.
- 2. Inferencia en el modelo de regresión lineal múltiple.
- 3. Análisis de los supuestos del modelo.
- 4. Alternativas a mínimos cuadrados.
- Modelos de diseños de experimentos.
- 6. Tópicos adicionales.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Este es un curso fundamental donde exploramos métodos para abordar la inferencia en modelos de regresión, no es un curso enfocado **solamente** en el análisis de datos.

## Bibliografía

Belsley, D.A., Kuh, E., Welsch, R.E. (1984).

Regression Diagnostics: Identifying Influential Data and Sources of Collinearity.

Wiley, New York.

Kutner, M.H., Nachtsheim, C.J., Neter, J., Li, W. (2005).
Applied Linear Statistical Models, 5th Ed.
McGraw-Hill, Boston.

Montgomery, D.C. (2004).

Diseño y Análisis de Experimentos, 2da Ed.

Limusa, México DF.

Seber, G.A.F., Lee, A.J. (2007).

Linear Regression Analysis, 2nd Ed.

Wiley, New York.

## Bibliografía adicional



Hocking, R. (2013).

Methods and Applications of Linear Models: Regression and the analysis of variance, 3rd Ed.

Wiley, New York.



Rencher, A.C., Schaalje, G.B. (2007).

Linear Models in Statistics, 2nd Ed.

Wiley, New York.



Sheather, S.J. (2009).

A Modern Approach to Regression with R.

Springer, New York.



Weisberg, S. (2013).

Applied Linear Regression, 4th Ed.

Wiley, New York.

## Objetivo del análisis de regresión

Estudiar una variable de respuesta, y [asuminda continua] como función de algunas variables explicativas o regresores,  $x_1, x_2, \ldots$  [pueden ser discretas y/o continuas].



En ocasiones la relación funcional es conocida salvo algunos coeficientes (parámetros).

Es decir, la relación es gobernada por un proceso físico o por leyes bien aceptadas

$$Y \approx f(x_1, \ldots, x_p; \boldsymbol{\theta}),$$

en cuyo caso, el interés recae en estimar el vector de parámetros  $\pmb{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_p)^{\top}$ .

#### Modelamiento estadístico

Asumiremos variables aleatorias independientes  $Y_1,\dots,Y_n$ , tal que

$$Y_i = \mu_i + \epsilon_i, \quad \mathsf{E}(\epsilon_i) = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

esto es.

 ${\sf respuesta} = {\sf parte} \ {\sf sistem\'atica} + {\sf error} \ {\sf aleatorio}$ 

#### Idea:

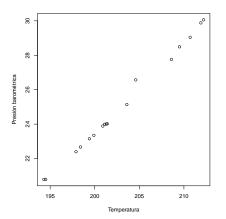
Se desea "estructurar" la función de medias como

$$\mu_i = \mu_i(\boldsymbol{\beta}), \qquad i = 1, \dots, n,$$

 $\text{con } \pmb{\beta} \in \mathbb{R}^p \text{ y } n \gg p.$ 

# Datos de Forbes (1857)<sup>2</sup>

Presión barométrica en pulgadas de mercurio y temperatura de ebullición del agua en grados Fahrenheit para 17 diferentes altitudes.



 $<sup>^2</sup>$ Transactions of the Royal Society of Edinburgh 21, 235-243.

Para describir la relación entre la temperatura y la media de la presión barométrica, podemos considerar

$$\mu = \beta_0 + \beta_1 x,$$

note que

$$\mu = \boldsymbol{x}^{\top} \boldsymbol{\beta}, \qquad \boldsymbol{x} = (1, x)^{\top}, \qquad \boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^{\top},$$

y  $\boldsymbol{x}^{\top}\boldsymbol{\beta}$  se denomina predictor lineal.

El conjunto de datos consiste del vector de respuestas.

$$\boldsymbol{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^\top,$$

y una matriz de diseño  $n \times 2$ 

$$m{X} = egin{pmatrix} 1 & x_1 \ dots & dots \ 1 & x_n \end{pmatrix} = egin{pmatrix} m{x}_1^{ op} \ dots \ m{x}_n^{ op} \end{pmatrix}.$$

#### Convención:

Todos los vectores siempre serán columna.

#### Datos de Forbes<sup>4</sup>

Considere el modelo

$$Presi\'on_i = \beta_0 + \beta_1 Temperatura_i + \epsilon_i,$$

para i = 1, ..., 17.

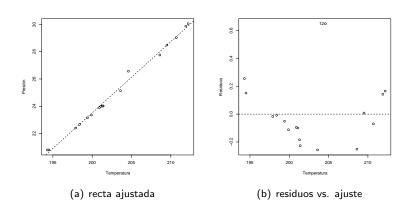
En nuestro caso (usando función 1m de  $\mathbb{R}^3$ ), obtuvimos:

$$\begin{split} \widehat{\boldsymbol{\beta}} &= (\widehat{\beta}_0, \widehat{\beta}_1)^\top = (-81.0637, 0.5229)^\top \\ s^2 &= \frac{1}{17 - 2} \sum_{i=1}^n (\operatorname{Presi\acute{o}n}_i - \widehat{\beta}_0 - \widehat{\beta}_1 \operatorname{Temperatura}_i)^2 \\ &= 0.0542. \end{split}$$

Además, 
$$R^2=\cos^2(\mathrm{Presi\'on},\widehat{\mathrm{Presi\'on}})=0.9944$$
, donde 
$$\widehat{\mathrm{Presi\'on}}_i=\widehat{\beta}_0+\widehat{\beta}_1\,\mathrm{Temperatura}_i, \qquad i=1,\dots,17.$$

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>R puede ser descargado desde CRAN: https://cran.r-project.org/

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Datos disponibles en la biblioteca alr4 para R.



Ahora consideramos el modelo

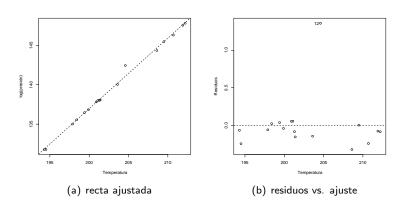
$$100 \times \log_{10}(\mathrm{Presi\acute{o}n}_i) = \beta_0 + \beta_1 \, \mathrm{Temperatura}_i + \epsilon_i,$$
 para  $i=1,\dots,17.$ 

Se obtuvo:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (-42.1378, 0.8955)^{\top}$$
 y  $s^2 = 0.1438$ 

Además,  $R^2 = 0.9950$ .

Recta de regresión y gráfico de residuos para los datos de Forbes<sup>5</sup>.



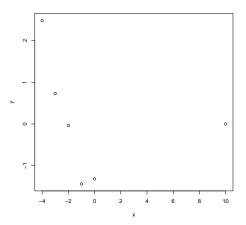
<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>datos transformados

# Datos de Huber (1981)<sup>6</sup>

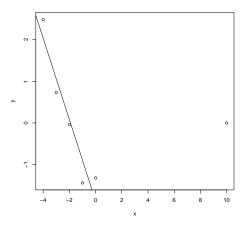
Considere el conjunto de datos hipotéticos de Huber.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Robust Statistics. Wiley, New York

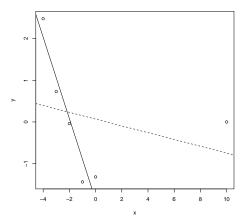
Diagrama de dispersión para los datos de Huber.



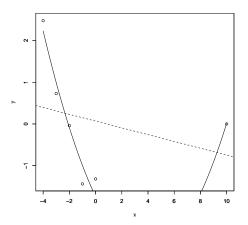
¿Qué opina de la recta de regresión?



¿Y ahora?

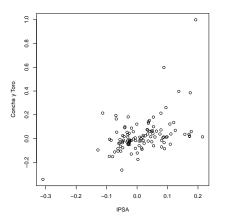


## ¿Cuál modelo prefiere?



# Datos de Concha y Toro (Osorio y Galea, 2006)<sup>7</sup>

Rentabilidades mensuales de Concha y Toro vs. IPSA, ajustados por bonos de interés del Banco Central entre marzo/1990 a abril/1999.



<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Statistical Papers 47, 31-38

Modelo CAPM (Valoración de Activos de Capital), Sharpe (1964)<sup>8</sup>

$$\mathsf{E}(r) = r_f + \beta(\mathsf{E}(r_m) - r_f),$$

usando datos observados, podemos escribir

$$R_t = \alpha + \beta \times IPSA_t + \epsilon, \qquad t = 1, \dots, T.$$

Características del problema

- ► Relación lineal entre las variables.
- Posibles periodos de alta volatilidad.

Hipótesis de interés

- $ightharpoonup H_0: \beta > 1$  (Amante del riesgo).
- $ightharpoonup H_0: β = 1$  (Neutral al riesgo).
- $ightharpoonup H_0: \beta < 1$  (Averso al riesgo).

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Journal of Finance **19**, 425-442

Modelo CAPM (Valoración de Activos de Capital), Sharpe (1964)<sup>8</sup>

$$\mathsf{E}(r) = r_f + \beta(\mathsf{E}(r_m) - r_f),$$

usando datos observados, podemos escribir

$$R_t = \alpha + \beta \times IPSA_t + \epsilon, \qquad t = 1, \dots, T.$$

#### Características del problema:

- Relación lineal entre las variables.
- Posibles periodos de alta volatilidad.

#### Hipótesis de interés

- $ightharpoonup H_0: \beta > 1$  (Amante del riesgo).
- $ightharpoonup H_0: β = 1$  (Neutral al riesgo).
- $\blacktriangleright$   $H_0: \beta < 1$  (Averso al riesgo).

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Journal of Finance **19**, 425-442

Modelo CAPM (Valoración de Activos de Capital), Sharpe (1964)<sup>8</sup>

$$\mathsf{E}(r) = r_f + \beta(\mathsf{E}(r_m) - r_f),$$

usando datos observados, podemos escribir

$$R_t = \alpha + \beta \times IPSA_t + \epsilon, \qquad t = 1, \dots, T.$$

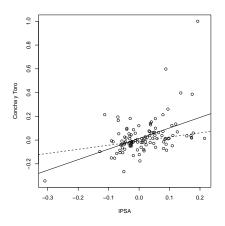
#### Características del problema:

- Relación lineal entre las variables.
- Posibles periodos de alta volatilidad.

#### Hipótesis de interés:

- $ightharpoonup H_0: \beta > 1$  (Amante del riesgo).
- $H_0: \beta = 1$  (Neutral al riesgo).
- ►  $H_0: \beta < 1$  (Averso al riesgo).

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Journal of Finance **19**, 425-442



Ajuste usando errores normales (—) y Cauchy (– –).

# Cemento Portland (Woods, Steinour y Starke, 1932)9

Estudio experimental relacionando la emisión de calor durante la producción y endurecimiento de 13 muestras de cementos Portland. Woods et al. (1932) consideraron cuatro compuestos para los clinkers desde los que se produce el cemento.

La respuesta (Y) es la emisión de calor después de 180 días de curado, medido en calorías por gramo de cemento. Los regresores son los porcentajes de los cuatro compuestos: aluminato tricálcico  $(X_1)$ , silicato tricálcico  $(X_2)$ , ferrito aluminato tetracálcico  $(X_3)$  y silicato dicálcico  $(X_4)$ .

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Industrial and Engineering Chemistry **24**, 1207-1214.

# Cemento Portland (Woods, Steinour y Starke, 1932)

Y	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
78.5	7	26	6	60
74.3	1	29	15	52
104.3	11	56	8	20
87.6	11	31	8	47
95.9	7	52	6	33
109.2	11	55	9	22
102.7	3	71	17	6
72.5	1	31	22	44
93.1	2	54	18	22
115.9	21	47	4	26
83.8	1	40	23	34
113.3	11	66	9	12
109.4	10	68	8	12

#### Observación:

En efecto, existe una relación lineal aproximada, pues  $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \approx 100$ .

## Datos de Puromycin (Treolar, 1974)

Modelo Michaelis-Menten: usado para el estudio de cinética de enzimas.

Permite estudiar la relación entre velocidad inicial de una reacción enzimática a la concentración de un substrato x a través de la ecuación:

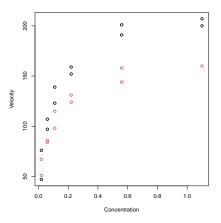
$$f(x, \boldsymbol{\beta}) = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x}, \qquad \boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2)^{\top}.$$

Diferenciando f con relación a  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , obtenemos

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_1} = \frac{x}{\beta_2 + x}, \qquad \frac{\partial f}{\partial \beta_2} = -\frac{\beta_1 x}{(\beta_2 + x)^2}.$$

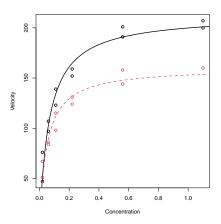
# Datos de Puromycin

Velocidad de una reacción enzimática como función de la concentración del substrato para un experimento sobre enzimas tratadas con Puromycin.



# Datos de Puromycin

Velocidad de una reacción enzimática como función de la concentración del substrato para un experimento sobre enzimas tratadas con Puromycin.



## IECD-325: Modelos lineales y diseños de experimentos

Modelos lineales son los *bloques de construcción* para metodologías más complejas, tales como:

- ► Modelos lineales generalizados.
- Modelos no lineales.
- ► Modelos de regresión espacial.
- Regresión multivariada.
- Datos longitudinales, GMANOVA.
- Regresión semiparamétrica.
- Modelos con efectos mixtos.

# IECD-325: Modelos lineales y diseños de experimentos

