Grado ...

TRABAJO FIN DE ESTUDIOS

Introducción a la Estadística Aplicada con ayuda de R

Marta García Moreno

Sevilla, Octubre de 2017

Índice general

Prólogo

Escrito colocado al comienzo de una obra en el que se hacen comentarios sobre la obra o su autor, o se introduce en su lectura; a menudo está realizado por una persona distinta del autor.

También se podrían incluir aquí los agradecimientos.

Resumen

Resumen...

Abstract

Abstract...

Índice de figuras

Índice de tablas

Capítulo 1

Introducción

El modelado estadístico es una herramienta fundamental para la investigación científica y el análisis de datos, su principal propósito es el de aproximar la realidad a partir de la implementación de modelos matemáticos que tienen en cuenta la incertidumbre. Estos tipos de modelos son capaces de abarcar distintos problemas como pueden ser: la descripción de relaciones entre variables, la predicción de nuevos datos o la comprobación de hipótesis.

Hoy en día existen muchos métodos y técnicas para proceder a resolver los problemas antes mencionados, pero en este trabajo nos centraremos en el desarrollo de los Modelos Aditivos Generalizados (MAG). Sin embargo, hasta llegar a ellos, pasaremos por la descripción de los Modelos Lineales, los Modelos Lineales Generalizados (MLG) y los Modelos Aditivos. Esto se debe a que los MAG no son más que una extensión de los anteriores, así que haremos un transcurso desde modelos simples hasta un Modelo Aditivo Generalizado completo.

En el primer capítulo hablaremos de los Modelos Lineales y los Modelos Lineales Generalizados. El concepto de regresión lineal surgió a partir de la necesidad de estudiar la relación entre unas variables, de las cuales se conocen ciertos datos, mediante formalizaciones matemáticas. En concreto lo introdujo Francis Galton y luego fue desarrollado por el estadista y matemático Karl Pearson a finales del siglo XIX. Sin embargo, ya en el 1805 Legendre proponía la primera forma del método de mínimos cuadrados, por lo que estamos hablando de técnicas que ya llevan más de dos siglos entre nosotros. A pesar de ello, no se desarrollan las nociones de los MLG hasta el 1970, estos modelos relajan las hipótesis que deben asumir los Modelos Lineales y permiten un primer acercamiento a que los modelos tengan un grado de no linealidad.

Comenzaremos el siguiente capítulo introduciendo los Modelos Aditivos y varios resultados básicos sobre la estimación de los MAG, a partir de ellos ya nos podremos adentrar más en profundidad en los resultados necesarios para sus futuras aplicaciones. En particular, añadiremos una sección que hable de las funciones de suavizado (*smoothers*) y los tensores (*tensors*) que aplicaremos luego en la práctica, además de presentar también conceptos sobre la comparación de estos tipos de modelos y sobre el contraste de hipótesis.

Los Modelos Aditivos Generalizados mejoran la metodología de los MLG incorporando la flexibilidad que aporta la regresión no paramétrica y mantienen la interpretabilidad de los datos del análisis de regresión con múltiples variables predictoras pues se modelan

como una suma de términos 'suaves'. Actualmente, estos modelos son un punto de partida magnífico para el modelado de un problema, un GAM bien ajustado debería funcionar de manera conveniente, incluso comparado con métodos de *boosting* o de *deep learning*. Además, el MAG tiene una base para una mejor interpretabilidad y métricas de incertidumbre más sencillas, por lo que en muchos casos del análisis de datos, los Modelos Aditivos Generalizados son una buena opción.

Capítulo 2

Modelos lineales generalizados

2.1. Introducción

Como bien introdujimos antes, los modelos estadísticos pretenden explicar la relación entre dos o mas variables, en particular, tratan de describir el comportamiento de una variable respuesta (o dependiente), que se suele denotar por Y, mediante la información que otorgan las variables predictoras (o independientes), que se suelen denotar como $X_1, ..., X_p$.

La forma más general de expresar matemáticamente la intención de los modelos estadísticos es la siguiente:

$$Y = f(X_1, .., X_p) + \epsilon \tag{2.1}$$

Donde f es una función desconocida cuyo propósito es el de representar de la mejor[1] manera posible la relación entre las variables $X_1, ..., X_p$ e Y; y ϵ es un error aleatorio independiente de las variables predictoras que deberá cumplir ciertas condiciones según el tipo de modelo que estemos tratando.

Este trabajo tiene como finalidad el definir un conjunto de estrategias y técnicas que proporcionan un ajuste óptimo de la función f, es decir, que asemeje lo mejor posible la relación de las variables al fenómeno que se esté estudiando. Además, se incluye una posterior aplicación práctica de dichos resultados en el ámbito del cambio climático.

En lo que a este capítulo respecta, partiremos definiendo los modelos lineales de una forma breve y más general, ya que se ve de manera más extensa en varias asignaturas durante el grado. Tras ello daremos varios resultados básicos para el entendimiento y desarrollo de los Modelos Lineales Generalizados.

[1] El cómo de bueno es un modelo es un concepto que se puede definir de tantas formas como maneras hay de evaluarlos. Veremos varias de ellas a lo largo del trabajo.

2.2. Modelos lineales

El modelo lineal ocupa un lugar clave en el manual de herramientas de todo estadístico aplicado. Esto se debe a su simple estructura, a la fácil interpretación de sus resultados y al sencillo desarrolo de la teoría de mínimos cuadrados. Sin embargo, a la hora de dar su definición se deben tener en cuenta ciertas restricciones que deben cumplir las variables y los errores del modelo. Estas condiciones hacen que el modelo no sea capaz de adaptarse bien a todos los fenómenos que uno se propone describir pero, a cambio, otorga esa sencillez de visualización antes mencionada.

Definición 2.2.1 (Modelo Lineal)**.** Sean $X_1, \ldots, X_p$ un conjunto de p vectores aleatorios de n componentes (con $p \leqslant n$) e $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)^T$ un vector aleatorio de n componentes tal que $E[Y] = \mu$. Entonces, se entiende por modelo lineal (multivariante) aquel que determina la relación entre los vectores aleatorios mediante una combinación lineal de parámetros de la siguiente forma:

$$\mu = X\beta$$

$$Y = \mu + \epsilon$$

O vectorialmente como:

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_i \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{(1,1)} & \cdots & x_{(1,j)} & \cdots & x_{(1,p)} \\ \cdots & \ddots & \vdots & \ddots & \cdots \\ x_{(i,1)} & \cdots & x_{(i,j)} & \cdots & x_{(i,p)} \\ \cdots & \ddots & \vdots & \ddots & \cdots \\ x_{(n,1)} & \cdots & x_{(n,j)} & \cdots & x_{(n,p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_i \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_i \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

Donde:

- β es un vector de parámetros β_i a determinar que reflejan la magnitud del efecto lineal (constante) de los incrementos unitarios en las variables explicativas X_i sobre la variable explicada Y.
- ϵ es un vector aleatorio tal que los ϵ_i son variables aleatorias independientes e identicamente distribuidas por una distribución normal de esperanza nula y varianza σ^2 ($\epsilon_i \backsim N(0, \sigma^2)$). Representa el término de error del modelo y corresponde con $\epsilon = Y - E[Y]$.

Observación 2.2.1. Gracias a lo notado en el párrafo anterior podemos ver que:
$Y \backsim N(\mu, \sigma^2 I_n)$ ya que:

$$E[Y] = E[X\beta + \epsilon] = X\beta + E[\epsilon] = X\beta = \mu$$

$$Cov(Y) = Cov(X\beta + \epsilon) = Cov(\epsilon) = \sigma^2 I_n$$

Veamos ahora cómo se pueden obtener los valores de los parámetros β.

Definición 2.2.2 (Estimador por mínimos cuadrados)**.** Elegiremos los valores de β que minimicen la suma de cuadrados:

$$S = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \mu_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - (X\beta)_i)^2 \tag{2.2}$$

Es decir:

$$\hat{\beta} = arg_{\beta \in \mathbb{R}^p} min ||Y - X\beta||^2$$

Donde $||\cdot||$ denota la norma euclídea.

Para encontrar tal mínimo se razona derivando respecto de cada β_i y luego igualando a 0. De este modo los parámetros β_i vienen dados por la solución del siguiente sistema:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial \beta_1} = 0 \\ \cdots \\ \frac{\partial S}{\partial \beta_p} = 0 \end{cases}$$

Desarrollando este sistema de escuaciones llegamos a que es equivalente a $X^T X\hat{\beta} = X^T Y$, por lo que el estimador por mínimos cuadrados del vector de parámetros β viene dado por:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y \tag{2.3}$$

Observación 2.2.2. Notemos que esta expresión tiene sentido pues el producto $X^T X$ resulta en una matriz cuadrada de orden p y rango máximo, por lo que el sistema antes dado tiene solución única.

Proposición 2.2.1 (Distribución del estimador $\hat{\beta}$)**.** El estimador por mínimos cuadrados del vector de parámetros β, $\hat{\beta}$, sigue una distribución del tipo normal p-variante de esperanza β y matriz de covarianzas $V_{\hat{\beta}} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$. Es decir: $\hat{\beta} \backsim N_p(\beta, \sigma^2 (X^T X)^{-1})$

Demostración. Partiremos viendo que el estimador $\hat{\beta}$ es insesgado:

$$E[\hat{\beta}] = E[(X^T X)^{-1} X^T Y] = (X^T X)^{-1} X^T E[Y] = (X^T X)^{-1} X^T X\beta = \beta$$

Por otro lado, calculemos la matriz de covarianzas de $\hat{\beta}$, para ello primero debemos notar que como los errores aleatorios ϵ_i son independientes e identicamentes distribuidos con esperanza nula y varianza σ^2, $\forall i \neq j$:

$$E[\epsilon_i \epsilon_j] = E[\epsilon_i] + E[\epsilon_j] + Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$$

y, por tanto:

$$E[\epsilon\epsilon^T] = E\begin{bmatrix} \epsilon_1^2 & \epsilon_1\epsilon_2 & \cdots & \epsilon_1\epsilon_n \\ \epsilon_1\epsilon_2 & \epsilon_2^2 & \cdots & \epsilon_2\epsilon_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \epsilon_1\epsilon_n & \cdots & \cdots & \epsilon_n^2 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} E[\epsilon_1^2] & E[\epsilon_1\epsilon_2] & \cdots & E[\epsilon_1\epsilon_n] \\ E[\epsilon_1\epsilon_2] & E[\epsilon_2^2] & \cdots & E[\epsilon_2\epsilon_n] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E[\epsilon_1\epsilon_n] & \cdots & \cdots & E[\epsilon_n^2] \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \sigma^2 \end{bmatrix}$$

Luego, utilizando que por 2.3 se tiene que $\hat{\beta} = \beta + (X^T X)^{-1} X\epsilon$, obtenemos que la matriz de covarianzas es:

$$\begin{aligned} Cov(\hat{\beta}) &= E[(\hat{\beta} - E[\hat{\beta}])(\hat{\beta} - E[\hat{\beta}])^T] = E[(\hat{\beta} - \beta)(\hat{\beta} - \beta)^T] = \\ &= E[((X^TX)^{-1}X^T\epsilon)((X^TX)^{-1}X^T\epsilon)^T] = E[(X^TX)^{-1}X^T\epsilon\epsilon^TX(X^TX)^{-T}] = \\ &= (X^TX)^{-1}X^TE[\epsilon\epsilon^T]X(X^TX)^{-T} = (X^TX)^{-1}X^T\sigma^2I_nX(X^TX)^{-T} = \\ &= \sigma^2(X^TX)^{-1}X^TX(X^TX)^{-T} = \sigma^2(X^TX)^{-1} \end{aligned}$$

Acabamos la prueba recordando que $\hat{\beta}$ no es más que una combinación lineal de variables aleatorias normales, concretamente de las Y_i, para decir que en efecto sigue una distribución normal p-variante como indica el enunciado. ■

Observación 2.2.3. Ahora bien, generalmente el valor de σ^2 es desconocido así que también sería preciso dar una estimación del mismo para que así los resultados anteriores fueran de alguna utilidad.

Definición 2.2.3 (Estimador de σ^2)**.** La varianza σ^2 admite un estimador insesgado que se basa en la suma de cuadrados:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{S}{n-p} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - (X\beta)_i)^2}{n-p}$$

Además se tiene que $\hat{\sigma}^2$ sigue una distribución:

$$\hat{\sigma}^2 \backsim \frac{\sigma^2}{n-p}\chi^2_{n-p}$$

Observación 2.2.4. No daremos la obtención de este estimador pero sí indicaremos que su distribución se obtiene directamente de que como S es la suma de normales $N(0,\sigma^2)$ y $\frac{\epsilon_i}{\sigma} \backsim N(0,1)$, entonces: $\frac{1}{\sigma^2}S \backsim \chi^2_{n-p}$. Finalmente, multiplicando y dividiento esta expresión por (n-p) y sustituyendo la definición del estimador $\hat{\sigma}^2$ obtenemos el resultado.

2.3. Modelos lineales generalizados

Nos adentramos ya con esta sección en la primera extensión de los modelos lineales de las que se tratan durante el trabajo. Los Modelos Lineales Generalizados (MLG) fueron originalmente formulados por John Nelder y Robert Wedderburn (1972), quienes tenían como propósito unificar varios modelos estadísticos como la regresión lineal, la logística y la de Poisson en un mismo modelo. Este tipo de modelo relaja algunas de las hipótesis que asumían los modelos lineales, como que los errores ya no deben seguir ninguna distribución específica y además añade nuevos elementos como la función de enlace, la cual interviene en la relación entre las medias y la forma lineal del modelo. También se deberá tener en cuenta una nueva hipótesis distribucional, las variables de respuestas seguirán distribuciones de tipo exponencial. Más tarde introduciremos cada uno de estos aspectos, de momento demos la estructura básica de un MLG.

Definición 2.3.1 (Estructura básica de un MLG)**.**

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E[Y_1] \\ \vdots \\ E[Y_n] \end{pmatrix} = E[Y]$$

$$g(\mu_i) = X_i\beta, \quad \forall i = 1, \ldots, n$$

Donde:

- X es la matriz modelo de dimensión $n \times p$ con $p \leqslant n$, que contiene a las variables predictoras, cada columna representa una variable predictora X_i.
- $\beta = (\beta_1, \ldots, \beta_p)^T$ es el vector de parámetros desconocidos como en el caso de los modelos lineales. A $\eta = X\beta$ se le conoce como predictor lineal.
- $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ es la función de enlace, que debe ser diferenciable y monótona. Representa la relación entre la media de las variables de respuesta y el predictor lineal.
- $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)^T$ es un vector aleatorio, se suele suponer que las Y_i son variables aleatorias independientes y que siguen una distribución de tipo exponencial.

Observación 2.3.1. Desde esta formulación podemos ver fácilmente el por qué decimos que los MLG son una generalización de los modelos lineales, ya que basta tomar a la identidad como la función de enlace y suponer que la distribución considerada sea de tipo normal para encontrarnos ante la forma general de un modelo lineal como vimos en la sección anterior.

2.3.1. Familia de distribuciones exponenciales

Como hemos mencionado antes, la variable de respuesta de los modelos lineales generalizados deben seguir una distribución de tipo exponencial, en esta sección veremos qué significa eso y qué implicaciones tiene. Uno de los motivos más importantes por los que se supone que las variables de respuesta Y_i siguen distribuciones de esta familia se debe a que en los modelos lineales los cambios constantes en las variables predictoras implicaban cambios constantes en la variable de respuesta, pero ahora se quiere permitir que dichos cambios constantes de entrada puedan implicar también variaciones geométricas.

Definición 2.3.2 (Distribución de tipo exponencial)**.** Una distribución se dice que es de tipo exponencial si su función de densidad es de la forma:

$$f_\theta(y) = e^{\frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y,\phi)}$$

Donde:

- a, b y c son funciones arbitrarias.
- ϕ es conocido como parámetro de escalado.
- θ es conocido como parámetro canónico de la distribución. Más adelante veremos que depende completamente de los parámetros del modelo β.

Ejemplo 2.3.1. La distribución normal es de tipo exponencial pues su función de densidad es:

$$f_\mu(y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}} = e^{\frac{-y^2+2y\mu-mu^2}{2\sigma^2} - log(\sigma\sqrt{2\pi})} = e^{\frac{y\mu-\mu^2/2}{\sigma^2} - \frac{y^2}{2\sigma^2} - log(\sigma\sqrt{2\pi})}$$

Y por tanto toma los siguientes parámetros de la familia exponencial:

- $\theta = \mu$
- $b(\theta) = \frac{\theta^2}{2} = \frac{\mu^2}{2}$
- $a(\phi) = \phi = \sigma^2$
- $c(\phi, y) = \frac{-y^2}{2\phi} - log(\sqrt{\phi 2\pi}) = \frac{-y^2}{2\sigma} - log(\sigma\sqrt{2\pi})$

Es posible dar una forma general para la esperanza y la varianza de las variables de tipo exponencial dependiendo de los parámetros de su función de densidad. Lo vemos en el siguiente resultado.

Proposición 2.3.1. Sea Y una variable de tipo exponencial, entonces verifica:

$$E[Y] = b'(\theta) \tag{2.4}$$
$$Var(Y) = b''(\theta)a(\phi) \tag{2.5}$$

Demostración. Partimos considerando la función de verosimilitud logáritmica para θ:

$$l(\theta) = log(f_\theta(y)) = \frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y, \phi)$$

Y su derivada respecto de theta:

$$\frac{\partial l}{\partial \theta}(\theta) = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$$

Ahora bien, si cambiamos la observación y por la variable Y, podemos evaluar la esperanza de esta derivada, la cual será 0 por propiedades de la función de verosimilitud logáritmica.

$$E[\frac{\partial l}{\partial \theta}(\theta)] = \frac{E[Y] - b'(\theta)}{a(\phi)} = 0$$

Y de aquí se obtiene directamente que $E[Y] = b'(\theta)$. Seguimos derivando para obtener que:

$$\frac{\partial^2 l}{\partial \theta^2}(\theta) = -\frac{b''(\theta)}{a(\phi)}$$

Y utilizando que: $E[\frac{\partial^2 l}{\partial \theta^2}] = -E[(\frac{\partial l}{\partial \theta})^2]$, nos queda que:

$$\frac{b''(\theta)}{a(\phi)} = \frac{E[(Y - b'(\theta))^2]}{a(\phi)^2} = \frac{E[(Y - E[Y])^2]}{a(\phi)^2} = \frac{Var(Y)}{a(\phi)^2}$$

De donde se obtiene que: $Var(Y) = b''(\theta)a(\phi)$. ■

Observación 2.3.2. Cuando ϕ es conocido el manejo de la función a no tiene dificultad, pero en muchos casos ϕ suele ser desconocido, así que para agilizar los resultados escribiremos $a(\phi) = \frac{\phi}{\omega}$, donde ω es una constante conocida. De hecho, todos los casos prácticos de interés se podrán expresar así y la mayoría con $\omega = 1$. De este modo nos queda: $Var(Y) = b''(\theta)\frac{\phi}{\omega}$. Por otro lado, en secciones posteriores necesitaremos trabajar con Var(Y) en función de $\mu = E[Y]$, para ello utilizaremos la relación 2.4 y definiremos una nueva función:

$$V(\mu) = \frac{b''(\theta)}{\omega} \tag{2.6}$$

pues de este modo se tiene que: $Var(Y) = V(\mu)\phi$

Podemos recoger las carácterísticas de las principales distribuciones de tipo exponencial en la siguiente tabla:

	Binomial $Bi(n,p)$	Normal $N(\mu,\sigma^2)$	Poisson $Po(\lambda)$	Gamma $Ga(p,\lambda)$
$\theta(\mu)$	$log(\frac{\mu}{n-\mu})$	μ	$log(\mu)$	$-\frac{1}{\mu}$
ϕ	1	σ^2	1	$\frac{1}{p}$
$a(\phi)$	1	σ^2	1	$\frac{1}{p}$
$b(\theta)$	$nlog(1+e^\theta)$	$\frac{\theta^2}{2}$	e^θ	$-log(-\theta)$
$c(y,\phi)$	$log(\binom{n}{y})$	$-\frac{1}{2}(\frac{y^2}{\phi}+log(2\pi\phi))$	$-log(y!)$	$plog(py)-log(y\Gamma(p))$

2.3.2. Ajuste de los modelos lineales generalizados

La estimación de parámetros e inferencia con modelos aditivos generalizados se basa en la estimación de máxima verosimilitud, ya que, gracias a la hipótesis de que las Y_i pertenecezcan a la familia de distribuciones exponenciales, siempre se dispondrá de funciones de densidad. Partiremos considerando un MLG como el de la definición 2.3.1 y nuestro principal objetivo en esta sección será dar el estimador de máxima verosimilitud del vector de parámetros β.Veremos que será necesario recurrir a un algoritmo basado en mínimos cuadrados para hallar tal máximo, el método de mínimos cuadrados reponderados iterativamente.

Empezamos considerando y una observación de Y y notando que, como los Y_i son independientes entre sí, la función de verosimilitud para β viene dada por:

$$L(\beta)=\prod_{i=1}^{n} f_{\theta_i}(y_i)$$

Y la función de verosimilitud logarítmica:

$$l(\beta)=\sum_{i=1}^{n} log(f_{\theta_i}(y_i))=\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i\theta_i-b_i(\theta_i)}{a_i(\phi)}+c_i(\phi,y_i)$$

La dependencia de β viene de que θ depende de μ y este a su vez depende del predictor lineal. Ahora bien, si sustituimos en esta expresión que $a_i(\phi)=\frac{\phi}{\omega_i}$, como mencionamos en la sección anterior, nos queda:

$$l(\beta)=\sum_{i=1}^{n}\omega_i\frac{y_i\theta_i-b_i(\theta_i)}{\phi}+c_i(\phi,y_i)$$

Como queremos hallar el β que la hace máxima derivamos respecto β_i e igualamos a 0:

$$\frac{\partial l}{\partial\beta_j}=\frac{1}{\phi}\sum_{i=1}^{n}\omega_i(y_i\frac{\partial\theta_i}{\partial\beta_j}-b_i'(\theta_i)\frac{\partial\theta_i}{\partial\beta_j})$$

Donde $\frac{\partial\theta_i}{\partial\beta_j}$ por la regla de la cadena es:

$$\frac{\partial\theta_i}{\partial\beta_j}=\frac{d\theta_i}{d\mu_i}\frac{\partial\mu_i}{\partial\beta_j}=\frac{d\theta_i}{d\mu_i}\frac{\partial\eta_i}{\partial\beta_j}\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}=\frac{X_{ij}}{g'(\mu_i)b''(\theta_i)}$$

Hemos utilizado que $\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} = g'(\mu_i)$, que $\frac{\partial \eta_i}{\partial \beta_j} = X_{ij}$ y que derivando el resultado 2.4 se tiene: $\frac{d\theta_i}{d\mu_i} = \frac{1}{b''(\theta)}$. Sustituyendo también el resultado de 2.6:

$$\frac{\partial l}{\partial \beta_j} = \frac{1}{\phi}\sum_{i=1}^{n} \frac{y_i - b_i'(\theta_i)}{g'(\mu_i)b_i''(\theta_i)/\omega_i} = \frac{1}{\phi}\sum_{i=1}^{n} \frac{y_i - \mu_i}{g'(\mu_i)V(\mu_i)}X_{ij} \tag{2.7}$$

Observación 2.3.3. Ahora bien, el razonamiento general que seguiríamos sería el igualar estas derivadas a 0 y resolver el sistema resultante, sin embargo, se trata de un sistema con ecuaciones no lineales, por lo que para resolverlo utilizaremos métodos numéricos, en concreto utilizaremos el método de Newton que precisa del gradiente y del Hessiano de l. Por lo que debemos volver a derivar l.

$$\frac{\partial^2 l}{\partial \beta_j \beta_k} = -\frac{1}{\phi}\sum_{i=1}^{n} \frac{X_{ij}X_{ik}\alpha(\mu_i)}{g'(\mu_i)^2 V(\mu_i)}$$

Donde $\alpha(\mu_i) = 1 + (y_i - \mu_i)(\frac{V'(\mu_i)}{V(\mu_i)} + \frac{g''(\mu_i)}{g'(\mu_i)})$. Luego, si definimos la matriz $W = diag(\omega_i)$ para $\omega_i = \frac{\alpha(\mu_i)}{g'(\mu_i)^2 V(\mu_i)}$, el Hessiano de l es: $-\frac{1}{\phi}XWX$. De manera similar, si definimos $G = diag(\frac{g'(\mu)}{\alpha(\mu_i)})$, el gradiente de l puede escribirse como: $X^T W G \frac{(y-\mu)}{\phi}$.

De este modo, una actualización del método de Newton es de la forma:

$$\beta^{k+1} = \beta^k + (XWX)^{-1}X^T WG(y-\mu) = (XWX)^{-1}X^T Wz$$

Donde $z_i = g'(\mu_i)\frac{y_i - \mu_i}{\alpha(\mu_i)} + \eta_i$

Observación 2.3.4. De lo anterior se podemos notar que las actualizaciones de los β^k no son más que las estimaciones de β por mínimos cuadrados ponderados, es decir, resultan de de minimizar:

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i (z_i - X_i\beta)^2 \tag{2.8}$$

Podemos entonces obtener el estimador numérico de los parámetros β de los MLG mediante el siguiente algoritmo.

Definición 2.3.3 (Algoritmo de mínimos cuadrados reponderados iterativamente)**.** 1) Inicialización: tomar $\hat{\mu_i} = y_i + \delta_i$ y $\hat{\eta_i} = g(\hat{\mu_i})$, donde δ_i suele ser 0 o una constante que asegure que $\hat{\eta_i}$ sea finito.
2) Calcular: $z_i = g'(\mu_i)\frac{y_i - \hat{\mu_i}}{\alpha(\mu_i)} + \hat{\eta_i}$ y $\omega_i = \frac{\alpha(\hat{\mu_i})}{g'(\hat{\mu_i})^2 V(\hat{\mu_i})}$
3) Encontrar $\hat{\beta}$ el parámetro que minimiza la función objetivo de mínimos cuadrados ponderados 2.8 y actualizar $\hat{\eta} = X\hat{\beta}$ y $\hat{\mu_i} = g^{-1}(\hat{\eta_i})$

Observación 2.3.5. Para saber con qué iteracion quedarnos debemos comprobar paso a paso si la variación entre el valor antiguo y el nuevo de $\hat{\beta}$ o las derivadas de la función de verosimilitud logáritmica están lo suficientemente cerca de 0.

2.3.3. Funciones de enlace canónicas

Definición 2.3.4 (Funciones de enlace canónicas)**.** Se dice que una función de enlace g_c es canónica para una distribución de la familia exponencial si verifica: $g_c(\mu_i) = \theta_i$, es decir, relaciona directamente el parámetro canónico con el predictor lineal.

Proposición 2.3.2 (Propiedades de las funciones de enlace canónicas)**.**

- Su uso en el modelo 2.3.1 resulta en: $\theta_i = X_i\beta$
- Hacen que $\alpha(\mu_i) = 1$.
- El Hessiano de la función de verosimilitud logarítmica coincida con su valor esperado.
- El sistema a resolver para obtener los estimadores de máxima verosimilitud de β, es decir, el formado por las derivadas parciales $\frac{\partial l}{\partial \beta_j}$ igualadas a 0 se reduce a: $X^t y - X^T\hat{\mu} = 0 \Rightarrow X^t y = X^T\hat{\mu}$ pues $\frac{\partial \theta_i}{\partial \beta_j} = X_{ij}$

2.3.4. Residuos

Al igual que para los modelos lineales, el estudio de los residuos ϵ_i de los MLG es un buen método para el control de los modelos, pero en este caso la estandarización de los residuos es necesaria y más complicada. Esto se debe a que si las suposiciones hechas sobre el modelo son correctas, entonces los residuos estandarizados deben tener aproximadamente la misma varizana y se deben comportar, tanto como sea posible, como los residuos de los modelos lineales. Para ello veremos dos tipos de estandarizaciones distintas.

Definición 2.3.5 (Residuos de Pearson)**.** Se dividen los residuos entre una cantidad proporcional a la desviación estándar dada por el modelo ajustado:

$$\hat{\epsilon}_i^p = \frac{y_i - \hat{\mu}_i}{\sqrt{V(\hat{\mu}_i)}}$$

Deben tener media nula y varianza ϕ si el modelos es correcto.

Observación 2.3.6. Estos residuos no deberían mostrar ninguna tendencia en la media o la varianza al representarlos frente a los valores ajustados del modelo.

En la práctica los residuos de Pearson suelen ser asimétricos en torno al 0, lo que no concuerda mucho con que se parezcan a los residuos de los modelos lineales. Por tanto, se considera también la siguiente estandarización de los residuos, que surge al comparar la desviación del MLG con la suma de los residuos al cuadrado de los modelos lineales. Veámos primero a qué nos referimos con desviación:

Definición 2.3.6 (Desviación)**.** En el contexto de la definición 2.3.1, decimos que la desviación del modelo se define como:

$$D = 2(l(\hat{\beta}_{max}) - l(\hat{\beta})\phi = \sum_{i=1}^{n} 2\omega_i(y_i(\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_i) - b(\tilde{\theta}_i + b(\hat{\theta}_i)) \tag{2.9}$$

Donde:

- $l(\hat{\beta}_{max})$ representa el valor máximo de la función de verosimilitud logarítmica del modelo saturado (el que tiene un parámetro por dato). Este es el valor máximo que pueden tener todas las funciones de verosimilitud logarítmicas para los datos dados.

- $\tilde{\theta}_i$ es la estimación del parámetro canónico para el modelo saturado.
- $\hat{\theta}_i$ es la estimación del parámetro canónico del modelo que estamos estudiando.

Definición 2.3.7 (Residuos de desviación)**.** Si denotamos por d_i a la i-ésima componente de la desviación de un MLG, nos queda que $D = \sum_{i=1}^{n} d_i$ y se definen los residuos de desviación como:

$$\hat{\epsilon}_i^d = signo(y_i - \hat{\mu}_i)\sqrt{d_i}$$

Observación 2.3.7. Obviamente se tiene que: $D = \sum_{i=1}^{n} (\hat{\epsilon}_i^d)^2$. Además, notemos que: $D^* = \frac{D}{\phi} \backsim \chi_n^2$ y, aunque esto no se pueda trasladar directamente componente a componente, podemos intuir que:

$$\frac{d_i}{\phi} \backsim \chi_1^2 \Rightarrow \hat{\epsilon}_i^d \backsim N(0, \phi)$$

Es decir, intuitivamente, se comportarán como los residuos de los modelos lineales.

Capítulo 3

Modelos aditivos generalizados

3.1. Introducción

Como bien podemos intuir por su nombre, los modelos aditivos generalizados no son más que la fusión entre los modelos lineales generalizados y los modelos aditivos, los cuales se introducen con una sección en este capítulo. Podemos ver estos dos tipos de modelos como extensiones del modelo lineal. Por un lado, como vimos en el capítulo anterior, el MLG hace uso de una función de enlace entre el predictor lineal y el valor esperado de la variable dependiente para poder expresar relaciones más complejas y relaja la hipótesis distribucional permitiendo que tal variable siga distribuciones de la familia exponencial. Por otro lado, los modelos aditivos, además de también relajar esta hipótesis de distribución, introducen las funciones de suavizado en el modelo, estas proporcionan más flexibilidad a la hora de relacionar las variables explicativas con la de respuesta.

Luego, como ya hemos mencionado, y como se plantea en Hastie y Tibshirani (1986,1990), el MAG reune estas dos propuestas de forma que este tipo de modelo generaliza el modelo aditivo de la misma forma que el MLG generalizaba el modelo lineal. Sin embargo, la flexibilidad que proporciona este modelo da lugar a dos nuevos problemas teóricos: cómo estimar las funciones de suavizado y cómo de "suaves" deben ser.

En este capítulo nos adentramos en los modelos no paramétricos, es decir, con aquellos que en vez de expresar la relación del valor esperado de la variable de respuesta con las variables predictoras mediante un predictor lineal se hace mediante funciones f, como se vió en 2.1, pero ahora sin hacer ninguna suposición sobre ella. Esto conllevará en muchas ocasiones un mejor ajuste del modelo y traerá a la mesa una nueva cuestión conocida como sobreajuste que, aunque ya aparecía para los modelos paramétricos, ahora jugará un papel fundamental a la hora de querer predecir datos fuera de los observados. Este concepto refleja el hecho de que el modelo ajusta tan bien los datos proporcionados para la estimación de sus parámetros que es incapaz de mostrar la verdadera relación entre las variables que se estudian y, por tanto, da lugar a predicciones de nuevos datos que no serán las idóneas.

Comenzaremos viendo cómo construir los modelos aditivos generalizados, es decir, qué bases de funciones podemos elegir para obtener las funciones de suavizado y qué parámetro de suavizado se debe seleccionar o cómo se puede estimar. Luego se introduce el

modelo aditivo, en el que se utilizarán los resultados vistos a lo largo del capítulo. Tras todo ello se propone la forma final del modelo aditivo generalizado.

Definición 3.1.1 (Estructura básica del modelo aditivo generalizado)**.**

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E[Y_1] \\ \vdots \\ E[Y_n] \end{pmatrix} = E[Y]$$

$$g(\mu_i) = A_i\theta + f_1(x_{1i} + f_2(x_{2i}) + f_3(x_{3i}, x_{4i}) + \dots \quad , \forall i = 1, \dots, n \tag{3.1}$$

Donde:

- Y_i es la variable de respuesta y sigue una distribución de la familia exponencial de media μ_i y parámetro de escalado ϕ. A partir de ahora esto lo denotaremos por: $Y_i \backsim EF(\mu_i, \phi)$.
- A_i es la fila i-ésima de la matriz del modelo para aquellas componentes del modelo que son estrictamente paramétricas.
- θ es el correspondiente vector de parámetro, que antes denotábamos por β, para las variables predictoras mencionadas en el anterior punto.
- Las f_i son las funciones de suavizado para las covariables x_k.

3.2. Suavizado univariante

Dicho esto, partiremos considerando modelos que, aunque no sean adecuados para un uso práctico general, nos permitirán estudiar el marco teórico de una forma más sencilla. Es decir, en esta sección consideraremos un modelo con una sola función de suavizado, f, y una sola covariable, x, de la forma:

$$y_i = f(x_i) + \epsilon_i \tag{3.2}$$

Donde y_i es la variable de respuesta y los ϵ_i son variables aleatorias independientes e identicamente distribuidas como $N(0, \sigma^2)$ que representan el error.

3.2.1. Bases de funciones

Nos proponemos en esta sección obtener una estimación de la función de suavizado a partir de una base de un espacio de funciones, en el que también se encontrará f (o una aproximación suya). Elegir una base equivale a tomar un conjunto de funciones $\{b_j(x)\}_{j=1}^k$ y, por tanto, podemos representar la función de suavizado como:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{k} b_j(x)\beta_j \tag{3.3}$$

Para ciertos parámetros β_j a determinar.

Base polinómica

Si consideramos la base $\mathcal{B}$ del espacio de polinomios de grado k, es decir, $\mathcal{B} = \{1, x_i, x_i^2, \ldots, x_i^k\}$, la función de suavizado toma la forma:

$$f(x) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2 + \cdots + \beta_{k+1} x^k$$

Y, por tanto, el modelo 3.2 queda:

$$y_i = \beta_1 + \beta_2 x_i + \beta_3 x_i^2 + \cdots + \beta_{k+1} x_i^k + \epsilon_i$$

Observación 3.2.1 (Problema de la base polinómica). Como indica Wood, 2017, p.162, por el teorema de Taylor, la base polinomial nos será útil cuando nuestro interés sea el de estudiar las propiedades de la función de suavizado en el entorno de un punto concreto, pero nos encontramos con problemas cuando queremos hacerlo en todo el dominio de f.

El principal problema se debe a que la interpolación de los datos puede resultar en una función muy oscilante o que no ajuste bien la indormación, dependiendo del valor de k. Esto se puede solucionar de cierta manera con el siguiente tipo de base de funciones.

Base lineal por partes

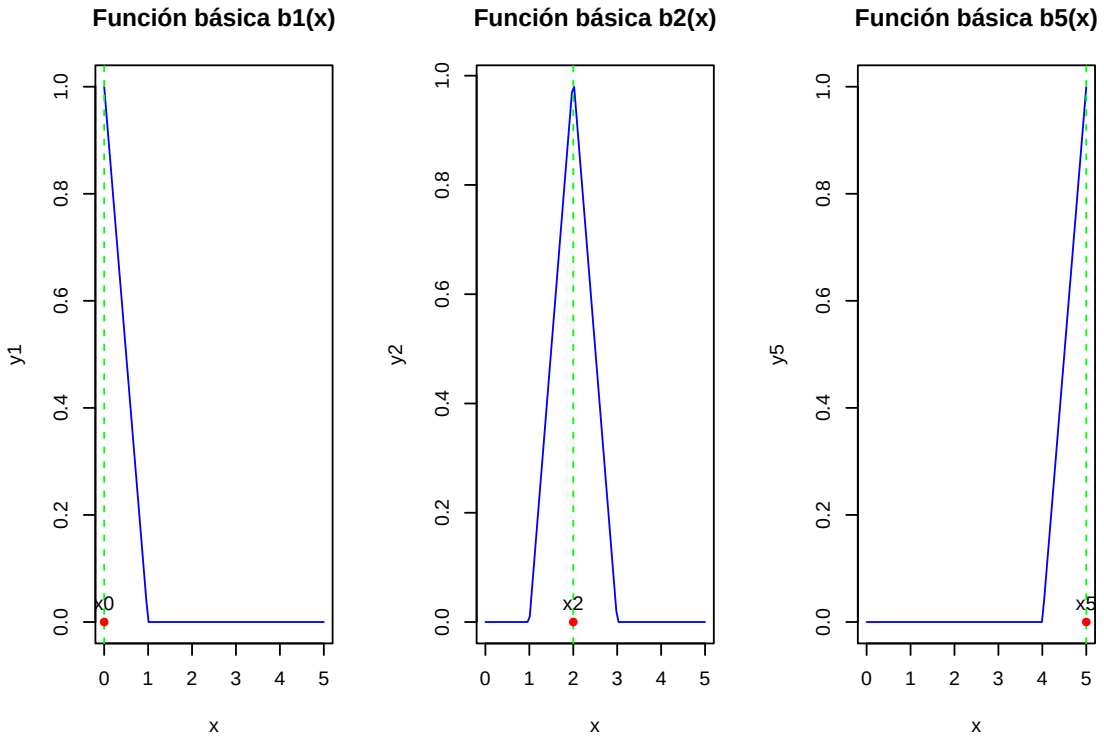
Consideremos ahora una partición de nodos $\{x_j^* : j = 1, \ldots, k\}$ del rango de la variable predictora x tal que $x_j^* > x_{j+1}^*$ y la base de funciones $\mathcal{B} = \{b_j(x)\}_{j=1}^k$ donde:

$$b_1(x) = \begin{cases} \frac{x_2^* - x}{x_2^* - x_1^*} & , si \;\; x < x_2^* \\ 0 \quad c.c. \end{cases}$$

$$b_j(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{j-1}^*}{x_j^* - x_{j-1}^*} & , si \;\; x_{j-1}^* < x < x_j^* \\ \frac{x_{j+1}^* - x}{x_{j+1}^* - x_j^*} & , si \;\; x_j^* < x < x_{j+1}^* \\ 0 \quad c.c \end{cases}$$

$$b_k(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{k-1}^*}{x_k^* - x_{k-1}^*} & , si \;\; x > x_{k-1}^* \\ 0 \quad c.c. \end{cases}$$

Ejemplo 3.2.1. Supongamos que el rango de x es de 0 a 5 y consideremos 6 nodos: $\{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$, entonces podemos representar las funciones $b_0(x)$, $b_2(x)$ y $b_5(x)$ como:


Función básica b1(x)
Función básica b2(x)
Función básica b5(x)
y1
y2
y5
x
x0
x2
x5
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0
1
2
3
4
5

Capítulo 4

Título del Capítulo

4.1. Primera sección

Apéndice A

Apéndice: Título del Apéndice

A.1. Primera sección

Apéndice B

Apéndice: Título del Apéndice

B.1. Primera sección

Bibliografía

JJ Allaire, Yihui Xie, Christophe Dervieux, Jonathan McPherson, Javier Luraschi, Kevin Ushey, Aron Atkins, Hadley Wickham, Joe Cheng, Winston Chang, and Richard Iannone. *rmarkdown: Dynamic Documents for R*, 2023. URL https://CRAN.R-project.org/package=rmarkdown. R package version 2.21.

Pedro L. Luque-Calvo. *Escribir un Trabajo Fin de Estudios con R Markdown*, 2017.

Pedro L. Luque-Calvo. *Cómo crear Tablas de información en R Markdown*, 2019.

R Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2016. URL https://www.R-project.org/.

RStudio Team. *RStudio: Integrated Development Environment for R*. RStudio, Inc., Boston, MA, 2015. URL http://www.rstudio.com/.

Techopedia. "definition - what does business intelligence (bi) mean?". Disponible en https://www.techopedia.com/definition/345/business-intelligence-bi, 2017.

Hadley Wickham, Winston Chang, Lionel Henry, Thomas Lin Pedersen, Kohske Takahashi, Claus Wilke, Kara Woo, Hiroaki Yutani, and Dewey Dunnington. *ggplot2: Create Elegant Data Visualisations Using the Grammar of Graphics*, 2023a. URL https://CRAN.R-project.org/package=ggplot2. R package version 3.4.4.

Hadley Wickham, Romain François, Lionel Henry, Kirill Müller, and Davis Vaughan. *dplyr: A Grammar of Data Manipulation*, 2023b. URL https://CRAN.R-project.org/package=dplyr. R package version 1.1.1.

Yihui Xie. *knitr: A General-Purpose Package for Dynamic Report Generation in R*, 2023. URL https://yihui.org/knitr/. R package version 1.42.