



PONTIFICIA  
**UNIVERSIDAD**  
**CATÓLICA**  
DEL PERÚ

# MODELO LINEAL GENERAL: INTRODUCCIÓN

Profesor: ALEX DE LA CRUZ H.

*MODELOS LINEALES 1*

*EST631*

- 1 Introducción
- 2 Modelo de regresión lineal general
- 3 Principales librerías R
- 4 Ejercicio y aplicación



# Introducción

# 1. Introducción

Se aborda la relación entre dos variables, distinguiendo entre una relación funcional y una estadística.

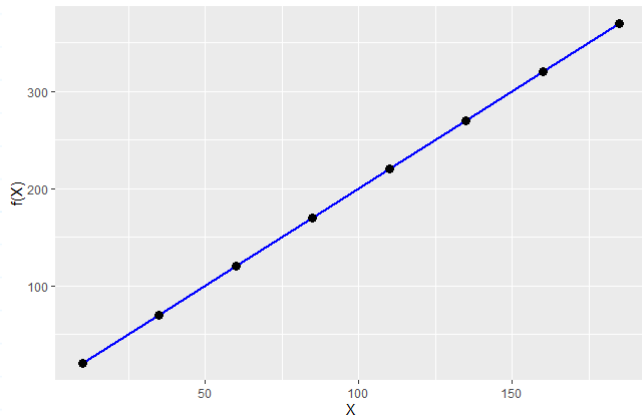
- Una **relación funcional** para un valor de  $X$ , la función  $f$  determina el valor correspondiente de  $y$  de la forma  $y = f(X)$ .

Ejemplo:

relación entre las ventas en dólares ( $y$ ) de un producto vendido a un precio fijo y el número de unidades vendidas ( $X$ ). Si el precio de venta es de \$2 por unidad:

$$y = 2X$$

# 1. Introducción

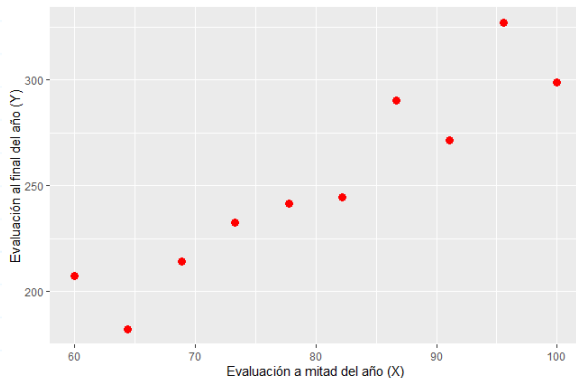


- Una **relación estadística**, no es perfecta. En general, las observaciones no caen directamente sobre la curva de la relación.

Ejemplo:

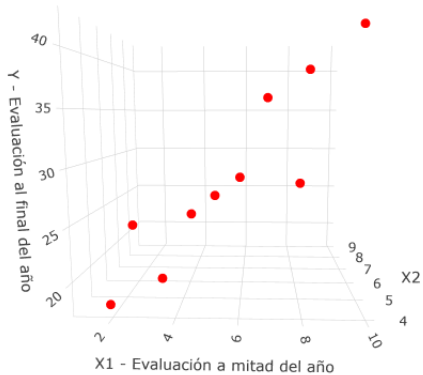
Evaluaciones de desempeño de 10 empleados a mitad ( $X$ ) y al final del año ( $y$ ).

# 1. Introducción



- Por ejemplo, dos empleados con evaluaciones de mitad de año de  $X = 80$  pueden obtener calificaciones muy diferentes en las evaluaciones de fin de año.

# 1. Introducción



Este mismo caso se observa, si agregamos más variables.



## 1. Introducción

# MODELO DE REGRESIÓN LINEAL

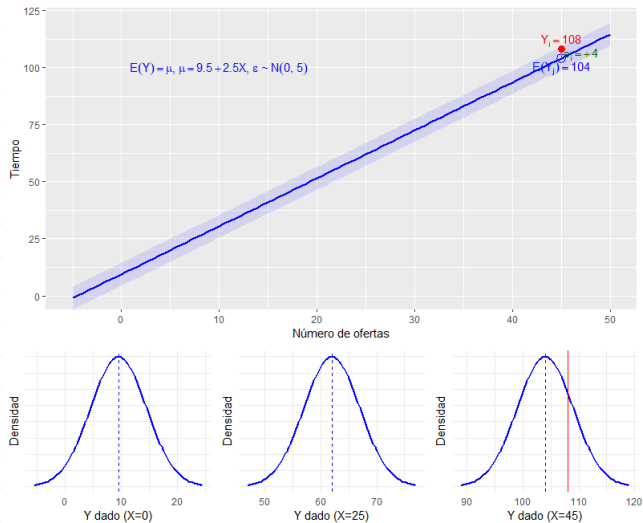
Dada una m.a. de  $y$  para un vector  $k$  de covariables les  $(x_{11}, \dots, x_{1k}, Y_1), \dots, (x_{n1}, \dots, x_{nk}, Y_n)$ .

El modelo de regresión lineal se expresa como:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i = \eta_i + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

- $\beta_j$  es un coeficiente de regresión,  $j = 0, 1, \dots, k$
  - Asumimos que  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  y  $\text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_{i'}) = 0$ ,  $\forall i \neq i'$ .
- 
- Existe una distribución de probabilidad de  $Y_i$  para cada nivel de  $X$ .
  - Las medias de estas distribuciones varían de manera sistemática con  $X$ .

# 1. Introducción



Dado el valor de  $\mathbf{x}_i = (1, x_{i1}, \dots, x_{ik})^\top$ , queremos encontrar un modelo que describa la relación entre  $y$  y  $\mathbf{x}_i$  mediante:

$$\mathbb{E}(Y_i | \mathbf{x}_i) = \mu_i = f(\mathbf{x}_i) = \eta_i = \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

donde  $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top$  es el vector de coeficientes de regresión.

# 1. Introducción

En general, es posible escribir el modelo en forma matricial:

$$\underset{n \times 1}{\mathbf{y}} = \underset{n \times p}{\mathbf{X}} \underset{p \times 1}{\boldsymbol{\beta}} + \underset{n \times 1}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Obs: En algunas partes consideraremos  $p = k + 1$

Además de que la relación entre  $\mathbf{y}$  y  $\mathbf{X}$  es lineal, asumimos que:

1. Los errores  $\varepsilon_i$  son independientes con media nula.
2. La varianza del error  $\varepsilon_i$  es constante.
3. Los errores  $\varepsilon_i$ , se distribuyen normalmente.
4.  $\text{Rank}(\mathbf{X}) = k + 1 = p$ .

# 1. Introducción

Esto significa:

1.  $\mathbb{E}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$ .
2.  $\text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbb{E}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^\top) = \sigma^2 \mathbf{I}$ .

$$\text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma^2 \end{pmatrix} = \sigma^2 \mathbf{I}$$

3.  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(0, \sigma^2 \mathbf{I})$  (distribución normal multivariada  $n$ -dimensional).
4. La matriz  $\mathbf{X}$  es de rango completo,  $\text{rank}(\mathbf{X}) = p$ . (Asumimos que  $n \gg p$ .)

El método de MCO se basa en la función de pérdida:  $S(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$ .  
Luego, el estimador de  $\boldsymbol{\beta}$  que minimiza esta función es:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

Esta solución coincide con el estimador de máxima verosimilitud (EMV).

# 1. Introducción

## DEFINICIÓN 1.

Una matriz simétrica  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es semidefinida positiva si:  $\forall z \in \mathbb{R}^n, \quad z^T A z \geq 0$ . Esto se denota como:

$$A \succeq 0$$

## TEOREMA 1.

*En el modelo de regresión lineal clásica, si se cumplen los supuestos, el estimador de mínimos cuadrados ordinarios (MCO),  $\hat{\beta}$  es el **mejor estimador lineal insesgado** (BLUE, por sus siglas en inglés).*

$$\forall \tilde{\beta} = Ay \text{ tal que } AX = I_k, \quad \text{Var}(\tilde{\beta}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \succeq 0$$



La solución a través del método de MCO coincide con el estimador de máxima verosimilitud, el cual también proporciona una solución para:

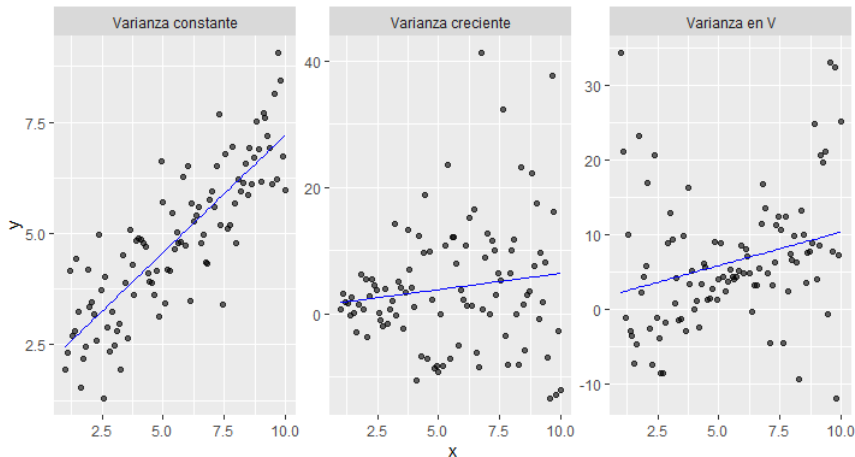
$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^\top (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})}{n - p}$$

## LIMITACIONES DEL MODELO CLÁSICO

1. Asume homocedasticidad (varianza constante  $\sigma^2$ )
2. Asume independencia entre observaciones ( $\text{Cov}(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$ )
3. No permite estructuras más complejas de dependencia o varianza heterogénea

# 1. Introducción

## LIMITACIONES DEL MODELO CLÁSICO



En muchos casos reales, los supuestos clásicos no se cumplen:

- Datos correlacionados: Medidas repetidas, diseños longitudinales, etc.
- Heterocedasticidad: La varianza puede cambiar entre grupos
- Estructuras de covarianza no diagonales: Autocorrelación en series de tiempo



# Modelo de regresión lineal general

## 2. Modelo de regresión lineal general

### MODELO DE REGRESIÓN LINEAL GENERAL (RLG)

Sea una muestra aleatoria de tamaño  $n$  de una variable respuesta  $Y$  dada una observación de  $k$  covariables:  $(Y_i, \mathbf{x}_i^\top)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . El modelo de RLG se expresa como:

$$Y_i = \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

donde  $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top$  es el vector de coeficientes de regresión.

- $\text{Var}(\epsilon_i) = \sigma_i^2$  representan las varianzas (heterocedasticidad cuando difieren).
- $\text{Cov}(\epsilon_i, \epsilon_j) = \sigma_{ij}$  representan las covarianzas entre errores.
- $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  para todo  $i \neq j$

## 2. Modelo de regresión lineal general

En forma matricial:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}_{n \times 1}, \quad \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}), \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \sigma_{23} & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \sigma_{n3} & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}_{n \times n}$$

donde  $\boldsymbol{\Sigma}$  es definida positiva:  $\mathbf{v}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v} > 0$  para todo  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n$

## 2. Modelo lineal general

- Los elementos  $\sigma_i^2 = \text{Var}(\epsilon_i)$  representan las varianzas (heterocedasticidad cuando difieren)
- Los elementos  $\sigma_{ij} = \text{Cov}(\epsilon_i, \epsilon_j)$  representan las covarianzas entre errores
- La matriz es simétrica:  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  para todo  $i \neq j$
- $\Sigma$  es definida positiva:  $\mathbf{v}^T \Sigma \mathbf{v} > 0$  para todo  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$



## 2. Modelo lineal general

Supuestos clave:

1. Relación lineal:  $\mathbb{E}(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$
2. Normalidad:  $\boldsymbol{\epsilon}$  sigue una distribución normal multivariada
3. Estructura de covarianza general:  $\text{Cov}(\boldsymbol{\epsilon}) = \boldsymbol{\Sigma}$

$\boldsymbol{\Sigma}$  captura posibles:

- Correlaciones entre observaciones ( $\Sigma_{ij} \neq 0$ )
- Heterocedasticidad ( $\Sigma_{ii} \neq \Sigma_{jj}$ )

## Casos particulares:

- Si  $\Sigma = \sigma^2 I_n$ : Regresión lineal clásica
- Si  $\Sigma$  es diagonal con  $\sigma_i^2$  distintos: Regresión con heterocedasticidad
- Si  $\Sigma$  tiene patrones estructurados: Modelos de correlación serial

## ESTIMADOR PARA $\beta$

Puede ser obtenido a través de dos métodos:

- Mínimos Cuadrados Generalizados (GLS). Basado en la siguiente función de pérdida:

$$Q(\beta) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)$$

- Estimador de máxima verosimilitud. Asumiendo que

$$\epsilon \sim N_n(\mathbf{0}, \Sigma) \Rightarrow \mathbf{y} \sim N_n(\mathbf{X}\beta, \Sigma)$$

## 2.1. Estimador para $\beta$

### MÉTODO DE MÍNIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS

El estimador de mínimos cuadrados generalizados (MCG o GLS) se obtiene minimizando:

$$Q(\beta) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)$$

Esto es resolver:

$$\frac{\partial Q}{\partial \beta} = \mathbf{0} \Rightarrow \frac{\partial Q}{\partial \beta} = -2\mathbf{X}^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) \Big|_{\beta=\hat{\beta}} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{X}^\top \Sigma^{-1} \mathbf{X} \hat{\beta} = \mathbf{X}^\top \Sigma^{-1} \mathbf{y}$$

## DEFINICIÓN 2.

Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  una matriz simétrica definida positiva. Entonces existe una única matriz triangular inferior  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$  tal que:  $A = LL^\top$ .

O, equivalentemente, existe una triangular superior  $U$  tal que:  $A = U^\top U$

## 2.1. Estimador para $\beta$

Este estimador también puede obtenerse transformando el modelo mediante una matriz  $\mathbf{C}$  tal que  $\mathbf{C}^\top \mathbf{C} = \mathbf{\Sigma}^{-1}$  (descomposición de Cholesky), y aplicando MCO sobre el modelo transformado:

$$\mathbf{y}^* = \mathbf{C}\mathbf{y}, \quad \mathbf{X}^* = \mathbf{C}\mathbf{X} \Rightarrow \hat{\beta} = (\mathbf{X}^{*\top} \mathbf{X}^*)^{-1} \mathbf{X}^{*\top} \mathbf{y}^*$$

Luego,

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}$$

### MÉTODO DE MÁXIMA VEROSIMILITUD

Los parámetros son:  $\theta = (\beta, \Sigma)^\top$

- La función de verosimilitud es:

$$L(\theta) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp \left( -\frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top \Sigma^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) \right)$$

- La log-verosimilitud es:

$$\ell(\theta) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top \Sigma^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)$$

Maximizar la log-verosimilitud equivale a minimizar:

$$Q(\beta) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)$$

Por tanto, la solución es equivalente al Método de mínimos cuadrados generalizados:

$$\hat{\beta} = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} y$$



Se puede mostrar que:

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}] = \beta$$

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = (\mathbf{X}^{\top} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1}$$

La estimación simultánea de  $\beta$  y  $\Sigma$  presenta un problema circular: Necesitamos  $\Sigma$  para estimar  $\beta$ . Necesitamos  $\beta$  para estimar  $\Sigma$ . Es necesario asumir una estructura para  $\Sigma$ .

### ALGUNOS CASOS PARTICULARES PARA $\Sigma$

#### 1. MCO clásico: errores iid

$$\Sigma = \sigma^2 I_n$$

- Varianzas constantes e independencia entre errores.
- El estimador de MCO es eficiente.

### ALGUNOS CASOS PARTICULARES PARA $\Sigma$

#### 2. Heterocedasticidad: varianzas distintas, no correlacionadas

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix}$$

- Las observaciones tienen diferentes niveles de variabilidad.
- No hay correlación entre errores.

## Maestría en Estadística | Alex de la Cruz

## a en Estadística | Alex de la Cruz

Alex de la Cruz

- estadística | Alex de la Cruz

### ALGUNOS CASOS PARTICULARES PARA $\Sigma$

#### 3. Autocorrelación: AR(1)

- $\sigma_e^2$  es la varianza marginal de cada error  $\varepsilon_i$ .
- $\rho$  es el coeficiente de autocorrelación de primer orden (correlación entre errores consecutivos).
- El elemento en la posición  $(i, j)$  de la matriz es  $\sigma^2 \rho^{|i-j|}$ . Así, los errores cercanos en el tiempo están más correlacionados que los distantes.
- La matriz es simétrica y los valores disminuyen geométricamente desde la diagonal.

## Maestría en Estadística | Alex de la Cruz

## a en Estadística | Alex de la Cruz

- estadística | Alex de la Cruz

- estadística | Alex de la Cruz

### ALGUNOS CASOS PARTICULARES PARA $\Sigma$

#### 5. Covarianza general conocida

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 & 0.2 \\ 0.5 & 1 & 0.4 \\ 0.2 & 0.4 & 1 \end{bmatrix}$$

- Caso general: matriz simétrica y definida positiva.
- Puede no tener estructura interpretable simple.



### SUPUESTOS ESTRUCTURALES SOBRE $\Sigma$

Debido a que  $\Sigma$  tiene demasiados parámetros, se imponen estructuras:

- Homoscedasticidad:  $\Sigma = \sigma^2 I$
- Heteroscedasticidad (diagonal):  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2)$
- Estructura parametrizada (por ejemplo, AR(1), MA(1), etc.)

### ESTIMACIÓN POR MÍNIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS (GLS)

1. Estimar  $\beta$  por MCO:

$$\hat{\beta}^{(0)} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

2. Calcular residuos:

$$\hat{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\beta}^{(0)}$$

3. Estimar  $\Sigma$ :

- Heteroscedasticidad:  $\hat{\Sigma} = \text{diag}(\hat{\varepsilon}_1^2, \dots, \hat{\varepsilon}_n^2)$
- General:  $\hat{\Sigma} = \frac{1}{n} \hat{\varepsilon} \hat{\varepsilon}^\top$

4. Aplicar GLS:

$$\hat{\beta}_{\text{GLS}} = (\mathbf{X}^\top \hat{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \hat{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}$$

### ESTIMACIÓN POR MÁXIMA VEROSIMILITUD (MV).

Bajo normalidad, se maximiza la log-verosimilitud:

$$\ell(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log |\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

Requiere:

- Asumir una estructura parametrizada para  $\Sigma$
- Optimización conjunta de  $\boldsymbol{\beta}$  y parámetros de  $\Sigma$



# Principales librerías R

## 2.3. Principales librerías R

### 1. `nlme` (Nonlinear mixed effects):

```
1 library(nlme)
2 model <- gls(y ~ x1 + x2, data = datos,
3             weights = varFixed(form = ~ x1), # Estructura de varianza
4             correlation = corAR1(form = ~ 1 | grupo)) # serial
5 summary(model)
```

- Heterocedasticidad con funciones como `varIdent`, `varPower`, `varFixed`, etc.
- Correlaciones temporales o espaciales en los residuos (e.g., `corAR1`).

### 2. **glmmTMB** (Generalized linear mixed models with template model builder):

```
1 library(glmmTMB)
2 model <- glmmTMB(y ~ x1 + x2 + (1 | grupo),
3                 dispformula = ~ x1, # Varianza dependiente de x1
4                 data = datos)
5 summary(model)
```

- Maneja heterocedasticidad y correlación en los residuos.
- Soporta correlaciones (AR1, etc.) en los residuos con argumento *time* o *ar1()*.

3. **car** (Companion to applied regression): No modela directamente, pero incluye pruebas para detectar heterocedasticidad (e.g., `ncvTest`, `leveneTest`), útiles para justificar el uso de los paquetes anteriores.



# Ejercicio y aplicación



### Ejercicio 1

Supón el siguiente modelo:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \quad \text{con } \text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2 x_i^2$$

donde  $x_i > 0$  para todo  $i$ .

1. Encuentre la forma adecuada de estimar  $\beta$
2. Aplicar MCO sobre una versión equivalente con errores homocedásticos.

### Ejercicio 2

Plantee y demuestre que el siguiente estimador es el estimador lineal insesgado de varianza mínima (BLUE, por sus siglas en inglés) para  $\beta$ :

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^\top \Sigma^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \Sigma^{-1} \mathbf{y}$$

1. Defina el espacio de estimadores lineales insesgados para  $\beta$  en el modelo con  $\text{Var}(\epsilon) = \Sigma$ .
2. Verifique que  $\hat{\beta}$  es lineal en  $\mathbf{y}$  e insesgado.
3. Muestre que tiene menor varianza dentro de la clase de estimadores lineales insesgados.

### Aplicación

Utilizaremos el conjunto de datos `Orange`, incluido en el programa R, que registra el crecimiento circunferencial (en mm) de 5 árboles de naranja (`Tree`) a lo largo del tiempo (age en días).

- Ajustar un modelo que permita varianzas distintas por árbol
- Comparar este modelo con un MCO tradicional
- Graficar los residuos de ambos modelos
- **Tarea:** ¿Por qué es importante modelar la heterocedasticidad en este caso?

### Desarrollo en clase