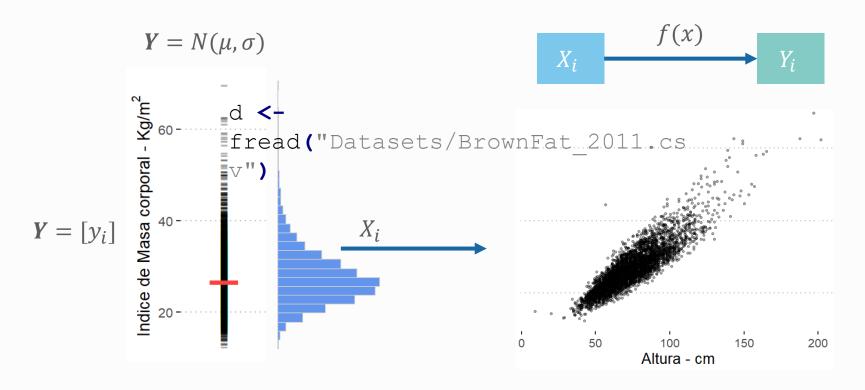
# Estadística y modelos predictivos

Santiago Caño Muñiz

All models are wrong, but some are useful George Box

### La medida

Data in an uncertain world, perfect knowledge of the uncertainty

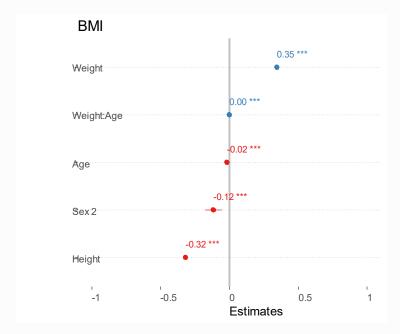




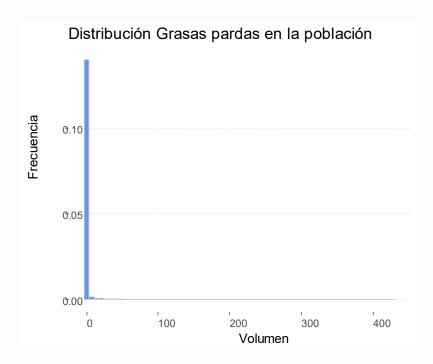
### Presentar resultados

Tablas vs imágenes

Coef.	2.50%	97.50%	Estimate
(Intercept)	52.84821	54.08622	53.46721
Weight	0.341727	0.35174	0.346734
Age	-0.02391	-0.01199	-0.01795
Height	-0.31998	-0.31354	-0.31676
Sex2	-0.17377	-0.05999	-0.11688
Weight:Age	0.000225	0.000387	0.000306



¿Qué hacemos cuando los datos no son normales?



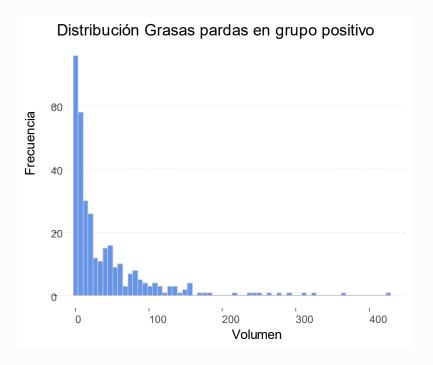


### El modelo

**Generalización** de modelos lineares



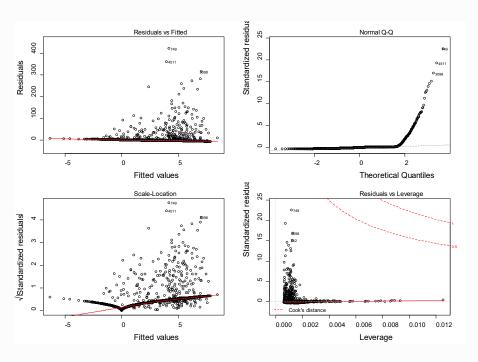
GLM



#### Modelando la distribución

$$\begin{cases} Y \sim N(\mu, \sigma^2) \\ \mu \sim \beta_1 X_i + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

GLM

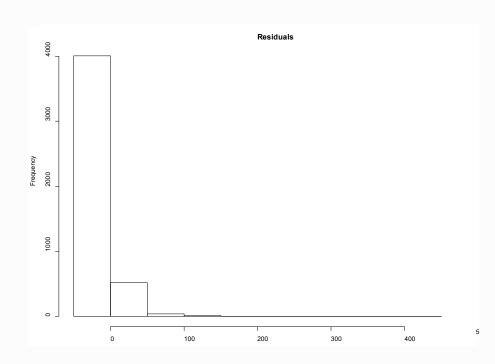


#### Modelando la distribución

$$\begin{cases} Y & (\mu, \sigma^2) \\ \mu \sim \beta_1 X_i + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y \sim \boldsymbol{g}(\mathbb{E}(\boldsymbol{y}), \boldsymbol{Var}(\boldsymbol{y}), \mathbb{P}(\boldsymbol{0})) \\ \mathbb{E}(\boldsymbol{y}) = \mu \sim \beta_1 X_i + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

GLM



#### Modelando la distribución

$$\begin{cases} Y \times V(\mu, \sigma^2) \\ \mu \sim \beta_1 X_i + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y \sim g(\mathbb{E}(y), Var(y), \mathbb{P}(0)) \\ \mathbb{E}(y) = \beta_1 X_i + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

### ¿Puede un tratamiento X curar la tuberculosis?

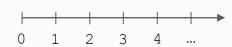
Pensar en la **pregunta** adecuada

Resultado del tratamiento en los pacientes

Positivo|Negativo

Mejora|Empeora|
Transplate|Defunción

Binomial Multinomial Logistica Número de bacterias en una biopsia del paciente



Poisson N-binomial Concentración de antibiótico para inhibir el crecimiento de la bacteria



Gaussian T-Student Gamma Tweedie

GLM

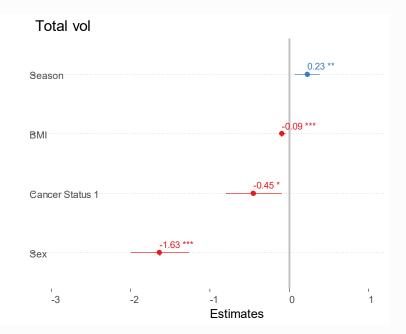
#### Modelando la distribución

Modelar la distribución con glmmTMB

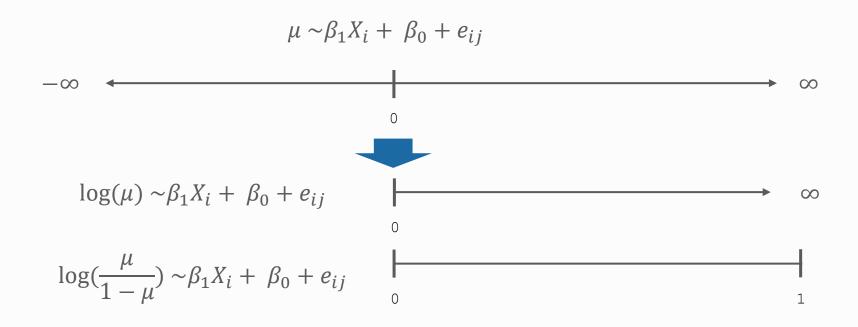
```
library(glmmTMB)
# Iqual que m6.1 pero con notación GLM explicita
m6.1.1 <- glmmTMB (Total vol ~ BMI + Cancer Status + Sex + Season,
           data = d, family = gaussian)
m6.2 <- glmmTMB(Total vol ~ BMI + Cancer Status + Sex + Season,
           data = d, family = tweedie(link = "log")) # Modelando la distribución
AIC (m6.1, m6.1.1, m6.2)
> df
            AIC
m6.1 6 39960.32
m6.1.1 6 39960.32
m6.2 7 5083.34
```

Entender el resultado

```
Family: tweedie ( log )
Formula:
                Total vol ~ Cancer Status + Sex + Season
Data: d[, `:=`(Cancer Status, as.factor(Cancer Status))]
    AIC
            BIC logLik deviance df.resid
 5104.6 5143.2 -2546.3 5092.6
                                    4586
Overdispersion parameter for tweedie family (): 49.3
Conditional model:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
                        0.58791 8.642 < 2e-16 ***
(Intercept)
            5.08051
             -0.08965 0.01883 -4.761 1.93e-06 ***
BMI
Cancer Status1 -0.44755 0.17739 -2.523 0.01164 *
             -1.63311 0.18545 -8.806 < 2e-16 ***
Sex
            Season
Signif. codes: 0 \***' 0.001 \**' 0.01 \*' 0.05 \'.' 0.1 \' 1
# Representar el resultado
plot model (m6.2, sort.est = T, show.values = TRUE)
```

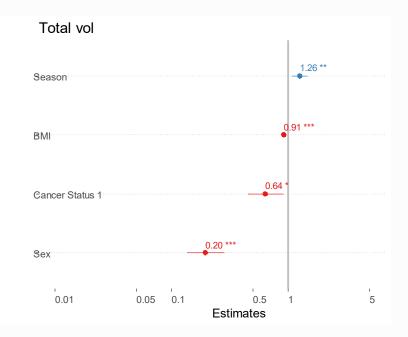


¿Qué es una función de enlace?



Entender el resultado

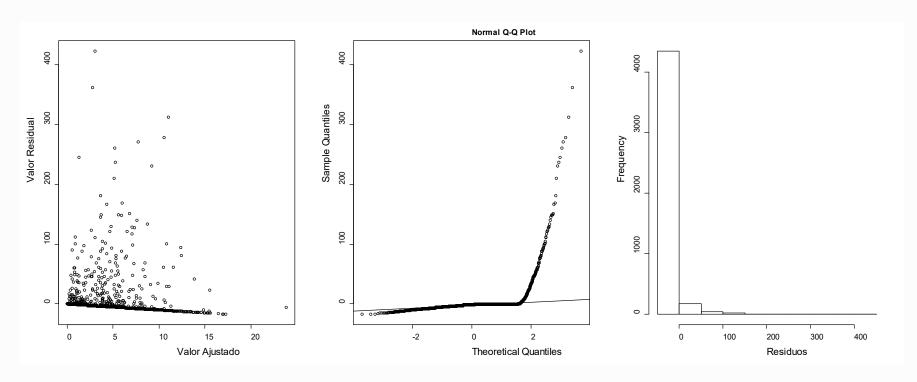
```
Family: tweedie ( log )
Formula:
               Total vol ~ Cancer Status + Sex + Season
Data: d[, `:=`(Cancer Status, as.factor(Cancer Status))]
    AIC
            BIC logLik deviance df.resid
 5104.6 5143.2 -2546.3 5092.6
                                    4586
Overdispersion parameter for tweedie family (): 49.3
Conditional model:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) 2.80629
                        0.34430 8.151 3.62e-16 ***
Cancer Status1 -0.37062 0.17799 -2.082 0.03731 *
Sex
            -1.68022
                        0.18626 -9.021 < 2e-16 ***
            Season
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
# Representar el resultado
plot model (m6.2, sort.est = TRUE, show.values = TRUE,
             transform = "exp")
```



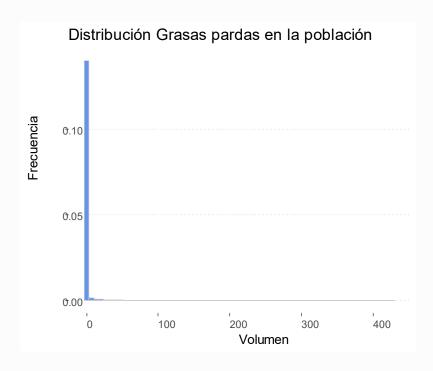
# Aprogramar

Por ejemplo

Mucho por mejorar



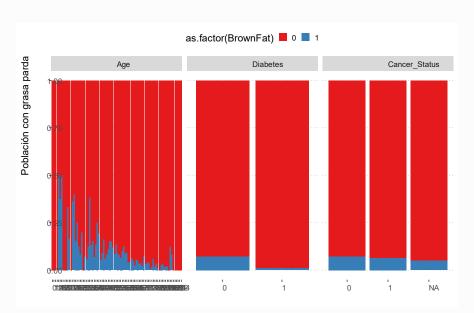
Inspeccionar la dispersion y exceso de 0



#### Modelando los ceros

- La mayor parte de la población carece de grasa parda
  - Podría existir un proceso que "activa" la presencia de grasa parda
  - Una vez activada la presencia de grasa parda, la masa empieza a crecer
- La inspección visual de variables separadas nos puede dar una pista de que factores participan en la generación de 0

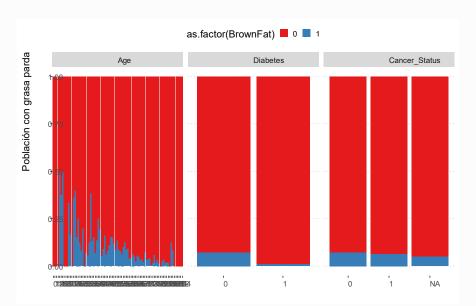
Inspeccionar el exceso de 0



#### ¿Cómo explorar la densidad en 0?

- Buscamos relacionar distintas variables con la probabilidad de y = 0
  - Contar y = 0
  - − Contar y != 0
  - Comparar

Inspeccionar el exceso de 0



```
# Seleccionar variables
d[, .(BrownFat, Age, Diabetes, Cancer Status)] %>%
 # Agregar entorno a la variable de interes
 melt.data.table(., id.vars = "BrownFat") %>%
 # Contar obs. En cada categoría
             .[, .(Count = .N),
             by = .(variable, value, BrownFat)] %>%
 # Graficar
ggplot(., aes(x = as.factor(value), y = Count,
               fill = as.factor(BrownFat)) ) +
 # Formato barra. Apilar por color
 geom bar(stat = "identity", position = "fill") +
 # Un panel para cada variable
 facet wrap (~ variable,
             scales = "free x", nrow = 1)
```

Modelar el exceso de 0

$$\begin{cases} \mathbb{E}(\mathbf{y}) = \beta_1 X_i + \dots + \beta_0 + e_{ij} \\ \mathbb{P}(\mathbf{y} = \mathbf{0}) = \beta_1 X_i + \dots + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

#### Modelando los ceros

- El volumen de grasa parda depende de
  - BMI
  - Cancer
  - Sexo
  - Season
- La PROBABILIDAD de tener o no grasa parda depende de
  - Diabetes
  - Edad

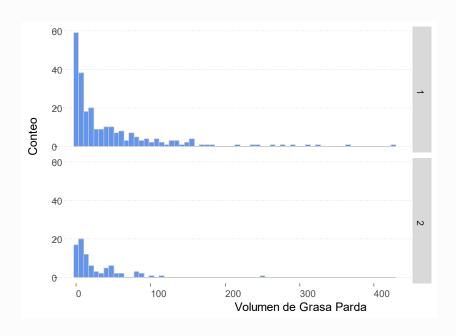
Modelar la dispersion y exceso de 0

```
summary (m7.1)
>...
Conditional model:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
                                   6.652 2.90e-11 ***
             3.73905
                         0.56212
(Intercept)
              -0.07472
                         0.01916 -3.900 9.64e-05 ***
BMI
Cancer Status1 -0.27970
                         0.17701 -1.580 0.11407
Sex2
              -1.53802
                         0.18670 -8.238 < 2e-16 ***
             0.23400
                         0.07596
                                   3.081 0.00206 **
Season
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 0.1
Zero-inflation model:
           Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -4.62769
                      1.19632 -3.868 0.00011 ***
Diabetes
           2.14340
                      0.51858 4.133 3.58e-05 ***
Age
            0.07682
                       0.01473
                                5.216 1.83e-07 ***
```

#### Modelando los ceros

- El volumen de grasa parda depende de
  - BMI
  - Cancer
  - Sexo
  - Season
- La PROBABILIDAD de tener o no grasa parda depende de
  - Diabetes
  - Edad

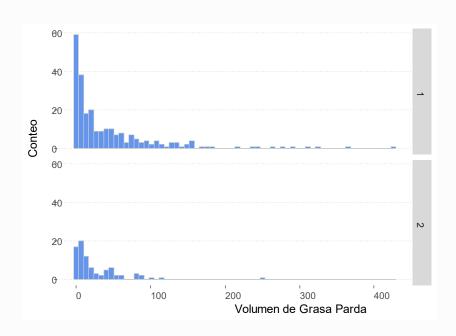
Inspeccionar la dispersion



#### ¿Cómo explorar la densidad en 0?

- Buscamos explorar la extensión de los datos por subgrupos
  - Histogramas
  - Diagramas de cajas
  - Diagramas de violín
  - ....

Inspeccionar la dispersion



¿Cómo explorar la densidad en 0?

Modelar el exceso de 0

$$\begin{cases} \mathbb{E}(\mathbf{y}) = \beta_1 X_i + \dots + \beta_0 + e_{ij} \\ \mathbf{Var}(\mathbf{y}) = \beta_1 X_i + \dots + \beta_0 + e_{ij} \end{cases}$$

#### Modelando los ceros

- El volumen de grasa parda depende de
  - Season
  - BMI
  - Cancer
- La variabilidad del volumen de grasa parda depende de
  - Sexo

Modelar el exceso de 0

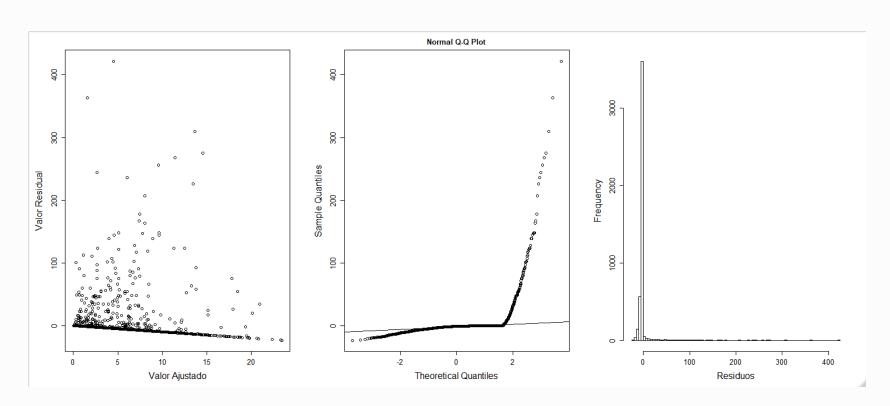
```
summary (m7.2)
>...
Conditional model:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
                         0.56428 6.287 3.23e-10 ***
(Intercept) 3.54772
                         0.01934 -4.720 2.36e-06 ***
              -0.09128
BMI
Cancer Status1 -0.45346
                         0.18075 -2.509 0.0121 *
Sex2
             -1.63022 0.20829 -7.827 5.01e-15 ***
           0.20645
                         0.07833 2.636
                                        0.0084 **
Season
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**'
Dispersion model:
           Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) 3.73872
                      0.05503 67.94 < 2e-16 ***
                      0.10654 4.75 2.06e-06 ***
Sex2
           0.50576
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.'
```

#### Modelando los ceros

- El volumen de grasa parda depende de
  - Season
  - BMI
  - Cancer
  - Season
- La variabilidad del volumen de grasa parda depende de
  - Sexo

### Validar

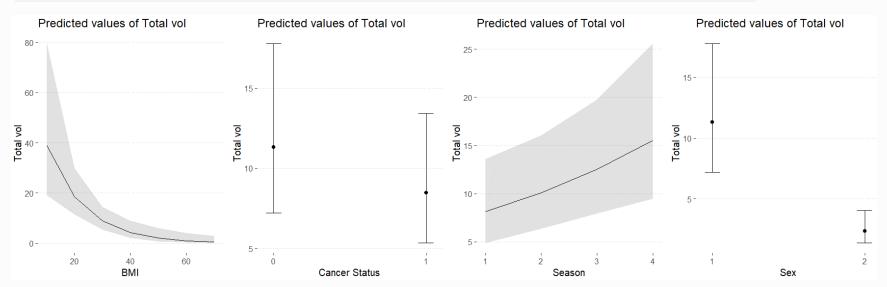
Siempre verificar



### Como presenter los resultados

¿Qué hacer cuando el modelo es muy complejo?

```
p <- plot_model(m7.3, type = "pred", vcov.fun = "vcovCL", grid = T)
do.call("grid.arrange", c(p, ncol = 4))</pre>
```



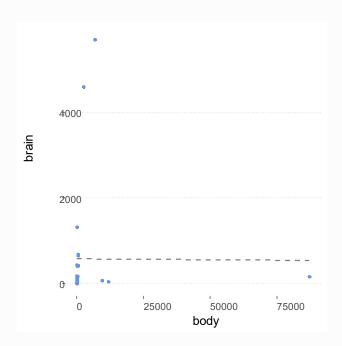
# Aprogramar

Por ejemplo

Cuando los dantos no son normales

#### Transformaciones

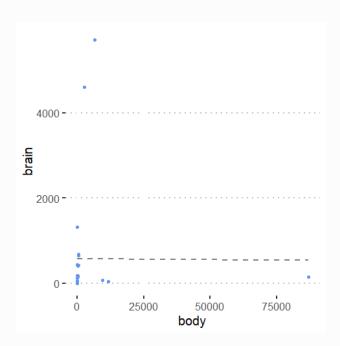
- Cuando los datos son:
  - No lineales
- Transformaciones monotónicas
  - Normalizar =  $\frac{x_i \mu}{\sigma^2}$
  - Logaritmo = log(x)
  - Ratios =  $\frac{x_1}{x_2}$
- Cuidado, cuantas más transformaciones hagamos, más difícil es interpretar el modelo



Cuando los dantos no son normales

#### Transformaciones

- Cuando los datos son:
  - No lineales
- Transformaciones monotónicas
  - Normalizar =  $\frac{x_i \mu}{\sigma^2}$
  - Logaritmo = log(x)
  - Ratios =  $\frac{x_1}{x_2}$
- Cuidado, cuantas más transformaciones hagamos, más difícil es interpretar el modelo





### El modelo

Modelos Aditivos



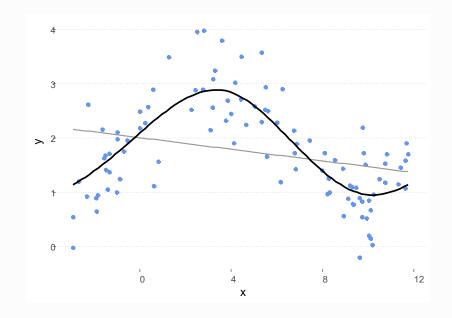
Cuando los dantos no son normales

#### Modelos aditivos

- Cuando los datos son:
  - No lineales
  - No monotónicas
- Polinomios

$$- \quad \mathbb{E}(y) = a + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_1^2 + \dots + \beta_n x_n^n + \varepsilon$$

- Modelos aditivos
  - $\mathbb{E}(y) = a + f_1(x_1) + f_2(x_2) + \dots + f_n(x_n) + \varepsilon$



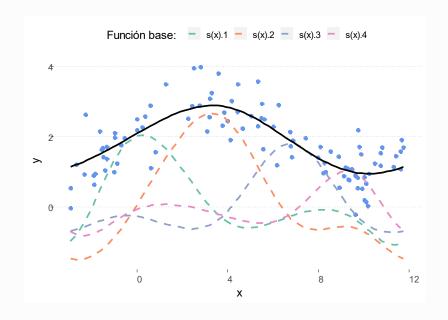
Cuando los dantos no son normales

#### Función base

- Cuando los datos son:
  - No lineales
  - No monotónicas
- Polinomios

$$- \quad \mathbb{E}(y) = a + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_1^2 + \dots + \beta_n x_n^n + \varepsilon$$

- Modelos aditivos
  - $\mathbb{E}(y) = a + f_1(x_1) + f_2(x_2) + \dots + f_n(x_n) + \varepsilon$



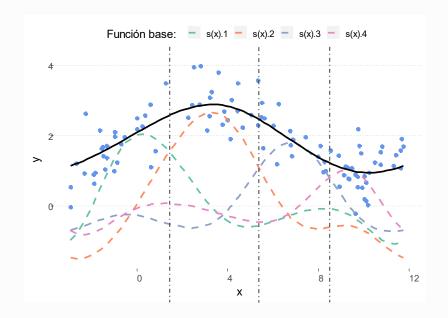
Cuando los dantos no son normales

#### Función base

- Cuando los datos son:
  - No lineales
  - No monotónicas
- Polinomios

$$- \quad \mathbb{E}(y) = a + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_1^2 + \dots + \beta_n x_n^n + \varepsilon$$

- Modelos aditivos
  - $\mathbb{E}(y) = a + f_1(x_1) + f_2(x_2) + \dots + f_n(x_n) + \varepsilon$



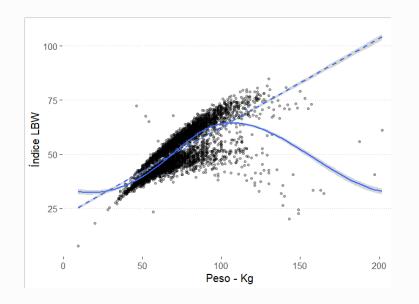
### Modelos aditivos

mgcv

```
mgcv::gam
```

### Modelos aditivos

Regresión no lineal simple



```
ggplot(d,
    aes(x = Weight , y = LBW)) +
    geom_point(alpha = 0.3) +

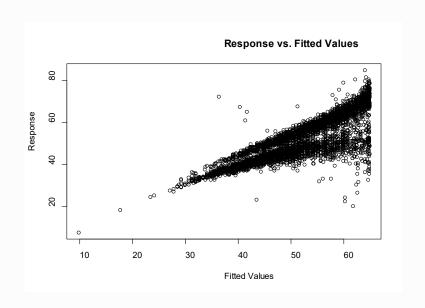
stat_smooth(method = "lm", linetype = 2) +
    stat_smooth(method = "gam",

    labs(x = "Peso - Kg", y = "Índice LBW")

m0 <- lm(LBW ~ Weight, data = d)

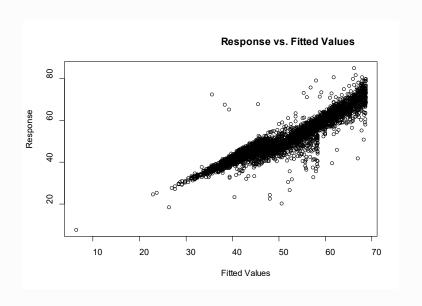
m1 <- gam(LBW ~ s(Weight , k = 3),
    data = d, method = "REML")</pre>
```

Verificar el modelo



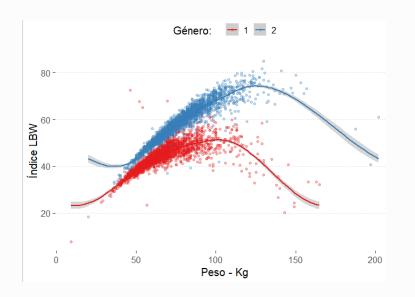
```
gam.check(m)
>Method: REML Optimizer: outer newton
full convergence after 7 iterations.
Gradient range [-0.0008537355, 0.0008522113]
(score 13091.98 & scale 13.02218).
Hessian positive definite, eigenvalue range
[0.5001828,2419.501].
Model rank = 4 / 4
Basis dimension (k) checking results. Low p-value (k-
index<1) may
indicate that k is too low, especially if edf is close to
k'.
          k' edf k-index p-value
                    0.97
                            0.03 *
s(weight)
```

Verificar el modelo



```
m \leftarrow gam(LBW \sim s(weight, k = 9), data = d,
            method = "REML")
gam.check(m)
>Method: REML Optimizer: outer newton
full convergence after 7 iterations.
Gradient range [-0.0008537355, 0.0008522113]
(score 13091.98 & scale 13.02218).
Hessian positive definite, eigenvalue range
[0.5001828,2419.501].
Model rank = 4/4
Basis dimension (k) checking results. Low p-value (k-
index<1) may
indicate that k is too low, especially if edf is close to
k'.
             k' edf k-index p-value
s(weight) 8.00 7.67 1.01
                               0.79
```

Modelo mixto



```
ggplot(d,
    aes(x = Weight , y = LBW, y = Sex)) +
    geom_point(alpha = 0.3) +

stat_smooth(method = "lm", linetype = 2) +
    stat_smooth(method = "gam",
    formula = y ~ s(x, k = 3, bs = "cc")) +
    labs(x = "Peso - Kg", y = "Índice LBW")

m1.3 <- gam(LBW ~ s(Weight , k = 9) + Sex,
    data = d,
    method = "REML")</pre>
```

Modelo mixto

```
ggplot(d,
    aes(x = Weight , y = LBW, y = Sex)) +
    geom_point(alpha = 0.3) +

stat_smooth(method = "lm", linetype = 2) +
    stat_smooth(method = "gam",
    formula = y ~ s(x, k = 3, bs = "cc")) +
    labs(x = "Peso - Kg", y = "Índice LBW")

m1.3 <- gam(LBW ~ s(Weight , k = 9) + Sex,
    data = d,
    method = "REML")

summary(m1.3)</pre>
```

## Aprogramar

Por ejemplo

## Las interacciones

Como expresarlas en mgcv

$$y \sim s(x1) + s(x1)$$

• 2 variables aditivas

 $y \sim s(x1, x2)$ 

• 2D-Interacción aditiva, misma curvatura

 $y \sim te(x1, x2)$ 

• 2D-Interacción aditiva, diferente curvatura

 $y \sim te(x1) + s(x2) + ti(x1, x2)$ 

• 2D curva, interacción independiente

#### Las interacciones

Comparar entre modelos aditivos

```
m2 \leftarrow gam(LBW \sim s(weight, bs = "fs", by = sex),
           data = d, method = "REML") # Peso modulado por sexo
m3 <- gam(LBW ~ s(weight) + height, # Peso combinado con regression lineal altura
           data = d, method = "REML")
m4 <- gam(LBW ~ s(weight) + s(height) ,
                                      # Peso combinado con curva altura
           data = d, method = "REML")
m5 <- gam(LBW ~ s(weight, height) + s(weight) + s(height),
           data = d, method = "REML") # Reg. curva de peso, curva altura e inteacción
AIC(m, m2, m3, m4, m5) \% data.table(., keep.rownames = T) \% .[order(AIC)]
> rn df
              AIC
1: m5 36.59825 22645.69
2: m2 11.42847 24285.65
3: m4 17.63645 25448.30
4: m3 11.83294 25675.65
5: m1.1 10.78283 25993.12
```

## Modelos no lineales

Criterios de información

```
summary (m3)
Parametric coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -46.905749 1.000730 -46.87 <2e-16 ***
height 0.594772
                       0.006038 98.50 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.'
0.1 ' 1
Approximate significance of smooth terms:
           edf Ref.df
                         F p-value
s(weight) 8.695 8.97 958.4 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.'
0.1 ' ' 1
R-sq.(adj) = 0.883 Deviance explained = 88.3%
-REML = 12856 Scale est. = 11.73 n = 4842
```

```
summary (m5)
Parametric coefficients:
          Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 51.5465 0.0359 1436 <2e-16
* * *
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05
'.' 0.1 ' ' 1
Approximate significance of smooth terms:
                  edf Ref.df
                                  F p-value
s(weight, height) 25.312 27.00 256.475 <2e-16 ***
s(weight)
            1.000 1.00 1.149 0.284
s(height) 8.005 8.71 115.501 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05
'.' 0.1 ' ' 1
R-sq.(adj) = 0.938 Deviance explained = 93.8%
-REML = 11380 Scale est. = 6.2417 n = 4842
```

## Modelos no lineales

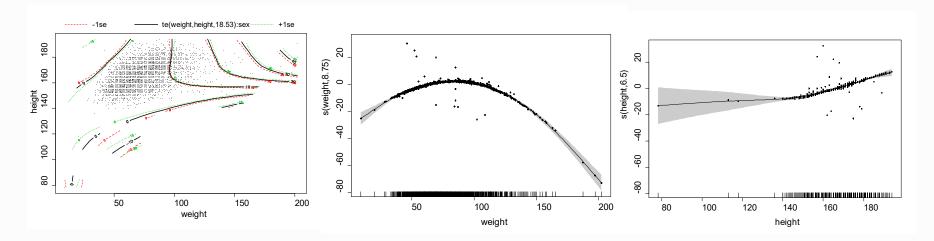
Criterios de información

#### Funciones curvas vs Tensores

- Using the usual s () function for the smooth for interactions uses thin plate splines.
- In this option isotropy is assumed, i.e. the same amount of smoothing is used in both directions (time and month).
- This could be reasonable for spatial fitting, or for interactions where both variables are in the same unit, but not in our case.
- For interactions between variables that should not be smoothed with the same amount, we can use tensor products te()

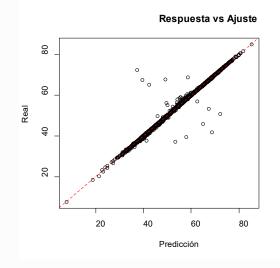
## Validación visual

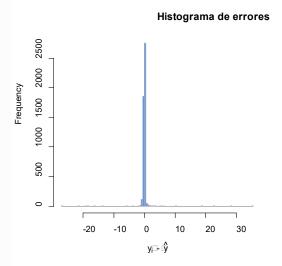
Efectos individuales

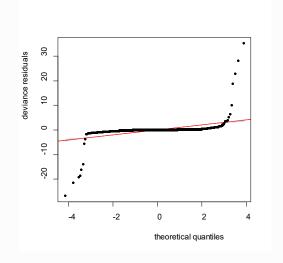


## Validación visual

Efectos individuales



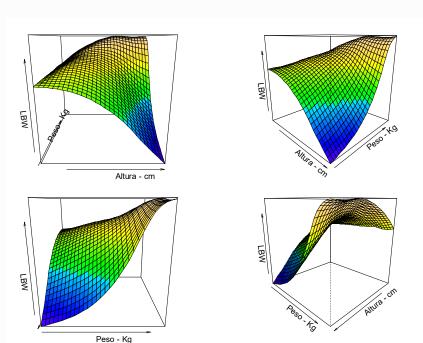




## Presentar resultados

Efectos combinados - gráficos isobáricos

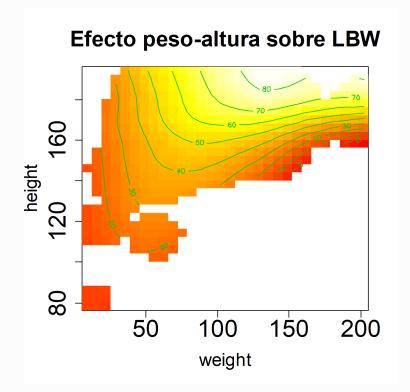
 El paquete mgcv contiene herramientas preinstaladas muy potentes para representación visual



## Presentar resultados

Efectos combinados - gráficos isobáricos

 El paquete mgcv contiene herramientas preinstaladas muy potentes para representación visual





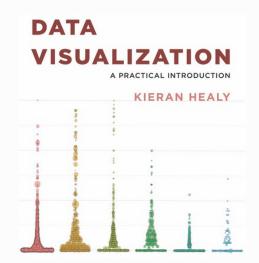
## Recordar

¡Cuidado con el sobre-ajuste!

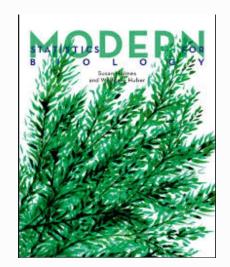


## Para saber más

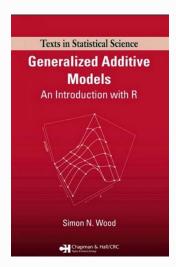
Libros de referencia



http://socviz.co/



https://web.stanford.edu/cla ss/bios221/book/introductio n.html



Generalized Additive Models: An Introduction with R, S Wood



# iGracias por vuestro tiempo!