Instituto Tecnológico Autónomo de México



Una tesis extendida $(\overline{\text{tesis}})$

Tesis

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

LICENCIADO EN MATEMÁTICAS APLICADAS

Presenta

Valeria Aurora Pérez Chávez

Asesor: Ernesto Juvenal Barrios Zamudio

«Con fundamento en los artículos 21 y 27 de la Ley Federal del Derecho de Autor y como titular de los derechos moral y patrimonial de la obra titulada "Una tesis extendida (tesis)", otorgo de manera gratuita y permanente al Instituto Tecnológico Autónomo de México y a la Biblioteca Raúl Bailléres Jr., la autorización para que fijen la obra en cualquier medio, incluido el electrónico, y la divulguen entre sus usuarios, profesores, estudiantes o terceras personas, sin que pueda percibir por tal divulgación una contraprestación.»

VALERIA AURORA PEREZ CHAVEZ
FECHA

FIRMA

Agradecimientos

Agradezco a facu por ser tan chingona y a Mike por pasarme el formato. Salu2.

EL SERCH

Índice general

1.	Intr	roducción	1					
2.	Juli	a	4					
	2.1.	Reproducibilidad	4					
	2.2.	Instalación	5					
	2.3.	Símbolo del sistema	6					
		2.3.1. Multithreading	6					
	2.4.		7					
		2.4.1. Operaciones básicas	8					
		2.4.2. Strings (secuencias de caracteres)	9					
		2.4.3. Funciones	10					
		2.4.4. Vectores y Matrices	11					
			13					
		2.4.6. <i>DataFrames</i>	14					
			15					
3.	Python							
	3.1.	Listas	22					
	3.2.	Paquetes	23					
		3.2.1. NumPy	23					

		3.2.2. pandas										
		3.2.3. os										
		3.2.4. scikit-learn										
		3.2.5. itertools										
	3.3.	Jupyter										
		3.3.1. Julia										
		3.3.2. R										
4.	${f R}$	32										
	4.1.	Función lm										
5.	Aju	ste de polinomios 36										
	5.1.	El problema										
		5.1.1. Método de mínimos cuadrados 3'										
	5.2.	Los datos										
	5.3.	Planteamiento del problema										
	5.4.	Número de condición y precisión de la solución 40										
	5.5.	Métodos para solucionar el problema										
		5.5.1. <i>GLM</i>										
		5.5.2. Descomposición QR versión económica 4										
		5.5.3. Descomposición de valores singulares 49										
		5.5.4. <i>Polynomials</i>										
	5.6.	Evaluación de los métodos										
	5.7.	Opinión de la autora										
6.	Aná	lisis de Regresión 63										
	6.1.	El modelo										
	6.2.	Los datos										
	6.3.	Planteamiento del problema										
	6.4	Regresiones 60										

		6.4.1. Observaciones	70				
	6.5.	Resultados y Conclusiones	74				
7.	MD	opt	77				
	7.1.	Metodología completa	78				
	7.2.	Criterio MD	79				
	7.3.	Algoritmo de intercambio	83				
	7.4.	Función MDopt	86				
	7.5.	Comparación entre lenguajes	87				
	7.6.	7.6. Ejemplos y resultados					
		7.6.1. Ejemplo 1 - Proceso de moldeo por inyección $$	91				
		7.6.2. Ejemplo 2	100				
8.	Con	clusiones	105				
Α.	Ext	ras	107				

Índice de algoritmos

Índice de tablas

2.1.	Operaciones básicas en Julia	8
6.1.	Resultados para el modelo fit10 con 2.5 millones de observaciones en Julia	75
7.1.	Datos para el ejemplo 1	92
7.2.	Modelos con la probabilidad posterior más alta para el	
	ejemplo 1	92
7.3.	Ejemplo 1, Colapsado en los factores A, C, E y H	94
7.4.	Resultados para el ejemplo 1	99
7.5.	Datos para el ejemplo 2	100
7.6.	Resultados para el ejemplo 2	104

Índice de figuras

2.1.	Ejemplo de importación de un dataframe	15
2.2.	Encabezado de los datos sobre las elecciones en EUA	
	recabados por Douglas Hibbs	18
3.1.	Pantalla principal de Jupyter	28
3.2.	Archivo generado con Python en Jupyter	29
3.3.	Archivo generado con Julia en Jupyter	30
3.4.	Ejecutar R desde el navegador de Anaconda	30
3.5.	Archivo generado con R en Jupyter	31
5.1.	Conjunto de datos fillip para el ajuste del polinomio	39
5.2.	Resultados del polinomio grado 5	57
5.3.	Resultados del polinomio grado 6	58
5.4.	Resultados del polinomio grado 10	58
5.5.	Tiempos de ejecución para cada método	59
7.1.	Diagrama de metodología descrita por Meyer et al. (1996)	80
7 2	Diagrama de la función MDont	87

Capítulo 1

Introducción

"I always promote Julia among friends and colleagues in Latin America, even when it has been difficult to convince them because of the scarce resources of Julia in Spanish. I firmly believe in open access knowledge without barriers (either language barriers, accessibility, or others), and I will always advocate for that" Community (2022). Las palabras de la chilena Pamela Bustamente, usuaria de Julia, engloban la razón de ser de esta tesis.

Mi camino con Julia comenzó a principios del 2021 cuando tuve la oportunidad de trabajar en el Instituto Mexicano del Seguro Social (IMSS). Julia fue la herramienta que utilice para desarrollar un proyecto que estaba fundamentado en estadística bayesiana y requería de una gran cantidad de simulaciones. No tarde mucho tiempo en encontrarme con las dificultades que menciona Pamela y algunas más. Sin embargo, Julia debe tener otras cualidades que frecuentemente lo destaquen como un lenguaje prometedor que cada día va tomando más fuerza en la comunidad de programadores.

Al principio, dichas cualidades eran un misterio para mí. Mi

interrogante principal fue sobre la necesidad de crear este nuevo lenguaje. ¿Por qué usar Julia y no Python o R?, ¿Cuál fue la motivación de su creación? y, después de encontrarme con una falta de recursos, ¿Cómo es posible que 10 años más tarde hay tan poca ayuda de este lenguaje? Esta tesis es mi esfuerzo por mostrar un nuevo lenguaje, sus alcances y hacer una comparativa con lo que ya se conoce. De paso, mi trabajo queda como evidencia y punto de partida para futuros usuarios hispanohablantes.

Este trabajo no es un manual de Julia ni de ningún otro lenguaje. Eso ya existe. Lo que se busca es explicar pros y contras que se encontraron al utilizar Julia, Python y R en tres ejercicios distintos.

La tesis se divide en dos partes. El propósito de la primera parte es dar una imagen general de las funciones que se utilizaron en los tres lenguajes para crear la segunda parte. Primero, se expone la instalación de Julia en un sistema operativo Windows para después explicar aspectos básicos del lenguaje. También, se da una introducción a dos paquetes fundamentales para este trabajo. Esto se hace pensando que Julia es el lenguaje más reciente y se busca que el lector navegue fácilmente por el código presentado. Después, se presentan los paquetes y funciones que se utilizaron en Python y en R suponiendo que el lector ya está familiarizado con ellos.

La segunda parte de la tesis consta de tres ejercicios cuyo objetivo es mostrar un aspecto diferente en los lenguajes. El primer ejercicio toma datos del National Institute of Standards and Technology (NIST) para medir la precisión numérica de cada lenguaje al hacer el ajuste de un polinomio de grado 10. El segundo ejercicio usa los datos del Censo de Población y Vivienda de México del 2020 hecho por el Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI). El objetivo de este ejercicio es el manejo y manipulación de una gran cantidad de

datos. Finalmente, el tercer ejercicio presenta la programación de un algoritmo de búsqueda que se utiliza en la discriminación de modelos en diseños de experimentos. En este ejercicio, los cálculos son más intensivos por lo que busca medir la capacidad y velocidad de cómputo de los lenguajes.

A continuación, se comienza este trabajo con la presentación de Julia.

Capítulo 2

Julia

"Julia es un lenguaje de programación gratis y de código abierto desarrollado por Jeff Bezanson, Alan Edelman, Viral B. Shan y Stefan Karpinski en el MIT", Carrone et al. (2021). Su propósito general es ser tan rápido como C, mientras mantiene la facilidad de lenguaje de R o Python. Es una combinación de sintaxis simple con alto rendimiento computacional. Su slogan es "Julia se ve como Python, se siente como Lisp, corre como Fortran", Carrone et al. (2021). Esta combinación de características hace que Julia sea un lenguaje de programación que ha tomado fuerza en la comunidad científica últimamente. Ya que es un lenguaje poco conocido, en esta sección se explica como instalar Julia en una computadora con sistema operativo Windows y algunos de los básicos del lenguaje.

2.1. Reproducibilidad

Antes de empezar, se enfatiza que esta tesis es completamente reproducible. Peng y Hicks del departamento de bioestadística en la Universidad John Hopkins definen "un análisis de datos publicado es reproducible si el conjunto de datos y el código utilizados para crear el análisis de datos está disponible para que otros lo analicen y estudien de manera independiente", Peng and Hicks (2021). A pesar de que en el artículo enfatizan que esta definición puede ser un tanto ambigua, sí resaltan que la reproducibilidad es un medio para revisar y, posteriormente, confiar en el análisis de otros.

Uno de los beneficios de tener un trabajo de investigación reproducible es que "los lectores obtienen los datos y el código computacional, los cuales son valiosos al grado de que pueden ser reutilizados o rediseñados para futuros estudios o investigaciones", Peng and Hicks (2021). El código programado para esta tesis se encuentra en la plataforma de GitHub, específicamente en la liga https://github.com/valperez/Tesis_Julia. Los datos utilizados también se pueden encontrar en la liga anterior o en la fuente que se indica al mencionarlos.

2.2. Instalación

Este trabajo se presenta como si fuera hecho en un ambiente de Windows. La instalación y uso en los sistemas Mac y Linux es muy similar y no se mencionará.

Al momento de la escritura de esta tesis la versión de Julia disponible es la v1.6.3. El primer paso es descargar Julia desde la página https://julialang.org/downloads/.

Para el sistema operativo Windows se tiene la opción de un instalador de 64-bits o uno de 32-bits. El tipo de sistema que tiene un ordenador se verifica en Start > Configuración > Sistema > Acerca de. Se debe seleccionar el installer y no el portable. Una vez descargado, se debe

seleccionar el archivo .exe y seguir los pasos de instalación.

2.3. Símbolo del sistema

Una vez instalado, se puede ejecutar Julia desde el símbolo del sistema o desde alguna interfaz gráfica como Atom, Visual Studio Code o Jupyter Notebook. De este último se explica más en el capítulo 3.3.

Una de las ventajas de utilizar Julia desde el símbolo del sistema (también conocido como *Command Prompt* o cmd) es que se pueden controlar algunos parámetros del lenguaje. Mi sugerencia es que se comience a usar Julia directo desde la interfaz nativa. Posteriormente, cuando se entienda lo básico y los programas generados requieran un mayor nivel computacional, entonces se puede migrar a usar el cmd para correr Julia.

2.3.1. Multithreading

Una de las razones por la que Julia tiene gran velocidad es por su capacidad para multihilo (*multithreading* en inglés). Esto significa que puede correr diferentes tareas de manera simultánea en varios hilos. La meta de los autores de Julia fue crear un lenguaje de programación con un rendimiento tan alto que pudiera hacer varias cosas simultáneamente. Debido a que uno de los objetivos de esta tesis es mostrar la eficiencia y velocidad de Julia, es crucial conocer la característica del *multithreading* y cómo utilizarla.

Si se está ejecutando Julia por medio del cmd es necesario modificar la cantidad de hilos que se va a utilizar antes de ejecutar Julia. En Windows, esto se modifica programando set Julia_NUM_THREADS=4 (Bezanson et al., 2014). Si se está trabajando con otro sistema operativo, esta página puede ser una guía para modificar la cantidad

de hilos https://docs.julialang.org/en/v1/manual/multi-threading/. En este ejemplo, se cambiaron los hilos a 4, pero se puede asignar cualquier número. Sin embargo, se recomienda que éste no exceda de la cantidad de procesadores lógicos de la computadora.

Si se está usando Julia en algún editor de texto o programa externo la modificación del número de hilos se hace de forma diferente. Cada programa tiene su manera de hacerlo y usualmente las instrucciones vienen en el manual del mismo. Para observar que el cambio se ejecutó de manera correcta (independientemente de la opción elegida) basta con correr el comando Threads.nthreads() y observar que la respuesta sea el número deseado.

2.4. Básicos de Julia

"Como el compilador de Julia es diferente a los intérpretes usados para lenguajes como Python o R se puede percibir que el funcionamiento de Julia no es intuitivo en un principio. Una vez que se entienda como funciona Julia, es fácil escribir código que es casi tan rápido como C", Bezanson et al. (2014). En esta sección se da una introducción a la sintaxis del lenguaje que se tomó del manual oficial de Julia, Bezanson et al. (2014).

La asignación de variables se hace con un signo de igualdad =. El ejemplo más sencillo de esto es ejecutar

julia>
$$x = 2$$

donde se asigna a x el valor de 2.

2.4.1. Operaciones básicas

La tabla 2.1 muestra la sintaxis usada para las operaciones básicas en Julia.

Expresión	Nombre	Descripción		
+x	suma unaria	la operación identidad		
-x	resta unaria	asigna a los valores sus inversos aditivos		
x + y	suma binaria	realiza adición		
х - у	resta binaria	realiza sustracción		
x * y	multiplicación	realiza multiplicación		
х / у	división	realiza divisiones		
x ÷ y	división de enteros	x/y truncado a un entero		
х \ у	división inversa	equivalente a dividir y / x		
х / у	potencia	eleva x a la potencia y		
х% у	residuo	equivalente a rem(x,y)		
! x	negación	realiza lo contrario de x		
x & & y	and lógico	verifica si x y y se cumplen		
x II y	or lógico	verifica si al menos uno, x o y , se cumplen		

Tabla 2.1. Operaciones básicas en Julia

Operaciones básicas en vectores

En Julia cada operación binaria tiene su correspondiente operación punto (dot operation en inglés). Estas funciones están definidas para efectuarse elemento por elemento en vectores y matrices. Para llamarse basta agregar un punto antes del operador binario. Por ejemplo,

julia> [1 9 9 7] .^ 2
1x4 Matrix{Int64}:

eleva cada uno de los elementos del vector al cuadrado.

Julia maneja los números imaginarios utilizando el sufijo im. Sin embargo, no se utilizaron en este trabajo así que se omitirá dar mayor explicación.

2.4.2. Strings (secuencias de caracteres)

Además de números, Julia puede asignar una secuencia de caracteres (mejor conocido como string) a variables usando comillas dobles. Se puede accesar a caracteres específicos de un string utilizando corchetes cuadrados [] y a cadenas seguidas de caracteres usando dos puntos :. Por ejemplo,

```
julia> string = "Esta tesis es interesante"
julia> string[6]
't': ASCII/Unicode U+0074 (category Ll: Letter, lowercase)
julia> string[4:8]
"a tes"
```

Además, Julia también tiene la opción de concatenación de múltiples strings. Esto se hace utilizando un asterisco * para separar cada uno de los strings. Por ejemplo,

```
julia> grado = "licenciada"
julia> nexo = "en"
julia> carrera = "matematicas aplicadas"
julia> espacio = " "
julia> grado*espacio*nexo*espacio*carrera
"licenciada en matematicas aplicadas"
```

2.4.3. Funciones

En Julia una función es un objeto que asigna una tupla de argumentos a un valor de retorno Bezanson et al. (2014). La sintáxis básica para definir funciones en Julia es

Además, se puede agregar la palabra return para que la función regrese un valor. Por ejemplo, si se quisiera tener una función a la que se le dan dos números y regrese el número mayor, los comandos serian de la forma:

Para llamar a la función basta con escribir $numero_mayor(x, y)$ asignando o sustituyendo valores por x y y. Por ejemplo,

```
julia> numero_mayor(4, 9)
9
```

2.4.4. Vectores y Matrices

Un vector columna de n componentes se define como un conjunto ordenado de n números escritos de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

En Julia para definir un vector columna se hace uso de los corchetes cuadrados [] y comas. Por ejemplo,

da como resultado un vector de 4 elementos de tipo Int64. Julia es un lenguaje exigente con los tipos de objetos, por lo que aprender las características y funciones singulares de cada objeto es uno de los atributos que hacen a un buen usuario.

Si se quisiera definir un vector renglón se haría exactamente lo mismo excepto que se omitiría el uso de las comas. En el ejemplo anterior, Julia tomó el objeto A como una matriz, no como un vector.

Una matriz A de $m \times n$ es un arreglo rectangular de mn números dispuestos en m renglones y n columnas.

```
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1j} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2j} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ij} & \dots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mj} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}
```

En Julia, hay dos formas de definir matrices. La primera es utilizando los corchetes cuadrados [] para comenzar y terminar la matriz. Las columnas están separadas por espacios y las filas por punto y coma. La segunda opción es similar a la primera con la única diferencia de que en lugar de punto y coma se cambia de renglón. Esta opción puede parecer tediosa ya que requiere que las columnas estén alineadas. Sin embargo, es una forma más visual de ver las matrices. Lo siguientes comandos muestran ambas opciones.

De manera análoga con los vectores, para llamar un solo elemento de la matriz se utilizan los corchetes cuadrados. Continuando con el ejemplo anterior, para obtener el número 5 de la matriz A_2, se introduciría el comando

Julia necesita de la instalación del paquete LinearAlgebra para hacer operaciones básicas y factorización de matrices. El catálogo de funciones es bastante extenso para incluirlo en este trabajo, pero se puede encontrar en https://docs.julialang.org/en/v1/stdlib/LinearAlgebra/.

2.4.5. Instalación de un paquete

Para cualquier otra operación fuera de lo básico que ya se mencionó, Julia necesita usar paquetes. Los paquetes son similar a las librerías en R. La lista completa de paquetes registrados en Julia se encuentra en https://juliapackages.com/. En esta sección se explica la instalación y uso de los mismos.

El único paquete que ya viene por default en la instalación de Julia es Pkg, ya que su función es instalar otros paquetes. El comando using activa un paquete ya descargado, mientras que Pkg.add() agrega un paquete nuevo. A continuación se presenta la guía básica para descargar cualquier paquete en Julia usando como ejemplo al ya mencionado LinearAlgebra.

using Pkg
Pkg.add("LinearAlgebra")
using LinearAlgebra

La instalación de un paquete solo se debe hacer una vez. Si se requiere usar en alguna sesión posterior basta con usar el comando using y el nombre del paquete. En las siguientes secciones se explica y ejemplifica el uso de dos paquetes muy usados en esta tesis.

2.4.6. DataFrames

Un dataframe es una tabla estructurada de dos dimensiones que se usa para tabular distintos tipos de datos. Julia tiene un paquete llamado DataFrames que permite trabajar con dataframes de creación propia o de alguna fuente externa.

Crear un dataframe

Los dataframes pueden ser usados para manejar grandes cantidades de información exportada o pueden ser creaciones propias en el lenguaje. Para crear un dataframe desde cero en Julia se debe escribir la palabra DataFrame y abrir un paréntesis. Después, se escribe el nombre de la primera columna, un signo de igualdad y los datos que corresponden a esa variable. Se repite lo mismo con la cantidad de columnas que se requieran. Por ejemplo, para hacer un dataframe con las claves únicas y nombres de cinco mujeres el código sería el siguiente:

Los nombres de las columnas de un dataframe se vuelven una especie de atributos. Para referirse a la columna 'col' del dataframe 'df' basta escribir df.col. Si se quisiera agregar una columna nueva se deben asignar datos a df.colNueva. Por ejemplo, si quisiera agregar una columna llamada color al dataframe del ejemplo anterior, el código sería el siguiente:

```
julia> df.color = ["morado", "azul", "verde", "negro", "rojo"]
```

Importar datos en un dataframe

Como ya se mencionó, los dataframes son utilizados para contener grandes cantidades de información. Usualmente esta información no es generada en Julia por lo que hay importarla. Esto se puede hacer con el paquete CSV. La descarga de este paquete se hace siguiendo los pasos descritos en la sección 2.4.5.

Una vez instalado el programa, se necesita utilizar el comando CSV.read y la ruta de la ubicación del archivo para exportar los datos.

```
julia> using CSV, DataFrames
julia> df = CSV.read("~/ejemplo.csv", DataFrame)
```

julia> using CSV, DataFrames

julia> df = CSV.read("C:/Users/Valeria/Documents/ITAM/Tesis/Julia con R/ejemplo.csv", DataFrame)

Row		nombre		deporte String15	lugar_residencia String31	estatura Float64
1 2	_	Valeria Paula	morado azul		Nuevo Leon Estado de Mexico	1.7 1.75
3	3	Maria Jose	verde	atletismo	Ciudad de Mexico	1.63
4	4	Sofia	negro	funcional	Oaxaca	1.66
5	5	Monica	rojo	baile	Veracruz	1.58

Figura 2.1. Ejemplo de importación de un dataframe

Los dataframes tienen una cantidad inmensa de funciones que incluyen agregar o eliminar información, seleccionar columnas o renglones, transformar su contenido, etc. Las especificaciones de dichas funciones se explican con mayor profundidad en el manual oficial del paquete en la página https://dataframes.juliadata.org/stable/.

2.4.7. Análisis de regresión

Un análisis de regresión es una herramienta estadística para estudiar las relaciones entre distintas variables. "Regresión es un método que permite a los investigadores resumir como predicciones o valores promedio de un resultado varían a través de variables individuales definidas como predictores o regresores", Gelman et al. (2021).

De forma concisa, la regresión es una expresión que intenta explicar como una variable depende otras. En Julia, esto se puede hacer con ayuda del paquete GLM que significa Generalized Linear Models o modelos lineales generalizados. Una de sus funciones es ajustar modelos lineales, pero se puede usar para modelos más complejos. Como todos los paquetes, primero se debe instalar con los pasos descritos en 2.4.5.

En este paquete una de las funciones principales se llama 1m que se utiliza para ajustar un modelo lineal a un conjunto de datos. En el manual oficial Bates et al. (2022) está descrita la manera en que se pueden generar modelos más avanzados. Uno de los autores de este paquete, Douglas Bates tiene una larga trayectoria en el cómputo estadístico. En 1992 publicó el libro llamado Statistical Models in S en cuyo co-autor es John Chambers, otro grande del cómputo estadístico. Además, Bates es parte del llamado R Core Team que es el grupo de colaboradores con acceso a la fuente del lenguaje R. Uno de sus trabajos más recientes es desarrollar modelos estadísticos en Julia como lo es el paquete GLM.

La función lm se utiliza en repetidas ocasiones en este trabajo, por lo que se explica a continuación. La función es lm(formula, data, allowrankdeficient=false; [wts::AbstractVector], dropcollinear::Bool=true) donde

• formula: usa los nombres de las columnas del dataframe de datos para referirse a las variables predictoras. Debe ser un objeto de tipo formula.

- data: el dataframe que contenga los datos de los predictores de la fórmula.
- allowrankdeficient: permite o no que la matriz de datos tenga rango completo.
- wts: es un vector que especifica la ponderación de las observaciones.
- dropcolliinear: controla si lm acepta una matriz que no sea de rango completo. Si el parámetro se define como true entonces solo se usan el conjunto de las primeras columnas linealmente dependientes.

Regresión lineal simple

El modelo de regresión lineal más simple es el que tiene un solo predictor

$$y = a + bx + \epsilon$$
.

Para ejemplificar este modelo de regresión se usaron los datos del capítulo 7.1 del libro escrito por Gelman et al. (2021). Dicha información fue recabada por Douglas Hibbs con el objetivo de predecir las elecciones de Estados Unidos basándose solamente en el crecimiento económico. Los datos se ven de la siguiente manera:

-maste		xamples-m		/Users/Valeria/Docume ectionsEconomy/data/hi inc_party_candidate String15	bbs.csv", DataFrame)	on R/Regression	n_and_other_	stories/ROS-Example
1	1952	2.4	44.6	Stevenson	Eisenhower			
2	1956	2.89	57.76	Eisenhower	Stevenson			
3	1960	0.85	49.91	Nixon	Kennedy			
4	1964	4.21	61.34	Johnson	Goldwater			
5	1968	3.02	49.6	Humphrey	Nixon			
6	1972	3.62	61.79	Nixon	McGovern			
7	1976	1.08	48.95	Ford	Carter			
8	1980	-0.39	44.7	Carter	Reagan			
9	1984	3.86	59.17	Reagan	Mondale			
10	1988	2.27	53.94	Bush, Sr.	Dukakis			
11	1992	0.38	46.55	Bush, Sr.	Clinton			
12	1996	1.04	54.74	Clinton	Dole			
13	2000	2.36	50.27	Gore	Bush, Jr.			
14	2004	1.72	51.24	Bush, Jr.	Kerry			
15	2008	0.1	46.32	McCain	Obama			
16	2012	0.95	52.0	Obama	Romney			

Figura 2.2. Encabezado de los datos sobre las elecciones en EUA recabados por Douglas Hibbs

En este modelo se busca que el voto sea resultado del crecimiento económico. El código para hacer esto, después de la importación de datos mostrado en 2.2 es

El resultado es una tabla con los coeficientes, la desviación estándar, el valor t, el valor-p y el intervalo de confianza del 95 % para los coeficientes. En este ejemplo, el resultado que da Julia es y = 46.3 + 3.1x, el cual coincide con los valores reportados en el libro.

Regresión lineal múltiple

La regresión lineal múltiple es el caso general de la regresión lineal simple. La diferencia es que en el primero hay múltiples predictores que deben cumplir ciertos criterios. Gelman et al. (2021) define este tipo de regresión como

$$y_i = \beta_1 X_{i1} + \dots + \beta_k X_{ik} + \epsilon_i$$
, para $i = 1, \dots, n$

donde los errores ϵ_i son independientes e idénticamente distribuidos de manera normal con media 0 y varianza σ^2 . La representación matricial equivalente es

$$y_i = X_i \beta + \epsilon_i$$
, para $i = 1, \dots, n$ (2.1)

donde X es una matriz de $n \times k$ con renglón X_i .

Para ejemplificar este tipo de modelo se uso un ejemplo que consta de dos predictores y la interacción entre ellos. Esta vez se utilizaron los datos del capítulo 10.3 de Gelman et al. (2021) que muestran la relación entre los resultados de exámenes de niños (kid_score), el coeficiente intelectual IQ de sus madres (mom_iq) y si sus madres terminaron o no la preparatoria (mom_hs).

Se buscó determinar si existe una relación significativa entre la educación y el coeficiente de las madres con los resultados de los exámenes de sus hijos. Por lo tanto, los predictores son las variables en relación con la madre mientras que la respuesta es el desempeño de los niños. El código en Julia se ve de la siguiente manera

```
julia> using DataFrames, GLM, CSV
julia> data_kid = CSV.read("~/Tesis/data/kidiq.csv", DataFrame)
julia> fm = @formula(kid_score ~ mom_hs + mom_iq + mom_hs*mom_iq)
julia> kidscore_lm = lm(fm, data_kid)
```

Que da como resultado el modelo ajustado kid_score = -11.48 + 51.26* mom_hs + 0.97*mom_iq -0.48*mom_hs*mom_iq

Uno de los aspectos por resaltar en este ejemplo es que, similar a como se hace en R, para incluir la relación entre dos predictores se usa un asterisco entre ellos al momento de definir la fórmula de la regresión. En el caso donde alguno de los regresores sea de tipo categórico, la fórmula se mantiene igual pero hay que hacerle cambios a la base de datos en sí. Si Julia no reconoce estas columnas como categóricas entonces se debe cambiar su tipo en el dataframe. Se explica este problema más a fondo en el capítulo 6.4.

Por otro lado, se puede intentar usar el paquete CSVFiles para leer los archivos ya que hace mejor trabajo identificando el tipo de variables. Sin embargo, este paquete todavía está en desarrollo.

Capítulo 3

Python

"Python es un lenguaje de programación que permite trabajar rápido e integrar sistemas más eficientemente" es una frase que podría parecer sencilla, pero es esa misma simplicidad la que la hace destacar como lo primero que se observa en la página oficial de Python https://www.python.org/. El creador de Python, Guido van Rossum, comenzó a desarrollar el lenguaje a finales de los ochentas para, finalmente, hacerlo público en 1991. Esto lo hace un lenguaje más antiguo que Julia y R. Sin embargo, su desarrollo y efectividad ha sido tal que empresas líderes mundiales en tecnología como Youtube y Google lo utilizan hoy en día.

Los recursos de apoyo disponibles para el uso de Python son vastos y de todos los medios posibles. Se decidió incluirlo en este trabajo ya que su uso en ciencia de datos es cada vez más frecuente. Un ejemplo de ello es la publicación de libros escritos por reconocidos desarrolladores de software como lo son *Python Data Science Handbook* de Jake VanderPlas y *Python for Data Analysis* de Wes McKinney.

Python se incluye también por su uso similar con Julia y ${\bf R}$ lo que

permite mostrar su sencillez y facilidad de programación. En este trabajo se utilizó Python para los tres ejercicios de manejo de datos que se explican a partir del capítulo 5. En dichos capítulos se presenta el código utilizado en los ejemplos por lo que en las siguientes secciones se comentan los paquetes principales y la interfaz que se utilizaron.

3.1. Listas

"Una lista es una colección de elementos en un orden particular", Matthes (2019). La lista es la estructura de datos elemental y principal de Python ya que permite almacenar diferentes tipos de elementos en un solo objeto. Una lista se crea usando paréntesis cuadrados []. Por ejemplo, si se quisiera hacer una lista de animales en el zoológico el comando sería

```
animales = ["zebra", "leon", "jirafa", "elefante"]
animales[1]
```

Los elementos de una lista pueden accederse mediante su índice y el uso de corchetes cuadrados. Por ejemplo, el comando animales[1] regresa "león". Una característica clave de las listas en Python es que, a diferencia de R y Julia, las listas comienzan a numerar sus elementos desde el cero.

Existen más estructuras de datos en Python cuyas características cumples distintos criterios. En este trabajo se eligió trabajar con listas ya que son un objeto ordenado, mutable y que permite valores duplicados. Se recomienda ver la documentación de Python, Python-Software-Foundation (2022), para una explicación más detallada de los métodos propios de las listas.

3.2. Paquetes

Al igual que en Julia, en Python se desarrolló el lenguaje original separado de los paquetes. La diversidad del desarrollo de los paquetes es tal que facilita hacer casi cualquier tipo de análisis matemático posible.

Para usar cualquier instrucción de un paquete se tiene primero que nombrar su apodo y después llamar a la función. El apodo del paquete se lo otorga el usuario al momento de importarlo. Por ejemplo,

import numpy as np

importa el paquete NumPy con el apodo np. Si se quisiera llamar a la función array de este paquete se tendría que escribir el comando np.array. En el desarrollo códigos extensos esto podría parecer tedioso e incluso innecesario. Sin embargo lo considero una gran ventaja ya que quita la ambigüedad de reconocer que método corresponde a que paquete.

3.2.1. NumPy

NumPy es el paquete fundamental para computación científica en Python ya que es el que proporciona los objetos multidimensionales como lo son los vectores y matrices. Estos objetos se pueden crear sin necesidad de NumPy, pero hacerlo mediante el paquete otorga algunas particularidades. La primera de ellas es que los arreglos creados en NumPy tienen dimensiones inmutables; la segunda es que sus elementos deben pertenecen al mismo tipo de dato; la tercera es que facilitan operaciones matemáticas en grandes cantidades de datos; y, finalmente, la cuarta es que es uno de los paquetes preferidos por la comunidad de Python lo cual lo hace objeto de una gran cantidad de publicaciones sobre su uso y aplicación.

En esta tesis se usó NumPy para crear y manipular arreglos así como hacer un ajuste de un polinomio usando el método de mínimos cuadrados. A continuación se presenta la lista completa de comandos que se utilizaron con su respectiva explicación proveniente del paquete oficial de NumPy, NumPy (2022).

- np.array([lista]): Crea un arreglo con los valores de la lista.
- np.insert(arr, obj, values): Inserta los valores values en el arreglo arr antes de los índices obj.
- np.arange(start, stop): Crea un arreglo con valores espaciados uniformemente desde start hasta el número antes de stop.
- np.transpose(a): Transpone el objeto a a.
- np.concatenate(a_1, a_2, \ldots): Une la secuencia de arreglos en uno ya existente.
- np.ones(shape): Crea una matriz de tamaño shape llena con unos.
- np.diag(v): Extrae la diagonal de la matriz v o crea una matriz diagonal de tamaño v.
- np.linalg.inv(a): Calcula la inversa multiplicativa de la matriz v.
- np.random.choice(a, size = None, replace = True, p =
 None): Genera una muestra aleatoria de a de tamaño size con o sin reemplazo.
- np.polyfit(x, y, deg): Hace un ajuste polinomial de grado deg a los puntos (x, y) usando el método de mínimos cuadrados.

3.2.2. pandas

pandas es el segundo paquete en importancia de Python ya que ofrece manipulación y análisis de datos de manera rápida, flexible y sencilla. Sus funciones se enfocan en el uso eficiente de dataframes, lectura y escritura de datos, agrupación y unión de conjuntos de datos, entre otros y el Equipo de Desarrollo de Pandas (2022). En esta tesis se utilizaron los siguientes comandos.

- pd.read_csv(filepath): Lee un archivo csv y lo convierte a DataFrame.
- pd.DataFrame(data): Crea un objeto de tipo dataframe con los datos data.
- pd.get_dummies(data): Convierte variables categóricas data en variables indicadoras o dummie.

3.2.3. os

Otro paquete utilizado en este trabajo fue os ya que proporciona una manera de usar funcionalidad dependiente del sistema operativo Python-Software-Foundation (2022). Este es el paquete que permite hacer la conexión entre Python y los archivos de una computadora. Los comandos que se utilizaron son dos. El primero fue os.chdir(path) que permite seleccionar el directorio en el que se está trabajando. Mientras que el segundo fue os.listdir(path) que proporciona una lista de archivos en el path dado.

3.2.4. scikit-learn

scikit-learn es un paquete creado para machine learning o aprendizaje de máquina en Python. También es conocido como sklearn y proporciona herramientas simples y eficientes para la predicción en análisis de datos. Por ejemplo, clasificación, regresión, agrupamiento o conglomerado y reducción de dimensiones en modelos Python-Software-Foundation (2022).

Para este trabajo se utilizó para hacer regresiones lineales. El usuario puede importar el paquete de dos maneras.

```
import sklearn
from sklearn import linear_model
```

```
regr = linear_model.LinearRegression()
model = regr.fit(x, y)
```

El primer comando importa el paquete sklearn completo, mientras que el segundo solo toma la parte de modelos lineales. Con el paquete cargado, la tercera línea de código se encarga de guardar en la variable reg que se busca ajustar un modelo linear definido como la ecuación 2.1 usando el método de mínimos cuadrados. Finalmente, el último comando del código calcula los coeficientes β .

3.2.5. itertools

"Itertools es un módulo que estandariza un conjunto importante de herramientas rápidas y eficientes de memoria que son útiles en sí mismas o en combinación", Python-Software-Foundation (2022). Este paquete tiene ciertas funciones implementadas que se pueden recrear sin la necesidad del mismo. Sin embargo, la ventaja de utilizar itertools es la velocidad en la que las genera.

En este trabajo se utilizo itertools.combinations() para crear las combinaciones de posibles factores activos del problema de selección de modelos del capítulo 7. Todos los paquetes anteriores se utilizaron mediante la interfaz gráfica Jupyter que se presenta a continuación.

3.3. Jupyter

"Jupyter Notebook es la aplicación web original para crear y compartir documentos computacionales. Es un programa que existe para desarrollar software de manera pública en decenas de lenguajes de programación incluyendo R, Python y Julia", Jupyter (Jupyter).

Una manera sencilla de obtener Jupyter es instalando Anaconda, una interfaz gráfica que permite manejar y administrar aplicaciones, paquetes, ambientes y canales sin necesidad de usar comandos en el sistema operativo. Para instalar Anaconda en Windows se debe ir a la página https://docs.anaconda.com/anaconda/install/windows/ y seguir las instrucciones de instalación. Esto puede tomar unos minutos. Al terminar, la ejecución de Jupyter Notebook abrirá una ventana del explorador y que se verá de manera similar a la figura 3.1.

Jupyter tiene la ventaja de facilitar el uso indistinto de los tres lenguajes utilizados en este trabajo. Uno de los prerequisitos para instalar Jupyter es la instalación previa de Python. Por lo tanto, este lenguaje que ya viene en la interfaz. La imagen 3.2 muestra un archivo que utiliza Python en Jupyter. En la esquina superior derecha se puede observar el lenguaje que se está utilizando.

El caso de R y Julia es diferente por lo que se expondrá su implementación en las siguientes secciones.

3.3.1. Julia

El primer paso es haber instalado Julia en la computadora. Después, se debe instalar el paquete IJulia usando los pasos descritos en 2.4.5. Esto solo se tiene que hacer una vez. Para confirmar que la instalación

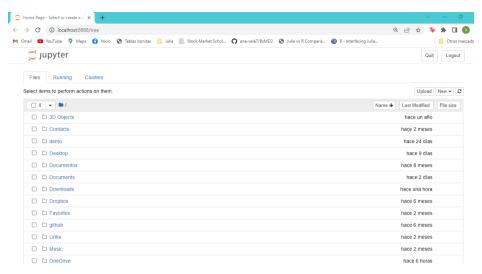


Figura 3.1. Pantalla principal de Jupyter

esté bien hecha se debe abrir Jupyter, seleccionar New y debe aparecer la opción de Julia 1.6.3 (o la versión de Julia que esté instalada en la computadora). El archivo nuevo generado con Julia se ve similar a la imagen 3.3

3.3.2. R

Hay varias maneras de instalar R en Jupyter, pero se expondrá la forma descrita en el manual de Anaconda, Inc (2022).

- Abrir el Navegador de Anaconda (no confundir con el de Jupyter Notebook).
- Seleccionar Environments y después la opción de Create ubicada en la esquina inferior izquierda.
- 3. Aparecerá una ventana donde permite nombrar el Environment

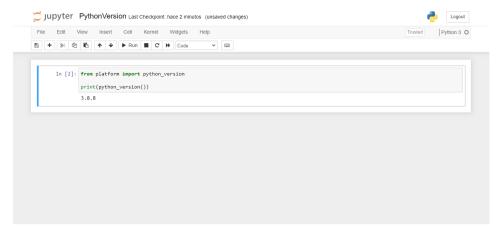


Figura 3.2. Archivo generado con Python en Jupyter

como se prefiera. Se debe seleccionar la versión de Python que se tenga y seleccionar la casilla al lado de R. Después, se debe pulsar la opción de Create.

- 4. Para usar el ambiente que se acaba de crear en Jupyter se selecciona la flecha de lado derecho del nombre del ambiente nuevo. Entre las opciones seleccionar la opción de Open with Jupyter Notebook como se muestra en la figura 3.4
- 5. Por último, se debe seleccionar el botón de New y después R para crear un archivo que trabaje con R.

En la imagen 3.5 se muestra el ejemplo de un archivo generado con R en Jupyter. En el siguiente capítulo se exponen las funciones utilizadas en R.

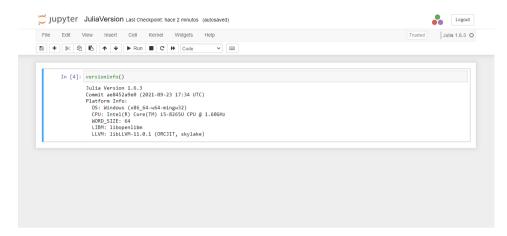


Figura 3.3. Archivo generado con Julia en Jupyter

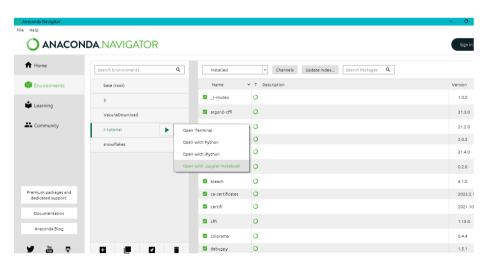


Figura 3.4. Ejecutar R desde el navegador de Anaconda

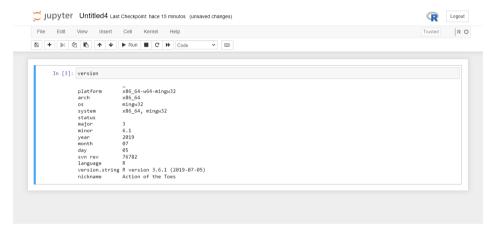


Figura 3.5. Archivo generado con R en Jupyter

Capítulo 4

\mathbf{R}

"Ross Ihaka y Robert Gentleman, del departamento de Estadística de Auckland University en Nueva Zelanda estaban interesados en el cómputo estadístico y reconocieron la necesidad de un mejor ambiente de cálculo del que tenían. Ninguno de los productos comerciales les convencía, por lo que decidieron desarrollar uno propio", Barrios (2010).

R nació de la necesidad de tener una transición de usuario a desarrollador. Peng (2015) explica que los creadores buscaron crear un lenguaje que podría usarse para hacer un análisis de datos de manera interactiva que además fuera capaz de escribir programas más largos. Una de las principales cualidades de R es la facilidad para crear gráficos bien diseñados y con calidad de publicación que pueden incluir símbolos matemáticos y fórmulas en caso de ser necesarios Team (2022).

R se considera como uno de los lenguajes más sencillos para comenzar a aprender a trabajar métodos estadísticos computacionales. La sencillez de su sintaxis permite que inclusivo un usuario nuevo navegue de manera fluida por el código. Es conocido como uno de los lenguajes más usados para análisis y graficación. Su popularidad en la comunidad científica ha impulsado el desarrollo del lenguaje y la creación de todo tipo de materiales de apoyo. Las razones anteriores son el motivo por el cual se decidió incluir el lenguaje en este trabajo.

Debido a la popularidad ya mencionada, en este trabajo se parte de la primicia de que el lector ya cuenta con los conocimientos básicos para entender el código que se presenta. El avanzado desarrollo del lenguaje permitió que los ejercicios de este trabajo se hicieran con pocas funciones. En el último ejercicio se utiliza un paquete ya programado, mientras que los primeros dos se enfocan en la función 1m explicada a continuación.

4.1. Función lm

La función lm es usada para analizar modelos lineales. La manera de llamarla es con el comando lm(formula, data, subset, weights, na.action, method = 'qr', model = TRUE, x = FALSE, y = FALSE, qr = TRUE, singular.ok = TRUE, contrasts = NULL, offset, ...). Con esto se puede observar que la función cuenta con muchos argumentos lo cual la hace muy versátil. De hecho, en el capítulo 5 es necesario modificar el argumento tol para poder resolver el problema de manera exitosa.

El modelo de regresión lineal multivariada debe tener como argumento de formula la ecuación

$$y - x_1 + x_2 + \dots + x_k$$

Se indica la variable de respuesta y seguido de una virgulilla y después los n predictores que se estén utilizando. La virgulilla juega el papel de un signo de igualdad si se tratara de escribir la **formula** como

ecuación.

La función lm también permite analizar modelos con variables cuyo grado es mayor a uno. En este caso, se debe utilizar la función llamada interpretación inhibida, mejor conocida como I(...). El argumento formula comienza como en el caso anterior, con la variable y y la virgulilla. Después, se eleva el regresor x a la potencia k dentro de la función I(...). Por ejemplo, si se quisiera ajustar un modelo $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$ el comando es

$$y \sim x + \mathbf{I}(x^2)$$

La función I(...) se usa para cambiar la clase de un objeto para indicar que el objeto debería ser tratado de la forma 'como si fuera'. Esta instrucción se usa especialmente para los operadores especiales de fórmula como es el caso de \wedge . En el ejemplo anterior, la función de interpretación inhibida da la instrucción de tomar x^2 como una variable y no como la interacción de segundo orden de x.

Por otro lado, uno de los argumentos que tiene la función 1m es tol, la tolerancia del ajuste. En este caso, la tolerancia determina si las columnas de una matriz son linealmente independientes o no. Cuando se tiene una matriz con valores muy pequeños (como es el caso del ejercicio presentado en el capítulo 5) se necesita la tolerancia para determinar cuando un valor se considera como cero. En dicho ejercicio el argumento tol tuvo que ser modificado para lograr el resultado correcto. Usualmente este parámetro no necesita ser cambiado, pero es útil tomarlo en cuenta para las ocasiones donde los datos son extremadamente sensibles y se busca un ajuste preciso.

La segunda parte de la tesis comienza en el siguiente capítulo. En esta parte se exponen tres ejercicios diferentes en los tres lenguajes ya descritos (R, Julia y Python). El primer ejercicio es el ajuste de un

modelo lineal de grado diez con datos extremadamente sensibles. En este ejercicio se mide la precisión de los cálculos de los tres lenguajes. El segundo ejercicio es el ajuste de modelos lineales de distintos órdenes usando grandes cantidades de datos. El objetivo fue ilustrar y comparar el manejo y análisis de datos. Finalmente, el tercer ejercicio es sobre la discriminación de modelos en diseños de experimentos. El punto de comparación fue la rapidez en la que los lenguajes hacen muchos cálculos intensivos.

Capítulo 5

Ajuste de polinomios

En los capítulos anteriores se presentaron tres lenguajes de programación, Julia, R y Python, con la intención de utilizarlos para la solución de tres ejercicios. En este capítulo se presenta el primero de ellos. El problema fue diseñado y publicado por primera vez por el National Institute of Standards and Technology (NIST) cuya misión incluye proveer soluciones que garanticen el estándar de medición. El ejemplo busca medir la precisión en los cálculos de los lenguajes de programación al proveer un conjunto de datos, un problema propuesto y su solución con alta precisión numérica en sus dígitos. La tarea del usuario es comparar hasta que dígito su respuesta es igual a la calculada por NIST.

En este capítulo se toma un problema publicado por NIST donde la tarea es ajustar un polinomio de grado diez a un conjunto de datos. La solución se programó en los tres lenguajes ya mencionados y se compara la exactitud de la respuesta, el tiempo que lleva la ejecución y la facilidad de programación. La importancia de este ejemplo se centra en la precisión numérica. NIST establece los estándares de referencia de las mediciones. Por lo tanto, si los cálculos logran alcanzar un alto grado de precisión numérica se puede confiar en que el método de solución es robusto.

5.1. El problema

Morgenstern and Morales (2015) abordaron este problema en la revista Laberintos e Infinitos donde muestran la precisión de las soluciones obtenidas en R, Excel, Stata, SPSS, SAS y Matlab.

Vale: Cambiar esto de lugar nomas que no se pa donde

Suponga que se tiene un conjunto de datos con solamente dos variables x, y. El problema propuesto es ajustar la información a un polinomio de grado p. Es decir, se busca ajustar los datos al modelo

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \dots + \beta_{p-1} x^{p-1} + \beta_p x^p$$

El problema consiste en calcular los coeficientes que mejor *cumplan* la ecuación anterior. El cálculo se hace con el método de mínimos cuadrados.

5.1.1. Método de mínimos cuadrados

El objetivo del método de mínimos cuadrados es encontrar una función que mejor se aproxime a los datos. Esto es, suponga que se tiene un conjunto de datos donde se tiene una variable de respuesta y y x_1, x_2, \ldots, x_p regresores. Suponga que se quiere ajustar los datos al modelo

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i \text{ donde } i = 1, \dots, n$$

La ecuación anterior representa una curva de orden p. El método de mínimos cuadrados busca minimizar la suma de cuadrados entre la curva y los datos. Esto es,

$$min_{\beta} \sum_{i=1}^{n} \epsilon_{i}^{2} = min_{\beta_{0},...,\beta_{p}} (\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \beta_{0} - \beta_{1}x_{i1} - \dots - \beta_{p}x_{ip})^{2})$$

donde y es un vector de tamaño n, X es una matriz de tamaño $n \times (k+1)$ y β es un vector de tamaño k+1.

5.2. Los datos

Como se mencionó anteriormente, los datos que se usan para trabajar este problema son proporcionados por el Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST por sus siglas en inglés). Su departamento de estadística ofrece varios servicios, entre ellos un conjunto de datos llamado fillip y el ajuste de un polinomio de grado 10. El cálculo de los coeficientes del ajuste se presenta hasta con 15 dígitos decimales para que el usuario pueda valorar la precisión de su ajuste.

Los datos constan de 82 pares ordenados (x_i, y_i) y se encuentran en https://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/data/LINKS/DATA/Filip. dat. Su gráfica se muestra en la figura 5.1.

5.3. Planteamiento del problema

Con la información que ya se presento, se puede aterrizar la ecuación 5.1 al problema propuesto. La ecuación queda de la forma

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \dots + \beta_9 x_i^9 + \beta_{10} x_i^{10}$$
 donde $i = 1, 2, \dots, 82$.

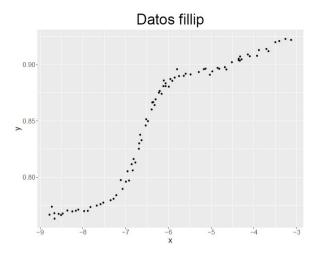


Figura 5.1. Conjunto de datos fillip para el ajuste del polinomio

Analizando más a profundidad la ecuación anterior, se puede determinar que el vector y es de tamaño 82 y corresponde a la columna del mismo nombre en los datos fillip. La incógnita del problema, los coeficientes β forman un vector de tamaño 11. Por último, los regresores x_i^j se obtienen de los datos fillip. De forma matricial, el problema se puede representar como

$$y = X\beta. (5.1)$$

donde

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_81 \\ y_82 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,10} \\ 1 & x_{2,1} & x_{2,2} & \dots & x_{2,10} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_{81,1} & x_{81,2} & \dots & x_{81,10} \\ 1 & x_{82,1} & x_{82,2} & \dots & x_{82,10} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_9 \\ \beta_1 0 \end{bmatrix}$$

Representar la matriz X de esta forma tiene una ventaja particular. Cada elemento puede ser visto como $x_{i,j}$ donde el renglón i representa la observación i de los datos. Por otro lado, la columna j representa la potencia a la que está elevada la observación i. Por ejemplo, el elemento $x_{34,5}$ es la observación 34 de los datos elevado a la 5 potencia. Sin embargo, el elemento $x_{34,5}$ realmente está en la columna número 6 de la matriz. El cambio de notación es solamente para no perder de vista la potencia de las observaciones.

5.4. Número de condición y precisión de la solución

Como se vio en la sección 5.6, no queda duda de que los métodos sí están bien programados. Dejando de lado las funciones programadas en los paquetes de Julia, el método de factorización QR y descomposición de valores singulares arrojaron buenos resultados hasta los polinomios de grado 9. Esto puede dar pie a pensar que, en realidad, los datos en sí son muy susceptibles a cambios.

En otras palabras, cualquier cambio en la matriz X o en el vector y resulta en un ajuste de los coeficientes β poco preciso. Esta característica se conoce como que los datos tienen impurezas. El caso contrario donde los métodos dan resultados precisos se conoce a los datos como exactos Datta (2010).

En general, para el problema 5.1 se tienen tres casos posibles:

- 1. El vector y tiene impurezas mientras que la matriz X es exacta.
- 2. La matriz X tiene impurezas mientras que el vector y es exacto.
- 3. Ambos, el vector y y la matriz X tiene impurezas.

En este caso, el enfoque es el tercer caso ya que no hay razón para pensar que solamente una columna de los datos originales tiene impurezas mientras que la otra no. El número de condición es un valor que ayuda a determinar la sensibilidad de un sistema lineal.

Definición 1. El número $||A||||A^{-1}||$ se llama el número de condición de A y se denota Cond(A) (Datta, 2010, p. 62).

Además, el número de condición da una referencia en que tan grandes son los cambios en un sistema. El siguiente teorema de (Datta, 2010, p. 65) es un ejemplo de esto.

Teorema 5.1. Supongamos que queremos resolver el sistema Ax = b. Supongamos que A es no singular, $b \neq 0$, $y \parallel \Delta A \parallel < \frac{1}{\parallel A^{-1} \parallel}$. Entonces

$$\frac{\parallel \delta x \parallel}{\parallel x \parallel} \leq \left(\frac{Cond(A)}{1 - Cond(A) \frac{\parallel \Delta A \parallel}{\parallel A \parallel}}\right) \left(\frac{\parallel \Delta A \parallel}{\parallel A \parallel} + \frac{\parallel \delta b \parallel}{\parallel b \parallel}\right).$$

El teorema anterior explica que los cambios en la solución x son menor o iguales a una constante determinada por el número de condición multiplicada por la suma de las perturbaciones de A y las perturbaciones de b.

Además, el teorema establece que, aunque las perturbaciones de A y b sean pequeñas, puede haber un cambio grande en la solución si el

número de condición es grande. Por lo tanto, Cond(A) juega un papel crucial en la sensibilidad de la solución Datta (2010).

Asimismo, el número de condición tiene varias propiedades pero la relevante para este ejercicio es la siguiente:

$$Cond(A) = \frac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}} \tag{5.2}$$

donde σ_{max} y σ_{min} son, respectivamente, el valor singular más grande y más pequeño de A. Antes de calcular el número de condición de la matriz X del problema 5.1 es necesario exponer una última definición.

Definición 2. El sistema Ax = b está mal condicionado si el Cond(A) es grande (por ejemplo, $10^5, 10^8, 10^{10}, etc$). En otro caso, está bien condicionado (Datta, 2010, p. 68).

Ahora bien, es momento de calcular el número de condición. Esto se hizo en Julia y en R a manera de verificación. En ambos se uso la función que ya viene programada en cada lenguaje y la fórmula 5.2. En Julia, el código es

```
# Con función de Julia
julia> numCond_1 = cond(X_10)
```

Usando propiedad de valores singulares
julia> sing_values = svd(X_10).S
julia> sing_values = sort(sing_values)
julia> numCond_2 = sing_values[length(sing_values)] / sing_value

Los resultados son $numCond_1=1.7679692504686805e15$ y $numCond_2=1.7679692504686795e15$. Por otro lado, en R el código es

con funcion de R

```
numCond_R1 \leftarrow cond(X)
```

```
\# Usando propiedad de valores singulares S.\mathbf{svd} \leftarrow \mathbf{svd}(X) S.d \leftarrow S.\mathbf{svd}\$d S.d \leftarrow \mathbf{sort}(S.d, decreasing = TRUE) numCond_R2 \leftarrow S.d[1] / S.d[length(S.d)]
```

Los resultados son $numCond_{R1} = numCond_{R2} = 1.767962e15$. En conclusión, en ambos lenguajes cualquier método confirma que el número de condición de la matriz X de 5.1 es bastante grande. Por lo tanto, por la definición 2 se puede decir que el problema está mal condicionado. Esto podría causar muchas preguntas al lector, incluyendo si hubiera sido mejor utilizar otros datos o ajustar un polinomio de grado menor.

Es importante recordar dos cosas. La primera es que los datos vienen del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST) lo cual los hace diseñados específicamente para dar problemas. El segundo punto es recordar que esta sección de la tesis evalúa la precisión numérica de los lenguajes. Por lo tanto, no debe ser una sorpresa que el problema está mal condicionado y algunos métodos fallen. Al contrario, los resultados muestran cuales procedimientos son numéricamente más precisos y rápidos.

Vale: Esto va en la parte de Julia

Leer los datos en Julia se hace de la siguiente manera.

```
julia> using CSV, DataFrames, Polynomials
julia> filip = CSV.read("filip_data.csv", DataFrame)
julia> x = filip.x
julia> y = filip.y
```

```
julia> k = 10 #grado del polinomio
julia> n = length(x) # número de observaciones
```

Para generar la matriz X se creó una función que tiene como argumento la variable k que representa el grado del polinomio que se quiere ajustar. Asimismo, k especifica el número de columnas de la matriz.

El resto del capítulo muestra la teoría y aplicación de la resolución de este problema en los tres lenguajes. En Julia se tuvieron que usar cuatro maneras distintas de resolver el problema. Estos métodos se presentan en el siguiente capítulo.

5.5. Métodos para solucionar el problema

5.5.1. *GLM*

Dado que el problema es ajustar una regresión lineal, el primer paquete que se piensa en utilizar es GLM ya que sus siglas se traducen a "Modelos Lineales Generalizados". En el capítulo 2.4.7 se da una explicación más detallada de su función principal, 1m.

En este ejercicio se busca ajustar un polinomio de grado 10 a los datos guardados con el nombre de filip. Por lo tanto, el código en Julia es

julia>
$$x_{fit} = lm(@formula(y ~ 1 + poly(x, 10)), filip)$$

donde poly(x, 10) es una función con sintaxis extendida que se utiliza específicamente para regresión polinomial. Esta función está descrita en la documentación del paquete StatsModels elaborado por Language (2021).

Los parámetros de family y link se pueden omitir ya que el ejercicio requiere el modelo más simple.

Los resultados para todos los métodos se encuentran en la sección 5.6. Es claro que para este método (GLM en las tablas de resultados 5.2, 5.3, 5.4) los cálculos no arrojaron un resultado correcto. Dado que NIST proporciona la respuesta fue claro observar que la estimación de los coeficientes no fue precisa.

5.5.2. Descomposición QR versión económica

Otro de los métodos para solucionar problemas de mínimos cuadrados es usar la descomposición QR. Por lo tanto, es el segundo método que se utilizó para obtener los valores β de 5.1.

Definición 3. La factorización QR de una matriz A de dimensiones $m \times n$ es el producto de una matriz Q de $m \times n$ con columnas ortogonales g una matriz g cuadrada g triangular superior (Garcia and Horn, 2017, g. 191).

Sin embargo, en este problema no es posible utilizar la factorización QR usual ya que las dimensiones de la matriz $X_{n\times m}=X_{82\times 11}$. Por lo tanto, X tiene rango r=10 < n, por lo que la matriz R de la descomposición QR es singular. Como consecuencia, no se puede generar una base ortonormal de R(X). A continuación se presenta la definición de una base ortonormal.

Definición 4. Una secuencia de vectores u_1, u_2, \ldots (finita o infinita) en un espacio de producto interno es ortonormal si

$$\langle u_i, uj \rangle = \delta_{ij} \ para \ toda \ i, j$$

Una secuencia ortonormal de vectores es un sistema ortonormal (Garcia and Horn, 2017, p. 147).

Definición 5. Una base ortonormal para un espacio de producto interno finito es una base que es un sistema ortonormal (Garcia and Horn, 2017, p. 149).

Sin embargo, el proceso de factorización QR se puede modificar usando una matriz de permutación para generar una base ortonormal.

Definición 6. Una matriz A es una matriz de permutación si exactamente una entrada en cada renglón y en calada columna es 1 y todas las otras entradas son 0 (Garcia and Horn, 2017, p. 183).

La idea del método QR modificado es generar una matriz de permutación P tal que

$$AP = QR$$
, donde $R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

En este caso, si se toma r como el rango de X entonces R_{11} es de dimensión $r \times r$ triangular superior y Q es ortogonal. Las primeras r columnas de Q forman una base ortonormal de R(X) Datta (2010). Además, la factorización QR versión económica siempre existe debido al siguiente teorema de (Datta, 2010, p. 532).

Teorema 5.2. Sea A una matriz de $m \times n$ con $rango(A) = r \leq min(m,n)$. Entonces, existe una matriz de permutación P de $n \times n$ y una matriz ortogonal Q de dimensiones $m \times m$ tal que

$$Q^T A P = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

donde R_{11} es una matriz triangular superior de tamaño $r \times r$ con entradas en la diagonal diferentes de cero.

El paquete LinearAlgebra en Julia tiene la función qr que permite obtener la descomposición QR versión económica.

```
### Con QR version economica
julia> using LinearAlgebra
julia> F = qr(X, Val(true))
julia> Q = F.Q
julia> P = F.P
julia> R = F.R
```

Para continuar resolviendo el problema original 5.1 y obtener los valores de los elementos de β se necesita hacer un poco de álgebra.

Por el teorema 5.2, sabemos que X siempre tiene descomposición QR versión económica. Es decir, XP = QR. Por otro lado, como P es matriz de permutación existe z tal que $Pz = \beta$.

Por lo tanto, ya hay una expresión para β que se puede sustituir en la ecuación 5.1 para obtener

$$y = X(Pz)$$
.

A la vez, sustituyendo en la fórmula de la descomposición QR

$$(XP)z = (QR)z.$$

Uniendo las dos ecuaciones anteriores, obtenemos

$$y = XPz = QRz$$
$$\implies y = QRz$$

Como tenemos los valores de $y,\ Q$ y R, podemos resolver para obtener los valores de z y finalmente obtener β haciendo

$$\beta = Pz$$

En Julia, esto se programa de la siguiente manera

Este método tampoco funcionó. En las tablas de resultados 5.2, 5.3, 5.4, las columnas QRvEcon muestran que el método parecia funcionar hasta llegar al polinomio de grado 10, donde falló. Con dos métodos fallidos es factible empezar a considerar que los datos son tan sensibles

que la propagación del error es tal que no permite un buen ajuste del polinomio. Sin embargo, se continuó buscando la solución usando otros métodos.

5.5.3. Descomposición de valores singulares

La tercer manera en la que se intento solucionar este problema fue usando la descomposición de valores singulares para obtener la matriz pseudoinversa de Moore-Penrose.

Definición 7. Sea A una matriz de $m \times n$ y sea $q = min\{m, n\}$. Si el rango de $A = r \ge 1$, sean $\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \cdots \ge \sigma_r > 0$ los eigenvalores positivos en orden decreciente de $(A^*A)^{1/2}$. Los valores singulares de A son

$$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r \ y \ \sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \dots = \sigma_q = 0.$$

Si A=0, entonces los valores singulares de A son $\sigma_1=\sigma_2=\cdots=\sigma_q=0$. Los valores singulares de $A\in M_n$ son los eigenvalores de $(A^*A)^{1/2}$ que son los mismos eignevalores de $(AA^*)^{1/2}$ (Garcia and Horn, 2017, p. 420)

Una de las aplicaciones de los valores singulares es para obtener la descomposición de valores singulares (DVS) usada para resolver ecuaciones lineales.

Teorema 5.3. Sea $A \in M_{m \times n}(F)$ diferente de cero y sea r = rango(A). Sean $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ los valores singulares positivos de A y definamos

$$\Sigma_r = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_r \end{pmatrix} \in M_r(R).$$

Entonces, existen matrices unitarias $U \in M_m(F)$ y $V \in M_n(F)$ tales que

$$A = U\Sigma V^* \tag{5.3}$$

donde

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0_{r \times (n-r)} \\ 0_{(m-r) \times r} & 0_{(m-r) \times (n-r)} \end{pmatrix} \in M_{m \times n}(R)$$

tiene las mismas dimensiones que A. Si m=n, entonces $U, V \in M_n(F)$ y $\Sigma = \Sigma_r \oplus 0_{n-r}$ (Garcia and Horn, 2017, p. 421).

La ecuación 5.3 con las características del teorema anterior es la definición de la descomposición en valores singulares (DVS). Además, las matrices U y V son matrices unitarias. Es decir,

$$UU^*u = u, \ \forall u \in Col(U)$$

$$VV^*v = v, \ \forall v \in Col(V)$$

Pseudoinversa de Moore-Penrose

Ya que se explicó la descomposición de valores singulares se puede definir su uso en la pseudoinversa de Moore Penrose.

Teorema 5.4. Sea A una matriz de dimensiones $m \times n$ de rango r con una descomposición en valores singulares de $A = U\Sigma V^*$ y valores singulares diferentes de cero $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r$. Sea Σ^{\dagger} una matriz de $n \times m$ definida como

$$\Sigma_{ij}^{\dagger} = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i} & \text{si } i = j \leq r \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Entonces $A^{\dagger} = V \Sigma^{\dagger} U^*$ y esta es la descomposición de valores singulares de A^{\dagger} (Spence et al., 2000, p. 414).

Con la ecuación anterior es claro que lo único que cambia al calcular la pseudoinversa es la matriz Σ . Esta nueva matriz A^{\dagger} tiene las siguientes propiedades

- $(A^T A)^{\dagger} A^T = A^{\dagger}$
- $(AA^T)^{\dagger}A = (A^{\dagger})^T$
- $(A^T A)^{\dagger} (A^T A) = A^{\dagger} A = V V^T$

Recordando que las dimensiones de la matriz $X_{n\times m}=X_{82\times 11}$. Como m< n, sabemos que hay más ecuaciones que variables desconocidas. Por lo tanto, el sistema lineal está sobredeterminado.

De la ecuación 5.1 se puede multiplicar por X^T para obtener

$$X^T X \beta = X^T y, \ y \in Col(V). \tag{5.4}$$

La ecuación 5.4 siempre da un sistema determinado (balanceado) López-Bonilla et al. (2018). Ahora bien, multiplicando 5.4 por $(X^TX)^{\dagger}$ y usando las propiedades de la matriz pseudoinversa que se mencionaron anteriormente podemos obtener

Vale: No sé si hablar aqui en 1era persona plural o seguir con el impersonal

$$(X^{T}X)^{\dagger}X^{T}X\beta = (X^{T}X)^{\dagger}X^{T}y$$

$$\iff X^{\dagger}X\beta = X^{\dagger}y$$

$$\iff VV^{T}\beta = X^{\dagger}y$$

$$\beta = X^{\dagger}y$$

.

Por lo tanto, la pseudo inversa de Moore Penrose da la solución de mínimos cuadrados de 5.1 (López-Bonilla et al., 2018).

En Julia, este método se puede programar en las tres líneas siguientes.

```
# # # Inversa de Moore Penrose
julia> N = pinv(X)
julia> aux = ones(k + 1)
julia> x_MP = N*y
```

Este método tampoco funcionó. Los resultados de este método corresponden a la columna MoorePenrose de las tablas 5.2, 5.3, 5.4. Al igual que el método anterior, los cálculos parecían prometedores hasta llegar al polinomio de grado 10. Por lo tanto, se continuó indagando más en los paquetes de Julia hasta encontrar *Polynomials*.

5.5.4. Polynomials

Polynomials es un paquete que proporciona aritmética básica, integración, diferenciación, evaluación y hallar raíces para polinomios univariados JuliaMath (2021). Para poder usar el paquete primero hay que instalarlo usando las ya mencionadas instrucciones 2.4.5.

El paquete Polynomials tiene una función llamada fit que ajusta un polinomio de grado \deg a x y y usando interpolación polinomial o aproximación por mínimos cuadrados JuliaMath (2021). La función toma tres variables como entrada. Las primeras dos entradas son las correspondientes a x y y de los datos a utilizar (en este caso, los datos filip). La tercera entrada, \deg , corresponde al grado que busco sea el polinomio, en este caso, grado 10).

A diferencia de los otros método que se utilizaron para este problema, la función fit usa el metódo Gauss-Newton para resolver sistemas de ecuaciones no lineales. Sin embargo, en este caso el problema es lineal. Esta fue la principal razón por la que este paquete no fue considerado al principio para resolver el problema.

La segunda razón es que a diferencia de la función 1m del paquete GLM, la función fit solamente aporta los coeficientes del ajuste del polinomio. Es decir, no da como resultado el error estándar, ni el valor p de la estimación.

El código en Julia es sumamente sencillo:

```
julia> using Polynomials
julia> x_pol = Polynomials.fit(x, y, 10)
```

Si se quisiera ampliar el análisis y observar, por ejemplo, el valor p de algún predictor se tendría que buscar otra manera de obtenerlo.

A pesar de que se podría pensar que la función dejan mucho que desear, es necesario agregarlo a esta sección de la tesis, ya que es el único método que funcionó. Las tablas de resultados 5.2, 5.3, 5.4 muestra que este es el único método que, en conjunto con R y Python da los resultados correctos.

5.6. Evaluación de los métodos

Es natural preguntarse si tal vez lo que está mal es la implementación de los algoritmos y, debido a esto, no solucionan el problema de manera correcta. Por tanto, para probar que los métodos estén programados de la manera correcta fueron sometidos a una serie de pruebas.

La primera prueba consistió en que, usando los datos filip, cada método ajustaba un polinomio de grado k de k = 1, 2, ..., 10. Al final, para cada polinomio de grado k se tenían cuatro resultados de ajuste (uno por cada método).

La segunda prueba consistió en comparar los resultados con R y Python. En ambos lenguajes se usaron los mismos datos filip y se calcularon todos los polinomios de grado k de k = 1, 2, ..., 10.

En R se utilizó la función lm(formula, data) explicada a mayor detalle en la sección 4.1. Este problema ya ha sido abordado por otros usuarios y resuelto por Brian Ripley. Ripley es un matemático británico que ha escrito muchos libros sobre programación y ha sido galardonado en múltiples ocasiones por sus aportaciones a la estadística. Sin duda, uno de sus mayores logros es la constante e importante aportación al desarrollo de R. Por lo tanto, el código que se utilizó para resolver este problema es el mismo que Ripley hizo público. Por otro lado, en Python se uso la función polyfit de NumPy explicado con más profundidad en la sección 3.2.1.

Finalmente, la tercera prueba fue medir el tiempo que tomaba a ambos lenguajes ejecutar sus respectivas funciones con los parámetros especificados. En R código es el siguiente

```
# Para polinomio de grado = 1
start <- Sys.time()
lm_1 <- lm(y ~ x, data = data, x = TRUE)
end <- Sys.time()

`resultados_grado_ 1`$R <- lm_1$coefficients
row.names(`resultados_grado_ 1`) <- c("b0", "b1")
X_1 <- lm_1$x

time_vec <- c(end - start)

# Para polinomios de grado > 1
```

```
for (i in 2:10){
  # Hacemos el modelo
  model \leftarrow paste("y \_ ~x", paste("+ \_I(x^", 2:i, ")",
                             sep='', collapse=''))
  # Lo convertimos en formula
  form <- formula (model)
  # Ejecutamos el modelo
  start <- Sys.time()</pre>
  lm.plus \leftarrow lm(form, data = data, x = TRUE)
  end <- Sys.time()</pre>
  time \leftarrow end - start
  \mathbf{time}\_\mathbf{vec} \mathrel{<\!\!\!-} \mathbf{c}(\mathbf{time}\_\mathbf{vec}\;,\;\;\mathbf{time})
  # Guardamos el df correspondiente a un auxiliar
  resultados_aux <- get(paste("resultados_grado_", i))
  # para unirle los coeficientes
  resultados_aux$R <- lm.plus$coefficients
  nombres \leftarrow \mathbf{c} ("b0")
  # Para el nombre de los renglones
  for (k in 1:i){
    nombres <- c(nombres, paste0("b", k))
  row.names(resultados_aux) <- nombres</pre>
  #Finalmente, hago el df final
  assign(paste("resultados_grado_", i), resultados_aux)
```

```
assign(paste("X_", i), lm.plus$x)
```

En Python se definió una función que calculara los coeficientes β , guardara los resultados en un dataframe y calculara el tiempo de ejecución.

```
def polynomial_fit (grado_pol):
        start_time = time.time()
        # Regresa el coeficiente de mayor potencia primero
        python_fit = np. polyfit(x, y, deg = grado_pol)
        # Lo movemos solo para que este en el
        # mismo orden que los demas metodos
        python_fit = np.flipud(python_fit)
        # Medimos el tiempo
        tiempo = time.time() - start_time
        # Guardamos los coeficientes en un dataframe
        resultado = pd. DataFrame(python_fit)
        # Cambiamos el nombre de la columna
        resultado.columns = ['Python']
        nombre_archivo = "res_python_gr" +
                str(grado_pol) + ".csv"
        resultado.to_csv(nombre_archivo)
```

return tiempo

Hacemos un df vacio para guardar los tiempos

```
column_names = ['Grado','Tiempos']
tiempo_df = pd.DataFrame(columns = column_names)

# Calculamos todos los ajustes
for grado in range(1, 11):
time_grado = polynomial_fit(grado)
time_grado = {'Grado': grado, 'Tiempos': time_grado}
tiempo_df = tiempo_df.append(time_grado, ignore_index = True)
```

No se mostraran las tablas con los resultados de todos los ajustes ya que es innecesario. Las tablas que sí se muestran son las que se considera tienen los resultados más relevantes.

Todos los métodos obtienen los resultados correctos en los ajustes de los polinomios de grado uno al cinco. La tabla 5.2 es evidencia de ello.

•	GLM [‡]	QRvEcon [‡]	MoorePenrose [‡]	Polynomials [‡]	R [‡]	Python [‡]
b0	4.3006543682	4.3006538792	4.3006538792	4.3006538792	4.3006538792	4.3006538792
b1	2.9237731063	2.9237726501	2.9237726501	2.9237726501	2.9237726501	2.9237726501
b2	0.9589166858	0.9589165208	0.9589165208	0.9589165208	0.9589165208	0.9589165208
b3	0.1481183596	0.1481183306	0.1481183306	0.1481183306	0.1481183306	0.1481183306
b4	0.0106383672	0.0106383648	0.0106383648	0.0106383648	0.0106383648	0.0106383648
b5	0.0002825197	0.0002825197	0.0002825197	0.0002825197	0.0002825197	0.0002825197

Figura 5.2. Resultados del polinomio grado 5

Los problemas comienzan cuando se calcula el polinomio de grado 6. El primer método utilizado, GLM, comienza a fallar como se puede observar en la tabla 5.3. Esto es de especial interés ya que, en teoría, este paquete está hecho para calcular el ajuste a modelos lineales. Este método no se recupera con los polinomios de mayor grado y termina fallando rotundamente.

•	GLM [‡]	QRvEcon [‡]	MoorePenrose [‡]	Polynomials [‡]	R [‡]	Python
b0	1.9043148726	-1.809755e+01	-1.809755e+01	-1.809755e+01	-1.809755e+01	-1.809755e+01
b1	0.0000000000	-2.229664e+01	-2.229664e+01	-2.229664e+01	-2.229664e+01	-2.229664e+01
b2	-0.4810934568	-1.057694e+01	-1.057694e+01	-1.057694e+01	-1.057694e+01	-1.057694e+01
b3	-0.2185586558	-2.598110e+00	-2.598110e+00	-2.598110e+00	-2.598110e+00	-2.598110e+00
b4	-0.0403353177	-3.486584e-01	-3.486584e-01	-3.486584e-01	-3.486584e-01	-3.486584e-01
b5	-0.0033914863	-2.424444e-02	-2.424444e-02	-2.424444e-02	-2.424444e-02	-2.424444e-02
b6	-0.0001074643	-6.834185e-04	-6.834185e-04	-6.834185e-04	-6.834185e-04	-6.834185e-04

Figura 5.3. Resultados del polinomio grado 6

En cambio, el resto de los métodos arrojan resultados correctos hasta el polinomio de grado 9. Cuando se busca calcular el polinomio de grado 10, solamente las columnas Polynomials, R y Python muestran los resultados correctos.

•	GLM [‡]	QRvEcon [‡]	MoorePenrose [‡]	Polynomials [‡]	R [‡]	Python [‡]
b0	0.000000e+00	9.013426e+00	8.443046e+00	-1.467490e+03	-1.467490e+03	-1.467490e+03
b1	0.000000e+00	1.652546e+00	1.364986e+00	-2.772180e+03	-2.772179e+03	-2.772179e+03
b2	0.000000e+00	-5.767606e+00	-5.350763e+00	-2.316371e+03	-2.316371e+03	-2.316371e+03
b3	0.000000e+00	-3.863666e+00	-3.341911e+00	-1.127974e+03	-1.127974e+03	-1.127974e+03
b4	0.000000e+00	-6.703657e-01	-4.064616e-01	-3.544782e+02	-3.544782e+02	-3.544782e+02
b5	0.000000e+00	1.806044e-01	2.577266e-01	-7.512421e+01	-7.512420e+01	-7.512420e+01
b6	3.686442e-03	1.055234e-01	1.197715e-01	-1.087532e+01	-1.087532e+01	-1.087532e+01
b7	1.917312e-03	2.144494e-02	2.314088e-02	-1.062215e+00	-1.062215e+00	-1.062215e+00
b8	3.758850e-04	2.277483e-03	2.403994e-03	-6.701912e-02	-6.701911e-02	-6.701911e-02
b9	3.281913e-05	1.262264e-04	1.316188e-04	-2.467811e-03	-2.467811e-03	-2.467811e-03
b10	1.074670e-06	2.889643e-06	2.990001e-06	-4.029625e-05	-4.029625e-05	-4.029625e-05

Figura 5.4. Resultados del polinomio grado 10

Finalmente, se puede ver la tabla 5.5 que corresponde a los tiempos que le tomo a cada método hacer los cálculos. Cada columna corresponde

al método utilizado mientras que los reglones representan el grado del polinomio.

	↑ GLM	QRvEcon [‡]	MoorePenrose	Polynomials	‡ R	Python [‡]
k_1	0.3796052	0.0000533	0.0000453	4.56e-05	0.0484938622 secs	0.068188
k_2	0.3091849	0.0000520	0.0048597	4.00e-05	0.0019960403 secs	0.001999
k_3	0.3122847	0.0000536	0.0000745	4.31e-05	0.0013589859 secs	0.000544
k_4	0.3006190	0.0000850	0.0000556	6.36e-05	0.0010089874 secs	0.000000
k_5	0.3340590	0.0000590	0.0000651	5.47e-05	0.0020928383 secs	0.000000
k_6	0.3071109	0.0000665	0.0000736	6.48e-05	0.0009071827 secs	0.001147
k_7	0.3073423	0.0000606	0.0000677	5.98e-05	0.0009999275 secs	0.000000
k_8	0.3023170	0.0000695	0.0000910	8.88e-05	0.0019991398 secs	0.002000
k_9	0.3044160	0.0000743	0.0000749	7.81e-05	0.0017678738 secs	0.000000
k_10	0.2995928	0.0019696	0.0000935	8.97e-05	0.0021109581 secs	0.000000

Figura 5.5. Tiempos de ejecución para cada método

De los métodos programados en Julia, el más rápido es el hecho con el paquete Polynomials. MoorePenrose y QRvEcon no tardan mucho más, pero GLM es el que más tiempo toma. Aunque un tercio de segundo no sea mucho tiempo es mucho más del que le toma a los otros métodos. Como era de esperarse, los procedimientos hechos en R y Python toman muy poco tiempo.

Estos resultados dan pie a preguntarse la razón por la que la mitad de los método falla justo al hacer el cálculo del polinomio de grado 10, más no de los anteriores. En la siguiente sección se indaga más en este tema.

5.7. Opinión de la autora

Este ejercicio fue el primero que hice para la tesis y fue el más demandante mentalmente. El reto para mí, como autora, fue buscar cuatro formas diferentes de resolver un problema que, por momentos, pareció imposible.

Como usuaria de Julia quedo muy insatisfecha con los resultados, especialmente con los paquetes GLM y Polynomials. Probablemente hay maneras numéricamente mejores para programar la descomposición QR de una matriz y el cálculo de la pseudo inversa de Moore Penrose.

Sin embargo, los paquetes deben ser una herramienta para evitar hacer los cálculos que vienen directo del álgebra. El paquete GLM me decepcionó desde un inicio. Debió haber sido el primero en funcionar y por el contrario, fue el primero que falló.

Por otro lado, aunque el paquete Polynomials da la respuesta correcta en un tiempo muy corto, solamente da los resultados de los coeficientes. Este paquete se enfoca en todo lo relacionado con polinomios por lo que uno no debería esperar que haga un ajuste muy completo. Sin embargo, es el único que logró el resultado correcto.

R y Python no decepcionan ni sorprenden. Ambos son lenguajes que llevan mucho más tiempo siendo desarrollados por lo que la verdadera sorpresa sería que no funcionaran. Aun así, en el caso de R hay que saber tratar las variables de manera especial mientras que Python da los resultados muy fácil y con pocas líneas de código.

En conclusión, este ejercicio fue retador para mí y para Julia. En el futuro, si tuviera la opción de decidir en que lenguaje hacer el ajuste de un modelo lineal sin dudas elegiría a Python.

Capítulo 6

Análisis de Regresión

Vale: De verdad que no sé que título ponerle

"Una actividad importante en estadística es la creación de modelos estadísticos que, se espera, reflejen aspectos importantes del objeto de estudio con algún grado de realismo. En particular, el objetivo del análisis de regresión es construir modelos matemáticos que describan o expliquen relaciones que pueden existir entre variables" Seber and Lee (2003).

El uso de la regresión como método para mostrar la relación entre dos o más variables se remonta al siglo XIX. Fue Sir Francis Galton en 1875 quien usando semillas de guisantes hizo el primer análisis de regresión. Galton distribuyó paquetes de dichas semillas a sus amigos para que ellos las sembraran y se las regresaran. Los paquetes tenían casi el mismo peso, siendo *casi* la palabra clave ya que los paquetes tenían una variación pequeña de peso. Así, Galton pudo establecer una relación entre los pesos de las semillas *madre* contra las semillas *hija*, Stanton (2001).

Ciertamente, el análisis de regresión se ha ido desarrollando de

acuerdo a las demandas del tiempo. Hoy en día las personas generamos datos en todo momento. En el 2020 se calculó que cada segundo en conjunto las personas del mundo generaron 1.7 MB de datos. Si no se entiende la magnitud de este número, se ofrece de comparación el archivo PDF de este trabajo. Esta tesis de licenciatura constituida por más de 100 páginas que incluyen imágenes, tablas y ecuaciones pesa menos de 1 MB. Pero no se necesita escribir una tesis para generar datos. Las personas lo hacemos prácticamente sin darnos cuenta al crear contenido en redes sociales, enviar mensajes de texto, hacer búsquedas en internet, etc.

La teoría estadística es lo suficientemente robusta para que no exista diferencia entre analizar 50 o 5 millones de datos. Sin embargo, lo que se necesita es el constante desarrollo de programas con la capacidad de leer, analizar y guardar extensas cantidades de información. En este capítulo se muestra el cálculo de una regresión lineal múltiple con un gran número de datos en Julia, R y Python.

6.1. El modelo

En capítulos anteriores se habla de la regresión lineal múltiple. Sin embargo, se considera relevante plantear el modelo una vez más. El modelo de regresión lineal definido en (Gelman et al., 2021, p. 146) es

$$y_i = \beta_0 + \beta_i X_{i1} + \dots + \beta_k X_{ik} + \epsilon_i$$
, para $i = 1, \dots, n \text{ y } j = 1, \dots, p$
(6.1)

donde los errores son independientes y siguen una distribución normal con media cero y desviación estándar σ . En este caso, y_i se refiere a la respuesta al nivel i-ésimo del regresor; x_{ij} es el j-ésimo regresor al

i-ésimo nivel; β_0 es la ordenada al origen; y β_j es el coeficiente (tasa de cambio) del j-ésimo regresor Barrios (2020).

Es útil entender las ecuaciones con un ejemplo. Imagine que trabaja en un laboratorio donde se estudia el crecimiento de girasoles. Se tienen 50 plantas que se exponen a diferentes cantidades de agua, luz solar y tierra con abono. Se busca relacionar el crecimiento de los girasoles con cambios en los factores ambientales ya mencionados. Por lo tanto, se tiene una tabla donde la primera columna se refiere al crecimiento de la planta medido en centímetros. La siguientes tres columnas registran las cantidades de agua, luz solar y tierra a la que se expone cada planta. Por tanto, cada renglón representa uno de los 50 girasoles del experimento.

La variable respuesta y_i se refiere al crecimiento del girasol i. Como hay 50 plantas, n=50. Por otro lado, los regresores son el agua, la luz solar y la tierra con abono. Sea el agua el primer regresor, $x_{9,1}$ representa el nivel de agua del girasol 9. Lo mismo sucede con la luz y tierra. En este caso, j=3 porque hay tres regresores. Finalmente, β_j es el efecto que tienen los regresores en el crecimiento de los girasoles.

De manera matricial, la ecuación 6.1 se puede escribir como

$$y_i = X_i \beta + \epsilon_i$$
, para $i = 1, \dots, n$ (Gelman et al., 2021, p. 146)

donde X es una matriz de $n \times k$ donde su i-ésimo renglón es X_i . Adicionalmente, se pide que la matriz X sea de rango completo.

6.2. Los datos

Buscando seguir con la idea de que los modelos estadísticos pueden ayudar a formar una explicación de la realidad, se decidió utilizar información de México y sus habitantes proveniente del Censo 2020. El Censo de Población y Vivienda (Censo) 2020 se publicó por el

Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI) y se pueden encontrar en la página https://www.inegi.org.mx/programas/ccpv/2020/default.html. En México, el Censo se captura cada 10 años y se busca tener una muestra de todo el territorio nacional.

El objetivo del Censo es "es producir información sobre el volumen, la estructura y la distribución espacial de la población, así como de sus principales características demográficas, socioeconómicas y culturales; además de obtener la cuenta de las viviendas y sus características tales como los materiales de construcción, servicios y equipamiento, entre otros", ??.

Recabar toda la información anterior es una labor demandante que se divide en dos tipos de cuestionarios llamados "básico" y "ampliado". En el segundo las preguntas incluyen más especificaciones sobre los residentes del territorio nacional, las viviendas particulares y los migrantes internacionales. Mientras que el primero busca información general centrada en obtención de servicios públicos en el hogar y escolaridad de sus residentes.

En este trabajo los resultados que se utilizan provienen del cuestionario ampliado cuyas 103 preguntas resultan en alrededor de 200 variables de estudio. Más aún, el Censo fue aplicado a 4 millones de viviendas a lo largo de la República Mexicana que resultó en la recaudación de información de más de 15 millones de personas.

En este caso se eligió un tema de interés personal: los ingresos. Más específicamente, se busca usar la regresión lineal múltiple para observar el efecto de diferentes regresores al ingreso de cada persona. Usualmente, es trabajo del estadístico construir un modelo basándose en una combinación de lógica, referencias y experiencia. En este caso, el modelo final que se ajustó es

Vale:
Arreglar
esta
referencia

Vale: Se ve horrible, ayuda

 $ingresos \sim horas_{trabajadas} + sexo + edad + escolaridad + entidad_{trabajo} +$ $posicion_{laboral} + alfabetismo + aguinaldo + vacaciones + servicio_{medico}$ (6.2)

6.3. Planteamiento del problema

En Censo mexicano cumple con el propósito de ser un estudio extensivo sobre la vida de sus residentes. Antes de hacer cualquier tipo de análisis se debe filtrar la información. Para esto, es necesario entender la estructura de las encuestas y la relación entre ellas. Por eso, el INEGI también proporciona el diccionario ampliado que se encuentra en la página https://www.inegi.org.mx/programas/ccpv/2020/default.html#Microdatos dentro del apartado Documentación de la base de datos. La información que aporta el diccionario es clave ya que expone como los códigos y las nomenclaturas que permiten entender como se paso de tener respuestas en hojas de papel a tenerlas en una base de datos.

Los resultados del Censo se presentan en tres partes: Viviendas, Personas y Migrantes. En esta ocasión, se utilizó la base de datos correspondientes a Personas ya que contiene la información necesaria para hacer el ajuste. La cantidad de datos con la que se está trabajando es extensa, por lo que el primer paso es seleccionar las columnas necesarias y desechar el resto. Después, se agregaron los siguientes filtros

1. Se seleccionaron solamente las personas que tienen un trabajo remunerado. Es decir, no se consideró a las personas que se ocupan de las labores del hogar, son jubiladas o pensionadas, son estudiantes o tienen alguna incapacidad que les impida tener un sueldo.

- 2. Se descartó a las personas que viven y trabajan fuera de la República Mexicana.
- Se obtuvieron a las personas que especificaron horas trabajadas e ingreso ganado.
- 4. Cada regresor viene de una pregunta hecha y tiene una variable asignada. Si el entrevistado decide no responder a alguna pregunta se marca la respuesta como No especificado. En este caso, se eliminaron a las personas que no respondieron alguna de las preguntas que corresponden a los regresores.

Con los filtros anteriores la cantidad de datos con los que se trabaja pasa de ser cerca de 15 millones a poco más de 3.5 millones. Más aún, todo el proceso dura alrededor de 20 minutos para ejecutarse por lo que se recomienda guardar la base de datos filtrada para evitar hacer estos comandos constantemente. La selección de información se ejecutó en Julia y se guardó para utilizarla posteriormente en R y Python. El código de lectura de la base de datos y los comandos para los filtros es el siguiente. Se debe notar que a pesar de ser un código largo, está debidamente comentado.

julia> using CSV, DataFrames, StatsBase, GLM, Random, CategoricalArrays

Equivalente a set.seed de R
julia> Random.seed!(99)

```
# Leer la base de datos
# (toma alrededor de 4 minutos en cargar)
julia> personas = CSV.read("Personas00.csv", DataFrame)
# Lista con columnas necesarias para el ajuste
julia> col_sel = ["ID_PERSONA", "ENT", "SEXO", "EDAD",
"NIVACAD", "ALFABET", "INGTRMEN", "HORTRA", "CONACT",
"SITTRA", "ENT_PAIS_TRAB", "AGUINALDO", "VACACIONES",
"SERVICIO_MEDICO", "UTILIDADES", "INCAP_SUELDO",
"SAR_AFORE", "CREDITO_VIVIENDA"]
# Se seleccionan de la base de datos
julia> personas_filt = personas[:, col_sel]
# # # FTI.TRO 1
julia > cond_act = [10, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]
julia> personas_filt = subset(personas_filt,
        :CONACT => ByRow(in(cond_act)),
        skipmissing = true)
# # # FILTRO 2
julia> personas_filt = subset(personas_filt,
        :ENT_PAIS_TRAB \Rightarrow ByRow(<(33)),
        skipmissing = true)
julia> personas_filt = subset(personas_filt,
        :ENT => ByRow(<(33)), skipmissing = true)
```

```
# # # FILTRO 3
julia> personas_filt = subset(personas_filt,
        :HORTRA => ByRow(!=(999)), skipmissing = true)
julia> personas_filt = subset(personas_filt,
        :INGTRMEN => ByRow(!=(999999)),
        skipmissing = true)
# # # FILTRO 4
julia> function diferente_a(dataframe, columna, condicion)
    dataframe = subset(dataframe,
    columna => ByRow(!=(condicion)), skipmissing = true)
    return dataframe
end
julia> categorias_9 = ["SEXO", "AGUINALDO", "VACACIONES",
"SERVICIO_MEDICO", "UTILIDADES",
"INCAP_SUELDO", "SAR_AFORE",
"CREDITO_VIVIENDA", "ALFABET",
"STTTRA"]
julia> categorias_99 = ["NIVACAD"]
julia> for i = 1:length(categorias_9)
    personas_filt = diferente_a(personas_filt,
    categorias_9[i], 9)
end
```

```
julia> for i = 1:length(categorias_99)
    personas_filt = diferente_a(personas_filt,
        categorias_99[i], 99)
end
# Finalmente, guardo el nuevo dataframe
julia> CSV.write("personas_filtradas.csv", personas_filt)
```

6.4. Regresiones

Vale: No estoy segura de como ponerle de nombre a esta seccion

Lo primero que se debe verificar es que la lectura de datos haya clasificado las variables de manera correcta. En este caso, la mayoría de las variables del ajuste son categóricas, pero Julia las lee como Int64. Por lo tanto, se deben transformar esas columnas del dataframe como se muestra a continuación.

Si se omitiera el paso anterior la regresión no sería correcta ya que se considerarían a las regresores de tipo categórico como variables continuas. Por tanto, no proporcionarían el efecto de cada categoría en la variable de respuesta.

El objetivo de esta tesis es mostrar las capacidades de los lenguajes de programación por lo que se tomó la ecuación 6.2 y se quitaron algunas variables. Se puede pensar como que se tomaron diferentes subconjuntos de variables y, con ellas, se hizo el análisis de regresión para notar si había cambios en la precisión del ajuste. La variable de respuesta se mantuvo igual en todos los ahora denominados sub-ajustes.

Para el primer *sub-ajuste* se tomaron las primeras 5 variables de la ecuación 6.2 y se le nombró fit5 (ya que tiene 5 regresores). Es decir, la ecuación fit5 es

 $ingresos \sim horas_{trabajadas} + sexo + edad + escolaridad + entidad_{residencia}$

El segundo *sub-ajuste* llamado fit6 tiene los mismos 5 regresores que fit5 más uno extra, la posición laboral. Por tanto, la ecuación fit6 queda de la siguiente manera

 $ingresos \sim horas_{trabajadas} + sexo + edad + escolaridad + entidad_{residencia} + posicion_{local} + posi$

Las ecuaciones fit5 y fit6 siguen el mismo orden que 6.2. Esto no es una coincidencia. El orden de los regresores en la ecuación 6.2 está pensado precisamente para que cada variable sumada se agregue al conjunto de variables anterior y cree una nueva ecuación fit.

6.4.1. Observaciones

Vale: Tampoco sé como nombrar esta seccion

Si Galton pudiera ver los alcances que tiene su experimento de semillas probablemente se desmayaría de la emoción. Él mismo estaría de acuerdo con que no es lo mismo hacer un ajuste con 5 observaciones a hacer uno con 5 millones de ellas. Tal vez el código es el mismo, pero en el trabajo de máquina se observan cambios en tiempo de ejecución y precisión numérica. En esta sección se explica como se midieron los cambios en ambos factores.

Cada una de las ecuaciones fit ya mencionadas se ejecutaron con muestras de 500, 5 mil, 50 mil, 500 mil y 2.5 millones de observaciones. Es decir, se usaron cada una de las ecuaciones fit para el ajuste de modelos con las cinco cantidades antes mencionadas. La elección de observaciones se hizo al azar usando el comando sample en Julia. Una vez seleccionadas, se guardaba el dataframe generado para usar exactamente los mismos datos en R, Python y todos los ajustes. Guardar las muestras generadas tiene el propósito de poder utilizar la misma información en los ajustes y obtener así, un punto de comparación en la precisión del cálculo de los coeficientes.

La ejecución de los anterior es repetitivo por lo que se buscó fuera hecho de la manera más rápida y eficiente posible. Se desarrolló una función para cada fit cuyos argumentos fueran la cantidad de observaciones que se está utilizaron y el nombre con el que se guarda el archivo. El nombre de las funciones coinciden con la cantidad de regresores que se están utilizando.

Si ya se tiene conocimiento de programación, se puede notar que crear una función para cada modelo resulta repetitivo. Se pudo haber desarrollado una sola función que también tomara como argumento la formula a utilizarse en el ajuste. Sin embargo, se decidió no hacer de esa forma ya que se consideró de suma importancia tener la fórmula escrita en cada función.

Debido a la similitud entre funciones y su ejecución se muestran solamente lo correspondiente a fit5 y fit10 a manera de ejemplo. El código para la función fit5 es el siguiente.

```
### FTT BASE ###
julia> function fit5(cantidad_sample, nombre_facil)
    nombre_fit = "fit5"
    sample_rows = sample(1:nrow(data),
            cantidad_sample, replace=false)
   df_sample = data[sample_rows, :]
   nombre_completo = nombre_facil*"_"*nombre_fit*".csv"
    # Guardamos el documentos para usarlo en R y Python
    CSV.write(nombre_completo, df_sample)
    # Se hace el ajuste
    sample_fit = lm(@formula(INGTRMEN ~ HORTRA + SEXO +
            EDAD + NIVACAD + ENT_PAIS_TRAB), df_sample)
    aux = "res "
   nombre_completo = aux*nombre_completo
   CSV.write(nombre_completo, coeftable(sample_fit))
end
# Se aplica la función para las observaciones
julia> fit5(500, "500")
julia > fit5(5000, "5mil")
```

```
julia > fit5(50000, "50mil")
     julia> fit5(500000, "500mil")
     julia> fit5(2500000, "2500mil")
Por otro lado, el código para fit10 es el siguiente.
     ### FTT 10###
     julia> function fit10(cantidad_sample, nombre_facil)
         nombre_fit = "fit10"
         sample_rows = sample(1:nrow(data), cantidad_sample,
                 replace=false)
         df_sample = data[sample_rows, :]
         nombre_completo = nombre_facil*"_"*nombre_fit*".csv"
         # Guardamos el documentos para usarlo en R
         CSV.write(nombre_completo, df_sample)
         # Hacemos el fit
         sample_fit = lm(@formula(INGTRMEN ~ HORTRA + SEXO +
                 EDAD + NIVACAD + ENT_PAIS_TRAB + SITTRA +
                 ALFABET + AGUINALDO + VACACIONES +
                 SERVICIO_MEDICO), df_sample)
         aux = "res_"
         nombre_completo = aux*nombre_completo
         CSV.write(nombre_completo, coeftable(sample_fit))
```

end

```
# Fit 10: Fit 5 + SITTRA + ALFABET + AGUINALDO +
# VACACIONES + SERVICIO_MEDICO
julia> fit10(5000, "500")
julia> fit10(50000, "5mil")
julia> fit10(500000, "500mil")
julia> fit10(500000, "2500mil")
```

6.5. Resultados y Conclusiones

Independientemente del modelo fit que se utilice, la mayoría de las variables son categóricas por lo cual tienen diferentes niveles. Por ejemplo, la variable NIVACAD correspondiente al último nivel educativo aprobado por una persona tiene 14 niveles, desde Preescolar hasta Doctorado. De la misma manera, la variable ENT_PAIS_TRAB corresponde a la entidad donde la persona trabajó más recientemente tiene 32 posibles respuestas (niveles) que corresponden a cada uno de los estados de la república. Si se cuentan los niveles de cada factor, al final en el modelo con más variables fit10 se tiene un total de 54 regresores. La tabla 6.1 es una muestra resumida de los resultados obtenidos usando 2.5 millones de observaciones en el modelo fit10.

Vale: Alguna idea para arreglar esta tabla?

Nombre	Coeficiente	Error estándar	t	$\Pr(> t)$	95 % ir
Ordenada al origen	4133.26	125.42	32.95	$4.16e^{-238}$	3887
SEXO:3	-1407.49	20.27	-69.42	0	-144'
EDAD	33.30	0.72	46.12	0	31.
NIVACAD:1	208.16	209.00	0.99	0.32	-201
NIVACAD:2	287.16	68.59	4.18	$2.38e^{-05}$	152
NIVACAD:3	629.53	71.20	8.84	$9.42e^{-19}$	489
i :					
SITTRA:3	-692.44	32.10	-21.57	$3.30e^{-103}$	-755
ALFABET:3	-544.43	66.47	-8.19	$2.59e^{-16}$	-674
AGUINALDO:2	-459.48	34.30	-13.39	$6.51e^{-41}$	-526
VACACIONES:4	-843.60	38.65	-21.83	$1.31e^{-105}$	-919
SERVICIO_MEDICO: 6	-1110.25	34.21	-32.46	$4.91e^{-231}$	-117

Tabla 6.1. Resultados para el modelo fit10 con 2.5 millones de observaciones en Julia

Vale: Pongo una tabla donde se comparen los coeficientes de Julia, R y Python para algún ajuste? o solo con que diga como se programo en R y Python es suficiente?

Como se observa en la tabla 6.1, Julia no solo da el cálculo de los coeficientes, también da indicadores como lo son el error estándar y el intervalo de confianza.

En R se utilizó la función 1m para hacer los ajustes mientras que en Python la función LinearRegression() del paquete sklearn explicado a detalle en la sección 3.2.4. En los tres lenguajes los ajustes fueron rápidos y los resultados mostraron la misma precisión.

En este ejercicio el paquete GLM de Julia cumple su propósito de ajustar el modelo de manera correcta. Más aún, el paquete también

Vale:
agrego
tabla de
tiempos?

proporciona los estimadores necesarios para un análisis completo de regresión. La función 1m de R también presenta la tabla de estimadores mientras que en Python si bien no se presenta como tabla, existen los comandos para obtener los estimadores.

En resumen, los tres lenguajes Julia, R y Python proporcionan herramientas que permiten hacer leer un conjunto de datos extenso y ajustar un modelos lineal. Más aún, los lenguajes ofrecen herramientas para calcular los estimadores clave para hacer un análisis de regresión. Encontrar que Julia sí puede utilizarse para hacer un análisis de regresión fue una grata sorpresa, ya que el ejercicio del capítulo anterior disminuyó mi confianza en la capacidad de análisis de datos del lenguaje. Sin embargo, investigando sobre las capacidades de Julia se encontró en repetidas ocasiones que es un lenguaje con un propósito muy claro: ser el lenguaje más eficiente con la mayor cantidad de aplicaciones posible. Por lo tanto, en el siguiente capítulo se cambia el enfoque de análisis de regresión para presentar un problema de discriminación de modelos en diseños de experimentos.

Capítulo 7

MDopt

Una de las razones por las que decidí estudiar matemáticas aplicadas es justamente por la parte de 'aplicadas'. Cuando en los cursos de estadística comencé a aprender sobre modelos que pueden describir información real, mi sorpresa y emoción fueron auténticas. Sin embargo, en esas clases también aprendí que hay muchos modelos posibles para un conjunto de datos y no hay una sola manera de elegir el mejor modelo. Por lo tanto, para darle continuidad al tema de modelos lineales decidí abordar el problema de discriminación de modelos usando el método con el criterio MD, Model Discrimination propuesto por Box y Hill.

En primer lugar, hay que discriminar entre las variables o factores que realmente afectan la variable de respuesta de las que no. Para esto se puede utilizar el método bayesiano descrito por Ana Patricia Vela Noyola (2022). Hay ocasiones donde utilizando este método es muy fácil determinar si un factor afecta o no la variable de respuesta. Sin embargo, hay ocasiones donde los resultados son ambiguos y pareciera que hay varios modelos que describen los datos. Por lo tanto, la estrategia que

se usa es agregar ensayos adicionales específicos que, una vez agregados a los ensayos originales, darán una idea más clara sobre cuál es el mejor modelo.

Uno de estos métodos es el que utiliza el criterio MD, de *Model Discrimination*. La idea de este criterio es elegir ensayos que permitan la máxima discriminación posible entre los modelos probables Meyer et al. (1996).

En primer lugar, expongo un resumen del método completo descrito por Meyer et al. (1996) para la discriminación de modelos. Posteriormente, expongo la explicación detallada y matemática del criterio MD y el algoritmo de intercambio. Finalmente, hago la comparación entre los tres lenguajes con dos ejemplos.

7.1. Metodología completa

El proceso de identificación de los factores activos de un modelo no es sencillo ya que incluye pasos que usan estadística bayesiana. La explicación detallada está fuera del alcance de este trabajo, pero se puede encontrar en Meyer et al. (1996). Sin embargo, daré un breve resumen para tener el contexto donde se usan el criterio MD y el algoritmo de intercambio. Los detalles matemáticos están explicados en las siguientes secciones.

Supongamos que voy a realizar un experimento. Para esto, tengo que hacer un diseño con los factores que voy a incluir, sus niveles y los ensayos que voy a hacer. Como experta en el experimento debo tener una idea de cuáles modelos son los más probables a describir el experimento. Este conocimiento a priori se le denomina $P(M_i)$.

Después, ya que realicé el experimento tengo los niveles que use para cada factor y la respuesta obtenida Y. Con esta nueva información

puedo calcular la probabilidad de que cada modelo M_i sea el correcto. Es decir, calculo $P(M_i|Y)$. Además, puedo calcular P_j , la probabilidad de que el factor j esté activo. Las probabilidades más altas me indican cuáles son los posibles factores activos.

Si hay una clara diferencia entre las probabilidades P_j de los factores entonces puedo separar los activos de los no activos. En cambio, si no hay una clara diferencia entre probabilidades P_j ? explica que se deben hacer más ensayos para discriminar entre los posibles modelos.

En la elección de esos ensayos es donde entra el criterio MD ya que es un número que indica cuales ensayos vale la pena repetir para obtener la mayor diferencia en el vector respuesta Y. Entre mayor sea la diferencia en Y, más fácil se puede discriminar entre modelos. El algoritmo de intercambio se usa para calcular el criterio MD para todos las posibles combinaciones de ensayos de forma efectiva. El diagrama 7.1 muestra la explicación anterior.

7.2. Criterio MD

Lo siguiente es la explicación matemática que viene en el artículo de Meyer et al. (1996).

Supongamos que tenemos un experimento factorial fraccionario con k factores. Sea Y el vector de respuestas de tamaño $n \times 1$. El modelo que mejor describe a Y depende de cuales factores están activos además de que el análisis debe considerar todas las posibles combinaciones de dichos factores.

Sea M_i el modelo con una combinación particular de factores activos f_i donde $0 \le f_i \le k$. Condicionado a que M_i sea el modelo verdadero, asumimos un modelo lineal normal usual $Y \sim N(X_i\beta_i, \sigma^2 I)$. La matriz X_i es la matriz de regresión para M_i e incluye los efectos principales para

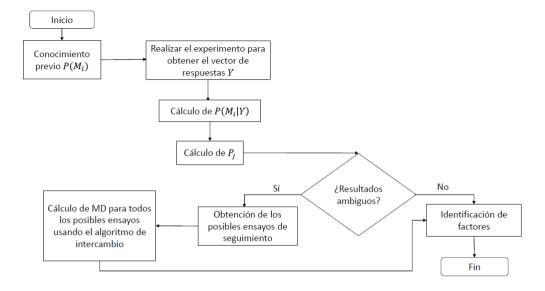


Figura 7.1. Diagrama de metodología descrita por Meyer et al. (1996)

cada factor activo y sus interacciones hasta cualquier orden deseado. Sea t_i el número de efectos (sin incluir el término constante) en M_i . Denotemos a M_0 como el modelo sin factores activos.

Ahora asignaremos distribuciones a priori no informativas al término constante β_0 y el error la desviación estándar σ que serán comunes para todos los modelos. Entonces, $p(\beta_0, \sigma) \propto \frac{1}{\sigma}$. El resto de coeficientes β_i tienen distribuciones normales a priori con media 0 y desviación estándar $\gamma\sigma$.

Finalmente, hay que agregar probabilidades a priori a cada uno de los modelos posibles. La regla de Pareto, o *sparsity of effects principle* dice que cuando hay varias variables, el sistema es más probable que esté dominado por los efectos principales e interacciones de orden bajo Montgomery (2017). En otras palabras, buscamos pocos factores que sean los principales y que la combinación entre ellos sea de orden bajo. Por lo tanto, podemos asumir que existe una probabilidad π , $0 < \pi < 1$ que cualquier factor esté activo. Además, asumimos que la creencia a priori de que un factor esté activo es independiente de las creencias de los demás factores. Entonces, la probabilidad a priori del modelo M_i es $P(M_i) = \pi_i^f (1 - \pi)^{k-f_i}$.

Una vez observado el vector de datos Y, podemos actualizar las distribuciones de los parámetros para cada modelo y la probabilidad de que cada modelo sea válido. La probabilidad posterior de que M_i sea el modelo correcto es

$$P(M_i|\mathbf{Y}) \propto \pi_i^f (1-\pi)^{k-f_i} \gamma^{-t_i} |\Gamma_i + X_i' X_i|^{-1/2} S_i^{-(n-1)/2},$$

$$\hat{\beta}_i = (\Gamma_i + X_i' X_i)^{-1} X_i' \mathbf{Y}, \tag{7.1}$$

$$\Gamma_i = \frac{1}{\gamma^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{t_i} \end{pmatrix} \tag{7.2}$$

У

$$S_i = (\mathbf{Y} - X_i \hat{\beta}_i)'(\mathbf{Y} - X_i \hat{\beta}_i) + \hat{\beta}_i' \Gamma_i \hat{\beta}_i. \tag{7.3}$$

Es importante notar que las probabilidades $P(M_i|\mathbf{Y})$ pueden ser sumadas sobre todos los modelos que inclutyan al factor j para calcular la probabilidad posterior P_j de que el factor j está activo,

$$P_j = \sum_{M_i: factorjactivo} P(M_i | \mathbf{Y}) \tag{7.4}$$

El conjunto de probabilidades $\{P_j\}$ da un resumen de la actividad de cada uno de los factores del experimento.

Si utilizara el análisis bayesiano, el experimento claramente sugeriría un modelo M_i cuando la probabilidad posterior $P(M_i|\mathbf{Y})$ es cercano a 1. Sin embargo, las conclusiones con ambiguas cuando hay varios modelos con probabilidades cercanas a 1.

El diseño MD propuesto por Box y Hill en 1967 Box and Hill (1967) tiene la siguiente forma. Sea \mathbf{Y}^* el vector de datos obtenidos de los ensayos adicionales y sea $P(\mathbf{Y}^*|M_i,\mathbf{Y})$ la densidad predictiva de \mathbf{Y}^* dados los datos iniciales \mathbf{Y} y el modelo M_i . Entonces,

$$MD = \sum_{0 \le i \ne j \le m} P(M_i | \mathbf{Y}) P(M_j | \mathbf{Y}) \int_{-\infty}^{infty} p(\mathbf{Y^*} | M_i, \mathbf{Y}) \times ln(\frac{p(\mathbf{Y^*} | M_i, \mathbf{Y})}{p(\mathbf{Y^*} | M_j, \mathbf{Y})}) \text{ Meyer es of the properties of the properties$$

Vale:

porque

Aqui tengo

Sea p_i la densidad predictiva para una nueva observación condicionada a las observaciones originales Y and sea M_i el modelo correcto. Entonces, el diseño de criterio es

$$MD = \sum_{0 \le i \ne j \le m} P(M_i|Y)P(M_j|Y)I(p_i, p_j)$$

donde $I(p_i, p_j) = \int p_i ln(\frac{p_i}{p_j})$ es la información de Kullback-Leibler y mide la información media para discriminar a favor de M_i contra M_j cuando M_i es el verdadero modelo. Además, la proporción $\frac{p_i}{p_j}$ puede verse como la probabilidad en favor de M_i contra M_j dados los datos de los experimentos extras.

Entre mayor sea el valor de MD para un diseño, mejor ya que el diseño que maximice MD puede ser referido como el diseño MD-óptimo.

La intuición detrás de la fórmula del criterio MD puede ser más sencilla de entender si consideramos el ejemplo donde solo tenemos dos modelos posibles, M_1 y M_2 . MD es proporcional a la suma del valor esperado de $ln(p_1/p_2)$ dado M_1 y el valor condicional esperado de $ln(p_2/p_1)$ dado M_2 . Entonces, buscamos un diseño que calcule una probabilidad alta a favor de M_1 si este es el modelo correcto; pero además que calcule lo mismo para M_2 si es el modelo correcto. En otras palabras, buscamos el valor de MD que señale el diseño correcto.

7.3. Algoritmo de intercambio

En su artículo, Mitchell (1974) explica un algoritmo llamado 'DETMAX' para la construcción de diseños experimentales 'D-óptimos'. Lo siguiente es un resumen de dicho artículo.

Consideremos el modelo lineal usual $y = X\beta + \epsilon$ donde y es un vector de observaciones de tamaño $n \times 1$, X es una matriz de $n \times k$ de constantes, β es el vector $k \times 1$ de coeficientes para ser estimados y ϵ es un vector de $n \times 1$ de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas con una media 0 y una varianza desconocida σ^2 . El renglón i-ésimo de X es $f(x_i)'$ donde x_i es el i-ésimo punto de diseño y la función f depende en el modelo. Sea p el número de variables independientes y χ la región donde es factible realizar experimentos.

El estimador de mínimos cuadrados de β es $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$, y la matriz de covarianza de $\hat{\beta}$ es $(X'X)^{-1}\sigma^2$. En cualquier punto $x \in \chi$, el valor estimado de la 'verdadera' respuesta es $\hat{y}(x) = f(x)'\beta$. Si el modelo es correcto, la esperanza de $\hat{y}(x)$ es la esperanza de la respuesta en el punto x. Es decir, el modelo predice correctamente y. La varianza de $\hat{y}(x)$ está dada por $v(x) = f(x)'(X'X)^{-1}f(x)\sigma^2$. En este caso, σ^2 puede ser tomada como 1 sin pérdida de generalidad.

Uno de los diseños más populares para construir diseños óptimos es el de maximizar |X'X| llamado diseño 'D-óptimos'. El propósito del

artículo de Mitchell es presentar un nuevo algoritmo llamado DETMAX para maximizar el determinante de la matriz X'X.

En primera instancia , el algoritmo fue creado para intercambiar puntos de diseño de la siguiente manera. Empezando con un diseño elegido al azar de n ensayos, el diseño original de n ensayos se puede mejorar

Vale:
Agregar
que fue la
referencia

5

Vale: Se lee muy confuso, son puntos o ensayos?

- 1. Sumando un ensayo número n+1 elegido para que se alcance el incremento máximo posible de |X'X|. Después,
- 2. Quitando el ensayo en el diseño resultante que resulte en la menor disminución en |X'X|.

Estos dos pasos se llegan primero sumando al diseño original el punto donde v(x) sea máximo y después restando del diseño con n+1 ensayos resultante el punto donde v(x) es mínimo.

Vale: Aquí quiero agregar un pequeño diagrama

Ahora bien, para tener mayor flexibilidad, este algoritmo básico fue modificado para permitir el reemplazamiento de más de un punto del diseño original en cada iteración. El requerimiento de que un diseño con n+1 puntos sea regresado inmediatamente a un diseño con n puntos se relajo. Al algoritmo ahora se le permite hacer una 'excursión' donde se pueden construir diseños de varios tamaños que eventualmente regresan a un diseño de tamaño n.

Si no hay mejora en el determinante todos los diseños construidos en la excursión son eliminados y puestos en un conjunto de diseños fallidos llamado F. El conjunto F es usado después para guiar la siguiente excursión, la cual siempre empieza con el mejor diseño actual

de n puntos. Sea D el diseño actual en cualquier punto durante una excursión. Las reglas para continuar con la excursión son las siguientes:

- 1. Si el número de puntos en D es mayor que n, quitar un punto si D no está en F y agregar un punto de lo contrario.
- 2. Si el número de puntos en D es menor que n, agregar un punto si D no está en F y quitar un punto de otra manera.

Para determinar si algún D está o no en F, solo se examina el determinante de |X'X|. A pesar de que esto no es un prueba de fuego (ya que dos diseños diferentes pueden tener el mismo determinante) parece ser una buena manera en probar equivalencias en poco tiempo.

Cada vez se vuelve más y más difícil tener un mejor diseño por lo que las excursiones se pueden alejar mucho de un nivel de n puntos. Para parar el algoritmo, Mitchell propone pone límites en el mínimo y máximo número de puntos permitidos en la construcción de un diseño durante una excursión los cuales recomienda poner estén en $n \pm 6$.

Mitchell adopta el enfoque de Dykstra en donde los puntos de diseño son seleccionados de una lista previamente especificada de candidatos. Esto trae facilidad de programación y el poder de excluir puntos que no son deseados o posibles.

Debido a la existencia de muchos diseños que son óptimos solo localmente, lo mejor es hacer varias intentos independientes en la solución. En cada intento, DETMAX empieza con un diseño completamente nuevo cuyos puntos son seleccionados aleatoriamente de una lista de candidatos. Él determina que diez intentos usualmente son suficientes para llegar al diseño óptimo.

Vale:
Agregar
referencia

7.4. Función MDopt

Noyola (2022) uso la información anterior para crear la función MDopt en la librería BsMD2. Yo utilicé esa función como referencia para crear funciones del mismo nombre en Julia y Python.

Esta función toma como entrada varios parámetros, pero los más relevantes son la matriz X y el número de interacciones entre factores llamado max_int. Si el diseño tiene interacciones entre dos factores, la función crea una matriz Xfac con ellas. Lo mismo sucede si el diseño tiene interacciones entre tres factores.

Después, la función hace el cálculo de Γ_k , β_k , δ_k con las fórmulas 7.2, 7.1 y 7.3 respectivamente. Posteriormente, se define otra función (dentro de MDopt) llamada MDr que calcula el número MD con la fórmula . Finalmente, MDopt usa la idea del algoritmo de intercambio para calcular el criterio MD para múltiples combinaciones de ensayos.

Vale: aquí falta

Es importante mencionar que la función MDopt escrita por Noyola devuelve el dataframe de todos los ensayos para los que calculo el valor de MD, la matriz X, la matriz de puntos candidatos, el vector de probabilidades para cada modelo considerado y las matrices con los factores activos para cada modelo.

En cambio, las funciones que yo hice en Julia y Python solamente devuelven el dataframe de todos los ensayos realizados con su valor MD ya que eso es lo que necesito para mostrar los resultados. El diagrama muestra lo anterior de manera visual.

Vale: falta

El pseudocódido de la función MDr y el algoritmo de intercambio están en los apéndices de Noyola (2022).

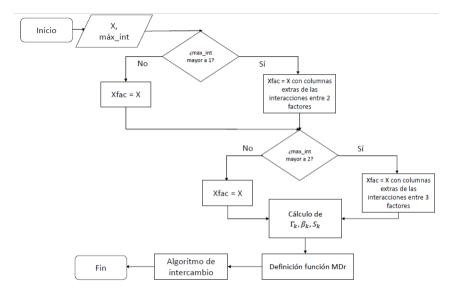


Figura 7.2. Diagrama de la función MDopt

7.5. Comparación entre lenguajes

Ya que la tesis es para probar la eficiencia y funcionalidad de Julia en comparación con R y Python use el mismo código en los tres lenguajes para ver cual de los tres hace los cálculos de MD de la manera más rápida y eficiente. En R utilice el paquete BsMD2 hecho por Ana Patricia Vela Noyola y el paquete BsMD elaborado por el profesor Ernesto Barrios. En Julia y Python utilice ese mismo código solo que adaptado a los diferentes lenguajes. Después, llamé a los códigos de Julia y Python en R para medir el tiempo que le toma a cada lenguaje ejecutar dos ejemplos distintos.

Es importante mencionar que fue más difícil traducir el código a Python ya que este lenguaje utiliza una enumeración diferente. Los objetos en Python comienzan a contarse desde el 0 mientras que en R y Julia la numeración empieza en 1. Puede ser un poco confuso hacer la transición. Además, los resultados también tienen numeración diferente y, a pesar de que son exactamente iguales que en los otros lenguajes, hay que tener cuidado con su presentación para evitar confusiones.

No es extraño que en los paquetes, JuliaCall y reticulate, existan comandos que sirvan para efectuar las mismas tareas. Por lo tanto, la siguiente tabla es una lista de los comandos que utilicé en JuliaCall así como su simil en reticulate.

JuliaCall	reticulate	Uso	Especificaciones
julia_setup	use_python	Es usado para	use_python no es
		especificar la	necesario a menos
		dirección del	que tengas varias
		programa (Julia	versiones de
		o Python)	Python instaladas
		dentro de tu	
		computadora	
julia_source	source_python	Agregan a R	Es necesario tener
		las funciones	la terminación del
		que estén dentro	archivo correcta
		de los archivos	
		especificados	
julia_assign	r_to_py	Convierte los	JuliaCall no
		objetos de R	agrega los objetos
		en objetos del	al ambiente de R
		programa externo	
julia_eval y	repl_python	Corren el	Con repl_python,
julia_commar	ld	lenguaje externo	la consola de R se
		dentro de R	convierte en una
			de Python

Para llamar Julia en R, utilice el paquete JuliaCall. Este paquete permite que Julia funcione dentro de R. Es decir, yo utilizo los objectos creados en R y los puedo trasladar a Julia para correr alguna función creada en Julia. El paquete es como un puente entre ambos lenguajes donde solamente hace la conexión más no los mezcla de ninguna otra forma.

En primer lugar, justo después de cargar la librería de JuliaCall es necesario usar el comando julia_setup y poner la dirección de la

carpeta donde está instalado Julia en tu computadora. Después, para cada ejemplo creo los objetos que necesito como entrada de la función. Posteriormente, utilizo el comando julia_assign para asignar los objetos creados en R a objetos nuevos en Julia. En caso de que la conversión de alguno de los objetos no sea la deseada, utilizo julia_command para hacer la conversión dentro de Julia. Además, debo tener la función que quiero utilizar en un documento con terminación .jl guardado en la carpeta de mi directorio de trabajo. Para agregar la función en R, utilizo el comando julia_source y dentro el nombre del documento. Finalmente, utilizo el comando julia_eval para correr la función que con los parámetros ya que cree.

Para llamar Python en R utilice el paquete reticulate. Este paquete funciona más como una extensión de R ya que puedes transitar fácilmente entre ambos lenguajes sin necesidad de muchos comandos. Mas bien, lo que se necesitan son prefijos como .r o py\$ para llamar los objetos de cada lenguaje.

Para utilizar la función que escribí en Python, lo primero que hice (después de llamar al paquete, claro está) es guardarla en un archivo con terminación .py y guardarlo en la carpeta del directorio de trabajo. Después, utilice el comando source_python para llamar el archivo. Con solamente llamar el archivo se cargan en R todas las funciones dentro de él. En este caso, yo solamente tenía una función pero en caso de tener varias, solo es necesario cargar el archivo una vez. Después, debo utilizar el comando r_to_py para convertir todos los objetos de R en objetos de Python. Una de las ventajas de este paquete es que crea el objeto de Python en el ambiente de R y si usas RStudio, puedes ver el objeto creado en la parte de Environment de tu pantalla. Para Julia esto no pasa lo cual puede llegar a ser confuso.

Posteriormente, si uno de los parámetros de la función es un entero

te recomiendo que también los conviertas en un objeto de Python ya que en ocasiones el paquete los convierte automáticamente en objetos de tipo Float cuando son enteros y la función puede fallar. Finalmente, puedes llamar a tu función de Python en R sin ningún comando adicional. Lo único que necesitas es usar el nombre de la función tal cual la usaste en Python y agregarle los parámetros que ya creaste.

7.6. Ejemplos y resultados

7.6.1. Ejemplo 1 - Proceso de moldeo por inyección

El primer ejemplo que utilice fue mencionado por Meyer et al. (1996) quien lo tomo de un artículo escrito por Box, Hunter y Hunter en 1978. El experimento consiste en estudiar los efectos de ocho factores en el encojimiento de un proceso de moldeo por inyección. El plan experimental fue un 2^{8-4} factorial fraccionado con generadores I = ABDH = ACEH = BCFH = ABCG. Los datos para este ejemplo están en la tabla 7.1.

Ensayo	A	В	С	D	E	F	G	Η	Y
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	14.0
2	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	16.8
3	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	15.0
4	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	15.4
5	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	27.6
6	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	24.0
7	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	27.4
8	1	1	1	1	1	1	1	1	22.6
9	1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	22.3
10	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	17.1
11	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	21.5
12	-1	-1	1	-1	1	1	1	-1	17.5
13	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	15.9
14	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	21.9
15	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	16.7
16	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	20.3

Tabla 7.1. Datos para el ejemplo 1

No es el objetivo de esta tesis explicar el análisis previo que se hace en este tipo de experimentos, pero sí es importante destacar que se calcula la probabilidad posterior de los modelos. En este análisis se ve que los posibles modelos son los que se muestran en la tabla ?.

Modelo	Factores	Probabiliad posterior
1	$_{\mathrm{A,C,E}}$	0.2356
2	$_{ m A,C,H}$	0.2356
3	$_{\mathrm{A,E,H}}$	0.2356
4	$_{\mathrm{C,E,H}}$	0.2356
5	A,C,E,H	0.0566

Vale: explicar más esto

Tabla 7.2. Modelos con la probabilidad posterior más alta para el ejemplo 1

Además, calculando las probabilidades posteriores P_j mencionadas en 7.4, los factores A, C, E, y H tienen una probabilidad posterior de 0.764 mientras que los demás factores tienen una probabilidad de 0. Por lo tanto, los factores A, C, E, y H son los que parecieran ser activos. Dado el análisis previo, el problema original con un diseño de 2^{8-4} paso a convertirse en un modelo con diseño 2^{4-1} por la reducción de factores. Con los ensayos que tenemos no es posible distinguir entre los cinco posibles modelos por lo que se necesitan ensayos adicionales para aclarar cuales son los factores activos.

La tabla 7.3 muestra las predicciones de las respuestas para todas las combinaciones de factores A, C, E, y H. El propósito de esta tesis no es indagar mucho en el cálculo de estas probilidades , pero puedo decir que se calculan usando medias posteriores como estimadores de los efectos principales y sus interacciones.

Vale: o sí?

Candidato	Ensayo	A	\mathbf{C}	\mathbf{E}	Η	Y	1	2	3	4	
1	14, 16	-1	-1	-1	-1	21.9, 20.3	21.08	21.08	21.08	21.08	2
2	1, 3	-1	-1	1	1	14.0, 15.0	14.58	14.58	14.58	14.58	1
3	5, 7	-1	1	-1	1	27.6, 27.4	27.38	27.38	27.38	27.38	2'
4	10, 12	-1	1	1	-1	17.1, 17.5	17.34	17.34	17.34	17.34	1′
5	2, 4	1	-1	-1	1	16.8, 15.4	16.16	16.16	16.16	16.16	1
6	13, 15	1	-1	1	-1	15.9,16.7	16.35	16.35	16.35	16.35	1
7	9, 11	1	1	-1	-1	22.3, 21.5	21.87	21.87	21.87	21.87	2
8	6, 8	1	1	1	1	24.0, 22.6	23.25	23.25	23.25	23.25	2
9		-1	-1	-1	1		21.08	14.58	27.38	16.16	1
10		-1	-1	1	-1		14.58	21.08	17.34	16.35	1
11		-1	1	-1	-1		27.38	17.34	21.08	21.87	1
12		-1	1	1	1		17.34	27.38	14.58	23.25	1
13		1	-1	-1	-1		16.16	16.35	21.87	21.08	1
14		1	-1	1	1		16.35	16.16	23.25	14.58	1
15		1	1	-1	1		21.87	23.25	16.16	27.38	1
16		1	1	1	-1		23.25	21.87	16.35	17.34	1

Tabla 7.3. Ejemplo 1, Colapsado en los factores A, C, E y H

Considero importante explicar a detalle la tabla 7.3. Los datos de primeros ocho candidatos son los mismos datos de la tabla 7.1, pero mostrando únicamente los factores A, C, E, y H. No es una sorpresa que la respuesta Y sea similar por candidato ya que los factores que creemos están activos se mantuvieron en los mismos niveles.

Por otro lado, los siguiente ocho candidatos son todas las posibles combinaciones para los cuatro modelos con mayor probabilidad. Tomemos, por ejemplo, el modelo que dice que los factores activos son A, C, E. Si ignoramos la columna H de la tabla 7.3, los 8 ensayos muestran todas las posibles combinaciones que puede tener un

experimento con estos tres factores. Lo mismo pasa con los otros tres modelos con tres factores cada uno. Para el modelo final con cuatro factores activos, la tabla completa es todas las posibles combinaciones.

Además, es importante notar que para los primeros ocho candidatos la respuesta de los modelos es similar. Mientras, para los siguientes ocho ésta varia mucho más. La similitud en las respuestas de los primeros ocho candidatos refuerza la idea de que es muy complicado distinguir entre los cinco posibles modelos. La diferencia en los siguientes ocho candidatos ayudará a que ahora sí sea posible distinguir entre los posibles modelos.

Como se menciono anteriormente, no es posible realizar todos los ensayos posibles así que tendremos que elegir. En este caso, buscamos generar un diseño de seguimiento de cuatro ensayos usando el criterio MD. Hay 3,876 posibles diseños que podemos generar de los 16 candidatos de la tabla 7.3. Se podría generar un código que calcule el valor MD para cada uno de esos diseños. Sin embargo, es mejor utilizar el algoritmo de intercambio ya que genera un diseño al azar de puntos candidatos y después los modifica hasta que un criterio de convergencia se satisface.

El código para el cálculo del criterio MD y el algoritmo de intercambio para R, Julia y Python es el siguiente.

```
# # # R paquete Patricia
library(BsMD2)
setwd("~/ITAM/Tesis/Julia con R/Code/MD-optimality")
# matriz de diseño inicial
X <- as.matrix(BM93e3[1:16,c(1,2,4,6,9)])
# vector de respuesta
y <- as.vector(BM93e3[1:16,10])</pre>
```

```
# probabilidad posterior de los 5 modelos
p_{mod} \leftarrow c(0.2356, 0.2356, 0.2356, 0.2356, 0.0566)
fac_mod \leftarrow matrix(c(2,1,1,1,1,3,3,2,2,2,4,4,3,4,3,0,0,0,0,4),
              nrow=5.
              dimnames=list(1:5,c("f1","f2","f3","f4")))
-1,-1,1,1,-1,-1,1,1,-1,-1,1,1,-1,-1,1,1,
-1.1.-1.1.-1.1.-1.1.-1.1.-1.1.-1.1.
nrow=16,dimnames=list(1:16,c("blk","f1","f2","f3","f4"))
)
t <- Sys.time()
e3_R <- BsMD2::MDopt(X = X, y = y, Xcand = Xcand,
nMod = 5, p_mod = p_mod, fac_mod = fac_mod,
nStart = 25
Sys.time() - t
# # # R paquete original
library(BsMD)
s2 \leftarrow c(0.5815, 0.5815, 0.5815, 0.5815, 0.4412)
t_RO <- Sys.time()
e3_R0 \leftarrow BsMD::MD(X = X, y = y, nFac = 4, nBlk = 1,
```

```
p = p_mod, s2 = s2.
                                         nf = c(3, 3, 3, 3, 4),
facs = fac_mod, nFDes = 4, Xcand = Xcand, mIter = 20,
nStart = 25, top = 10)
Sys.time() - t_RO
### Julia con R
library(JuliaCall)
julia_setup(JULIA_HOME = "C:/Users/Valeria/AppData/Local/Program
julia_source("MDopt.jl")
# Conversiones para los tipos de Julia
X_J <- as.data.frame(X)</pre>
julia_assign("X_J", X_J)
julia_assign("y_J", y)
julia_assign("p_mod_J", p_mod)
julia_assign("fac_mod_J", fac_mod)
julia_command("fac_mod_J = NamedArray(fac_mod_J)")
julia_eval("fac_mod_J = Int64.(fac_mod_J)")
julia_assign("Xcand_J", Xcand)
julia\_command("Xcand\_J = NamedArray(Xcand\_J)")
julia_eval("Xcand_J = Int64.(Xcand_J)")
t_J <- Sys.time()
julia_eval("MDopt(X = X_J, y = y_J, Xcand = Xcand_J, nMod = 5,
        p\_mod = p\_mod\_J, fac\_mod = fac\_mod\_J, nFDes = 4,
        max_int = 3, g = 2, Iter = 20, nStart = 10, top = 10)")
Sys.time() - t_J
```

mInt = 3, g = 2, nMod =

```
# # # Python con R
library(reticulate)
source_python("MD_Python.py")
X_P <- as.data.frame(X)</pre>
Xcand_P <- as.data.frame(Xcand)</pre>
fac_mod_P <- as.data.frame(fac_mod)</pre>
X_P \leftarrow r_{to_py}(X_P)
y_P \leftarrow r_{to_py}(y)
Xcand_P <- r_to_py(Xcand_P)</pre>
p_mod_P <- r_to_py(p_mod)</pre>
fac_mod_P <- r_to_py(fac_mod_P)</pre>
nMod_P \leftarrow r_to_py(5L)
nFDes_P <- r_to_py(4L)
max_int_P <- r_to_py(3L)</pre>
g_P \leftarrow r_{to_py}(2L)
Iter_P <- r_to_py(20L)</pre>
nStart_P <- r_to_py(25L)</pre>
top_P \leftarrow r_{to_py}(10L)
t_P <- Sys.time()
MD_Python(X = X_P, y = y_P, Xcand = Xcand_P, nMod = nMod_P,
p_mod = p_mod_P, fac_mod = fac_mod_P,
nFDes = nFDes_P, max_int = max_int_P,
g = g_P, Iter = Iter_P, nStart = nStart_P, top = top_P)
```

Sys.time() - t_P

Es importante notar que para R utilice el paquete elaborado por Patricia así como el paquete original **BsMD** elaborado por el profesor Ernesto Barrios. En los tres lenguajes los resultados fueron los mismos y se muestran en la tabla 7.4

Diseño	Puntos de diseño	MD
1	9, 9, 12, 15	85.67
2	9, 11, 12, 15	83.63
3	9,11,12,12	82.18
4	9,12,15,16	77.05
5	9,12,13,15	76.74
6	9,10,11,12	76.23
7	2, 9, 12, 15	71.23
8	5, 9, 12, 15	70.75
9	2, 9, 12, 12	67.69
10	9,10,12,16	66.58

Tabla 7.4. Resultados para el ejemplo 1

En cuanto a tiempo, al paquete de Patricia le tomo 5.618191 segundos en hacer el cálculo; al paquete **BsMD** del profesor Barrios le tomó 0.03919315; Julia se tardó 34.85702 segundos; <u>y a Python 51.05128</u> segundos.

Es importante mencionar que en el caso de Julia el tiempo va disminuyendo las ocasiones consecutivas que corres el código inclusive cambiando los parámetros de la función. La segunda ocasión solo le tomo 9 segundos y la tercera 5 segundos. Esto es útil cuando se esté corrigiendo la función o simplemente se quiera correr varias veces para distintos diseños.

Vale:
Incluir
aquí que
falta el
tiempo del
setup

7.6.2. Ejemplo 2

En el ejemplo anterior, no había forma de replicar el experimento con los ensayos adicionales en las mismas condiciones en las que fue efectuado. El objetivo de este ejemplo, que también es tomado de Meyer Meyer et al. (1996), es evaluar la efectividad del criterio MD para generar datos que puedan identificar cuales son los factores activos.

Meyer utiliza datos de un experimento de reactor hecho por Box et al en 1978. Ese experimento es de tipo 2⁵ factorial lo que significa que hay 32 ensayos del mismo. Este ejemplo Meyer busca probar la efectividad de su diseño tomando solamente 8 de los 32 ensayos originales y encontrando de manera correcta los factores que están activos. La idea es tener un diseño de seguimiento que pueda tomar los ensayos adicionales necesarios del experimento original. Los ocho ensayos elegidos están en el tabla 7.5.

Ensayo	A	В	С	D	E	Y
1	-1	-1	-1	1	1	44
2	1	-1	-1	-1	-1	53
3	-1	1	-1	-1	1	70
4	1	1	-1	1	-1	93
5	-1	-1	1	1	-1	66
6	1	-1	1	-1	1	55
7	-1	1	1	-1	-1	54
8	1	1	1	1	1	82

Tabla 7.5. Datos para el ejemplo 2

En análisis bayesiano previo para los datos de la figura 7.5 no muestra de manera clara que algún factor esté activo. Por lo tanto, un diseño de cuatro ensayos fue creado para encontrar el mejor

subconjunto de 4 de los 32 posibles candidatos de cinco factores en dos niveles.

El código para generar los resultados en los tres lenguajes es el siguiente.

```
library(BsMD2)
setwd("~/ITAM/Tesis/Julia con R/Code/MD-optimality")
data(M96e2)
#print(M96e2)
X \leftarrow as.matrix(cbind(blk = rep(-1, 8),
        M96e2[c(25,2,19,12,13,22,7,32), 1:5]))
y \leftarrow M96e2[c(25,2,19,12,13,22,7,32), 6]
pp \leftarrow BsProb1(X = X[, 2:6], y = y, p = .25, gamma = .4,
max_int = 3, max_fac = 5, top = 32)
p <- pp@p_mod
facs <- pp@fac_mod
Xcand \leftarrow as.matrix(cbind(blk = rep(+1, 32), M96e2[, 1:5]))
t <- Sys.time()
e4_R <- BsMD2::MDopt(X = X, y = y, Xcand = Xcand,
nMod = 32, p_mod = p, fac_mod = facs,
g = 0.4, Iter = 10, nStart = 25, top = 5)
Sys.time() - t
library(JuliaCall)
julia_setup(JULIA_HOME = "C:/Users/Valeria/AppData/
```

Local/Programs/Julia-1.6.3/bin")

```
julia_source("MDopt.jl")
X \leftarrow as.matrix(cbind(blk = rep(-1, 8),
        M96e2[c(25,2,19,12,13,22,7,32), 1:5]))
v \leftarrow M96e2[c(25,2,19,12,13,22,7,32), 6]
pp \leftarrow BsProb1(X = X[, 2:6], y = y, p = .25, gamma = .4,
max_int = 3, max_fac = 5, top = 32)
p <- pp@p_mod
facs <- pp@fac_mod
Xcand \leftarrow as.matrix(cbind(blk = rep(+1, 32), M96e2[, 1:5]))
# Conversiones para los tipos de Julia
X <- as.data.frame(X)</pre>
julia_assign("X", X)
julia_assign("y", y)
julia_assign("p_mod", p)
julia_assign("fac_mod", facs)
julia_command("fac_mod = NamedArray(fac_mod)")
julia_eval("fac_mod = Int64.(fac_mod)")
julia_assign("Xcand", Xcand)
julia_command("Xcand = NamedArray(Xcand)")
julia_eval("Xcand = Int64.(Xcand)")
t_J <- Sys.time()
julia_eval("MDopt(X = X, y = y, Xcand = Xcand, nMod = 32,
```

```
p\_mod = p\_mod, fac\_mod = fac\_mod, nFDes = 4, max\_int = 3
         q = 0.4, Iter = 10, nStart = 25, top = 5)")
Sys.time() - t_J
# # # Python con R
library(reticulate)
source_python("MD_Python.py")
X P <- as.data.frame(X)</pre>
Xcand_P <- as.data.frame(Xcand)</pre>
fac_mod_P <- as.data.frame(facs)</pre>
X_P \leftarrow r_{to_py}(X_P)
y_P <- r_to_py(y)</pre>
Xcand_P <- r_to_py(Xcand_P)</pre>
p_mod_P \leftarrow r_to_py(p)
fac_mod_P <- r_to_py(fac_mod_P)</pre>
nMod_P \leftarrow r_to_py(32L)
nFDes_P <- r_to_py(4L)
max_int_P \leftarrow r_to_py(3L)
g_P \leftarrow r_{to_py}(0.4)
Iter_P <- r_to_py(10L)</pre>
nStart_P <- r_to_py(25L)</pre>
top_P \leftarrow r_to_py(5L)
t_P <- Sys.time()
```

```
MD_Python(X = X_P, y = y_P, Xcand = Xcand_P, nMod = nMod_P,
p_mod = p_mod_P, fac_mod = fac_mod_P,
nFDes = nFDes_P, max_int = max_int_P,
g = g_P, Iter = Iter_P, nStart = nStart_P, top = top_P)
Svs.time() - t_P
```

Igual que en el ejemplo anterior, para **R** utilice ambos paquetes BsMD y BsMD2. En los tres lenguajes los resultados fueron exactamente los mismo y se muestran en la tabla 7.6.

Diseño	Puntos de diseño	MD
1	4, 10, 11, 26	0.64
2	4, 10, 11, 28	0.63
3	4,10,12,27	0.63
4	4,10,26,27	0.63
5	4, 12, 26, 27	0.62

Tabla 7.6. Resultados para el ejemplo 2

En cuanto a tiempo, al paquete BsMD2 le tomo 9.573741 minutos obtener los resultados; el paquete BsMD hizo el cálculo en 0.4537661 segundos; Julia se tardó 50.54355 segundos; y, finalmente a Python le tomó 11.058 minutos.

Es importante mencionar que este ejemplo es el más pesado computacionalmente que voy a mostrar en esta tesis. No es sorpresa que el paquete BsMD sea el más rápido, ya que utiliza Fortran para hacer sus cálculos. Lo que más sorprende es que Julia sea el lenguaje que quede en segundo lugar con semejante ventaja. En este caso, Julia es mínimo 10 veces más rápido que sus competidores. Incluso usando Python desde otra plataforma Julia es más rápido. Por lo tanto, este ejemplo termina demostrando la capacidad computacional que tiene Julia para este tipo de algoritmos.

Capítulo 8

Conclusiones

El objetivo de este trabajo fue hacer una comparación entre Julia, R y Python. En primer lugar y dado que Julia es un lenguaje todavía muy desconocido se dió una breve introducción a los básicos de Julia y lo indispensable para entender esta tesis. Se asumió que el lector ya conoce R y Python por lo que se expusieron de manera más superficial.

La segunda parte de la tesis fueron los ejercicios que, se piensa, aportan conocimiento sobre el mejor uso de los tres lenguajes. En el primer ejercicio se tomaron datos de NIST para hacer el ajuste de un polinomio. Los datos son sensibles y el problema presentó un reto numéricamente. Se realizaron cuatro intentos de resolución en Julia de los cuales solo uno proporcionó el resultado correcto. La solución en Ry, sobretodo, en Python fue más rápida y sencilla.

Vale: Falta decir un poco más, siento

El segundo ejercicio fue ajustar una regresión lineal a datos obtenidos con el CENSO 2020. Si bien Julia pudo hacer los filtros de manera adecuada la sintaxis de los comandos es un poco extraña y no da pie al fácil entendimiento de la instrucción. El objetivo fue

comparar y evaluar el manejo de datos en los tres lenguajes. Los tres lenguajes mostraron hacer un análisis rápido y certero para todas las pruebas que se hicieron.

El tercer ejercicio fue el más retador teóricamente y en práctica. Un diseño de experimentos se hace para obtener información sobre los factores que afectan o no un resultado. El algoritmo que se utilizó fue el propuesto por Meyer para elegir los ensayos extras necesarios en caso de que los primeros no dieran suficiente información sobre el modelo que describe el experimento. La fórmula para el valor MD es compleja y se tiene que hacer hasta que el algoritmo termine (alrededor de 70 veces). Por lo tanto, este ejercicio fue una prueba de rapidez de cálculos intensivos y es el que más resalta las habilidades y funciones de Julia. El mismo algoritmo fue hecho en los tres lenguajes, pero Julia fue el más rápido de todos.

En mi opinión, Julia no busca ser la copia de R o Python en análisis y manejo de datos (el dichoso data science). Julia está hecho para ser un lenguaje que realiza simulaciones y cálculos complejos con un alto rendimiento. Julia tiene mucho que ofrecer, pero un análisis de datos fácil y intuitivo no es una de esas cosas. Su uso va mucho más allá y se enfoca en ser el mejor lenguaje para hacer estadística bayesiana, análisis epistemológicos y análisis de sistemas dinámicos.

Habiendo dicho lo anterior, este trabajo se puede extender de muchas maneras. La primera que se viene a la mente es enfocarse en otras áreas de las matemáticas y seguir con la comparación.

Vale: Se me fue la otra que queria decirrrrrrrrrrr

Apéndice A

Extras

No se olviden cambiar toda la información. Los quiero un chingo

Bibliografía

- Barrios, E. (2010). R: Un lenguaje para análisis de datos y graficación. Laberintos e Infinitos, 35–41.
- Barrios, E. (2020, Otoño). Regresión lineal múltiple. Notas de clase.
- Bates, D., S. Kornblith, A. Noack, M. Bouchet-Valat, M. Krabbe, and contributors (2022, Enero). JuliaStats/GLM.jl: v1.6.1.
- Bezanson, J., S. Karpinski, V. Shah, A. Edelman, et al. (2014). Julia language documentation. The Julia Manual. https://docs.julialang.org/en/v1.6/, 1–261.
- Box, G. E. and W. J. Hill (1967). Discrimination among mechanistic models. *Technometrics 9*.
- Carrone, F., M. Nicolini, and H. Obst Demaestri (2021). Data Science in Julia for Hackers. https://datasciencejuliahackers.com/(visited 06-10-2021).
- Community, T. J. (2022, Febrero). Why we use julia, 10 years later. https://julialang.org/blog/2022/02/10years/. Accessed: 2022-03-28.

- Datta, B. N. (2010). Numerical linear algebra and applications, Volume 116. Siam.
- Garcia, S. R. and R. A. Horn (2017). A second course in linear algebra. Cambridge University Press.
- Gelman, A., J. Hill, and A. Vehtari (2021). Regression and other Stories. Cambridge University Press.
- Inc, A. (2022). Using the r programming language in jupyter notebook. https://docs.anaconda.com/anaconda/navigator/tutorials/r-lang/.
- JuliaMath (2021). Polynomials.jl. https://juliamath.github.io/ Polynomials.jl/stable/. Accessed: 2021-11-04.
- Jupyter, P. Jupyter. https://jupyter.org/.
- Language, J. P. (2021). Statsmodel.jl. https://juliastats.org/ StatsModels.jl/stable/. Accessed: 2021-10-12.
- López-Bonilla, J., R. López-Vázquez, and S. Vidal-Beltrán (2018, Jun).

 Moore-penrose's inverse and solutions of linear systems. World
 Scientific News.
- Matthes, E. (2019). Python crash course: A hands-on, project-based introduction to programming. no starch press.
- Meyer, R. D., D. M. Steinberg, and G. Box (1996). Follow-up designs to resolve confounding in multifactor experiments. Technometrics 38, 303–313.
- Mitchell, T. J. (1974). An algorithm for the construction of "doptimal.experimental designs. *Technometrics 16, 203–10.*

- Montgomery, D. C. (2017). Design and analysis of experiments. John wiley & sons.
- Morgenstern, I. and J. L. Morales (2015). Regresión lineal. aritmética inexacta y algoritmos numéricos estables. Laberintos e Infinitos, 25–34.
- Noyola, A. P. V. (2022). Discriminación de factores en experimentos factoriales.
- NumPy, L. C. (2022, Enero). NumPy User Guide: Release 1.22.0.
- Peng, R. (2015). R Programming for Data Science.
- Peng, R. D. and S. C. Hicks (2021). Reproducible research: A retrospective. Annual Review of Public Health 42, 79–93.
- Python-Software-Foundation (2022). Python 3.10.2 documentation. https://docs.python.org/3/index.html. Accessado: 2022-03-15.
- Seber, G. A. and A. J. Lee (2003). *Linear regression analysis* (2nd ed.). John Wiley & Sons.
- Spence, L. E., A. J. Insel, and S. H. Friedberg (2000). *Elementary linear algebra*. Prentice Hall.
- Stanton, J. M. (2001). Galton, pearson, and the peas: A brief history of linear regression for statistics instructors. *Journal of Statistics Education* @(3).
- Team, R. C. (2022). What is R?
- y el Equipo de Desarrollo de Pandas, W. M. (2022, Febrero). pandas: powerful Python data analysis toolkit.

Una tesis extendida (tesis), escrito por Valeria Aurora Pérez Chávez, se terminó de imprimir de madrugada, con mucha cafeína en las venas y ojeras en la cara.