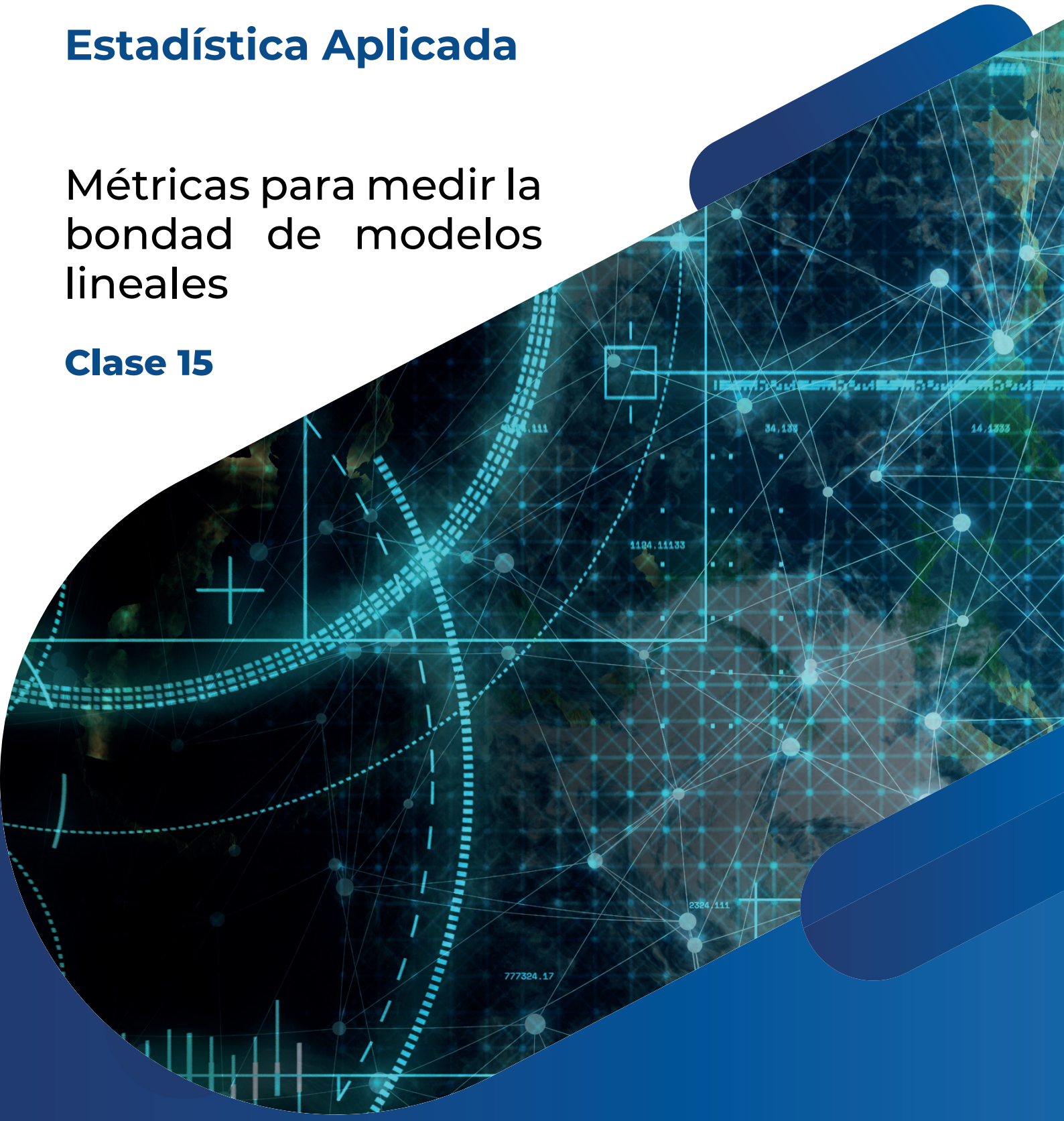
Estadística Aplicada

Métricas para medir la bondad de modelos lineales

Clase 15



Ingeniería en ciberseguridad

La excelencia no se improvisa

1. INTRODUCCIÓN DE LA CLASE

En esta clase abordaremos 2 temas

El primero está relacionado con nuevas métricas para medir la eficiencia de un modelo de predicción. En la clase anterior habíamos destacado el uso del estadístico R^2 como una forma de medir la eficiencia basado en los residuos, sin embargo, esta no es la única métrica (ni siquiera la mejor), las métricas que veremos en esta clase se basan en la probabilidad de distribución de los resultados, para lo cual introduciremos una nueva función de regresión.

En la segunda parte veremos como en base a estas métricas básicas se han construido otras métricas que toman el nombre de estimadores que tratan de balancear el ajuste del modelo con la complejidad, por lo que nos proveen un análisis más completo, esta sección analizaremos algunos de estos estimadores.

Clase 15:

Resultado o resultados de aprendizaje que será abordado con el contenido de la clase. **Analizar información contextual sobre hábitat, infraestructura y movilidad, mediante técnicas estadísticas descriptivas e inferenciales, para la adecuada toma de decisiones**

Reto # 4

15) Métricas para medir la bondad de modelos lineales

15.1) R^2 y R^2_a

De acuerdo a Szretter (2017) “Una vez que se tienen todas las variables, es de interés contar con un criterio numérico para resumir la bondad del ajuste que un modelo lineal con un cierto subconjunto de covariables da a la variable dependiente observada. A partir de este criterio se podrán ranquear los modelos y elegir un conjunto de unos pocos buenos candidatos para estudiar luego en detalle.”

En general en la regresión podemos establecer 3 valores para cada observación:

$\hat{y}$ = el valor de la predicción de acuerdo al modelo

$\bar{y}$ = el valor medio o esperado para las observaciones

y= el valor de la observación.

La figura 1 clarifica estos conceptos.

De acuerdo a lo indicado podemos calcular las siguientes sumas de cuadrados

SSTo =Suma de cuadrados totales, es el numerador de la varianza. Es la suma de los cuadrados de las desviaciones de todas las observaciones, y_i, de su media.

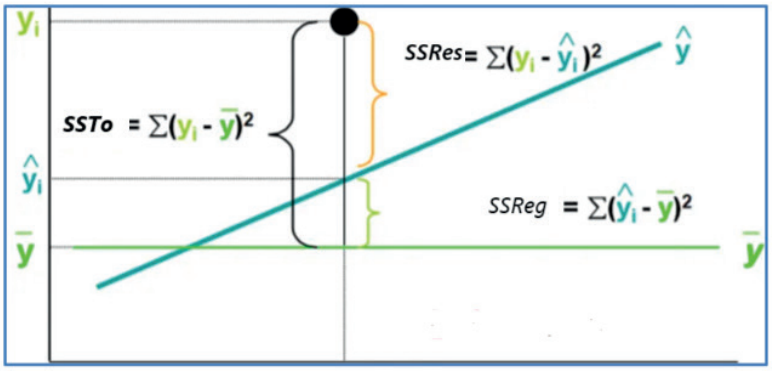
SSReg = Suma de cuadrados regresión, le indica cuánto de la variación en la variable dependiente explicó su modelo

SSRes = Suma de cuadrados de los residuos, es el valor que no es explicado por el modelo

Figura 1

Relación entre SST, RSS, SSR

Creación del autor Alfonso Prado



Cuando tratamos de comparar modelos la primera aproximación sería mediante el R^2 obtenido para cada uno de los distintos modelos con distinta cantidad de covariables. La fórmula del coeficiente de determinación se muestra en la figura siguiente.

En la medida en la que el modelo sea más eficiente, la suma de cuadrado de los residuos va a ser más pequeña, llegando a 0 cuando el modelo es perfecto, en cuyo caso obtendríamos un R^2 sería igual a 1.

Resulta que comparar modelos usando el criterio de elegir aquél cuyo R^2

sea lo más grande posible equivale a elegir aquel que tenga la menor suma de

cuadrados de residuos SSRes (ya que la suma de cuadrados total SSTo no depende de las covariables del modelo ajustado y por eso permanece constante).

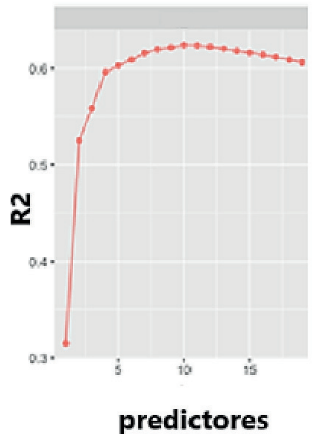
Para mejorar el R^2 obtenido los analistas tratan de incluir una mayor cantidad de covariables, sean estas apropiadas para ajustar los datos o no. Es por eso que el criterio no es identificar el modelo con

mayor R^2 (ese será siempre el modelo con todas las covariables disponibles) sino encontrar el punto a partir del cual no tiene sentido agregar más variables ya que estas no inciden en un aumento importante del R^2. Para encontrar este punto óptimo puede ser útil trazar un gráfico del R^2 en función de la cantidad de predictores. La siguiente figura explica el concepto.

Figura 3

R^2 obtenido en función de la cantidad de predictores

Creación del autor Alfonso Prado.



R^2 Ajustado

Para entender esta métrica, es importante indicar los grados de libertad de cada una de las sumas de cuadrados mencionadas anteriormente, esto nos ayudará a calcular la media de las sumas de cuadrados, es una forma de hacer un promedio que pueda ser comparable de una suma de cuadrados a otra. La siguiente tabla presenta los valores.

Tabla 1

Grados de libertad para las sumas de cuadrados

Suma de cuadrados	Grados de libertad
SSreg	p-1
SSres	n-p
SSto	n-1

Como el R^2 no toma en cuenta el número de variables en el modelo de regresión, un criterio de decisión mucho más objetivo es calcular y comparar modelos por medio del R^2a, para esto partimos de la formula de la figura 2 usando la media de las sumas de cuadrado. Entonces notamos que los grados de libertad del denominador no varía con respecto a la cantidad de coeficientes, mientras que

el numerador si será afectado.

De acuerdo a Szretter (2017), entonces buscamos el subconjunto de p − 1 covariables que maximicen el R^2a, o un subconjunto de muchas menos covariables para las cuales R^2a el incremento sea tan pequeño que no justifique la inclusión de las covariables adicionales.

Veamos un ejemplo en la predicción de precios de vivienda

```
#Creamos 5 modelos basado en distintas variables

house1 <- lm(valxSqFt ~ TUnits:GSqFt + Boro, data=housing)

house2 <- lm(valxSqFt ~TUnits+ GSqFt +Boro  , data=housing)

house3 <- lm(valxSqFt ~TUnits* GSqFt +Boro  , data=housing)

house4 <- lm(valxSqFt ~class*Boro , data=housing)

#De los cuales obtenemos la siguiente información


[1] “house1”

> summary(house1)$adj.r.squared

[1] 0.5823141

> length(house1$coefficients)

[1] 6


[1] “house2”

> summary(house2)$adj.r.squared

[1] 0.5999892

> length(house2$coefficients)

[1] 7


[1] “house3”

> summary(house3)$adj.r.squared

[1] 0.6028864

> length(house3$coefficients)

[1] 8
```

Del ejercicio anterior podemos notar que en la medida la cantidad de variables involucradas en cada modelo va aumentando la métrica de R^2a aumenta pero ya no es proporcional, en el modelo 4 tenemos 20 variables y el incremento del R2a es insignificante.

15.2) Likelihood

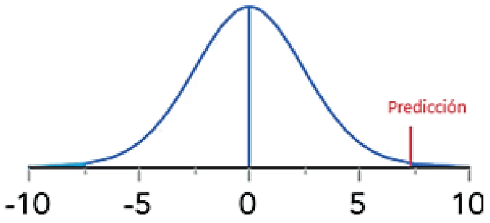
El término likelihood a veces se lo traduce como probabilidad o verosimilitud. En general se refiere a la probabilidad de que una muestra provenga de una distribución dada. Recordando el concepto la función PDF: Dada una distribución θ que tiene una media=μ y var= σ^2, la probabilidad de un valor específico es dada por la función de densidad de dicha distribución.

El likelihood se calcula como el producto de densidades de las observaciones. Cuando se hace una predicción se esperaría que el valor predicho caiga dentro de la distribución de la variable Y, en la medida en la que la probabilidad difiera de la distribución θ entendemos que el modelo no es bueno. Por ejemplo, suponga que usted tiene una variable de respuesta Y que sigue una distribución gaussiana θ como en la figura 5, suponga que usted esta interesado en predecir cierto el valor de la variable basado en determinados características y al hacerlo encuentra que la salida Y tendría un probabilidad muy baja, obviamente deducimos que el modelo ha fallado en predecir adecuadamente.

Figura 5

Distribución de la variable Y y predicción

Creación del autor Alfonso Prado



Pero, como la probabilidad PDF para un valor dado es generalmente baja, el producto de estas va a ser muy muy bajo, por lo que se estila hacer una transformación logarítmica conocida como el "log-likelihood". Para esto recordemos una de las propiedades de los logaritmos.

Figura 6

Propiedad de la multiplicación de logaritmos

Creación del autor Alfonso Prado

$$\log_a(b \cdot c) = \log_a b + \log_a c$$

Si se usa logaritmos naturales (base e) obtendríamos las fórmulas del likelihood como mostramos en la siguiente figura, donde π representa la función de producto de las probabilidades.

Figura 7

Fórmulas likelihood como producto (a) y log-likelihood como suma (b)

Creación del autor Alfonso Prado

(a)	(b)
$L(\theta) = \prod_{i=1}^{n} f_i(y_i \mid \theta)$	$F(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \ln f_i(y_i \mid \theta)$

En otras palabras, responde a la pregunta: "¿Cuál es la probabilidad de observar estos datos, dados estos parámetros?

Estimadores

Existen otros estimadores que nos ayudan a visualizar el mejor modelo basado en el total de las K covariables (el más grande posible) que incluya las covariables importantes de modo que en un modelo completo la estimación de la varianza del error sea insesgada.

Los principales estimadores son:

- ✓ AIC : Criterio de Akaike
- ✓ BIC : Criterio Bayesiano de Schwartz
- ✓ CP: Cp de Mallows

Todos intentan resolver este problema introduciendo un término de penalización para el número de parámetros en el modelo.

Desafortunadamente diferentes estimadores pueden recomendar diferentes modelos. Sin embargo, tomados en conjunto estos criterios permiten identificar un conjunto pequeño de modelos de regresión que pueden ser construidos a partir de las variables independientes relevadas. (Szretter, 2017)

AIC y BIC

Cuando se usa un modelo para representar el proceso que generó los datos, la representación casi nunca será exacta, por lo que se perderá cierta cantidad de información al usar el modelo para representar el proceso.

De acuerdo a Faraway (2020) , AIC y BIC estiman la cantidad relativa de información perdida por un modelo dado, siendo el mejor aquel cuya pérdida de información sea la menor.

Al ajustar modelos, es posible aumentar la probabilidad agregando variables, pero hacerlo puede provocar un sobre ajuste. Los estimadores intentan resolver este problema introduciendo un término de penalización proporcional al número de variables en el modelo.

Entonces dado una familia de modelos M_{α} y una cantidad de observaciones, queremos saber cuál es el mejor modelo, donde α representa el número de predictor(es), ejemplo modelo 1 usa el primer predictor, modelo 2 usa los dos primeros predictores, etc. y donde los posibles predictores se ordenan por correlación con la variable de respuesta.

AIC y BIC parten del likelihood (L(θ)), pero como vemos en la siguiente tabla sus fórmulas son diferentes.

Tabla 2

Fórmulas matemáticas y funciones programáticas de AIC y BIC

Creación del autor Alfonso Prado

Estimador	Fórmula matemática	Función programática
AIC	$AIC = -2 \log(L) + 2p$	`AIC(object, …, k = 2)`
BIC	$BIC = -2 \log(L) + p \log(n)$	`BIC(object, …)`

Donde:

L=likelihood p=# variables n=# muestras

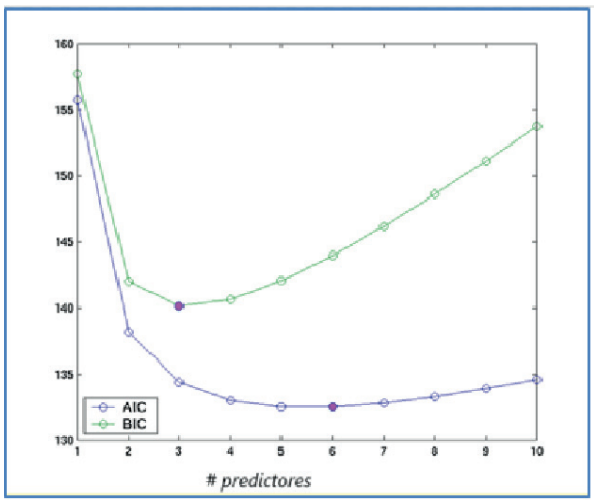
K=, la penalización por parámetro a utilizar; el valor predeterminado k = 2

Dado una cantidad de modelos con distinta cantidad predictores podemos obtener la siguiente gráfica.

Figura 8

Relación de los estimadores en función de predictores

Creación del autor Alfonso Prado



Selección de modelos usando AIC

Presenta caso de estudio

Enlace

Continuando con nuestro ejemplo de predicción de precios de vivienda

```
#Creamos 5 modelos basado en distintas variables
housingmod1 <- lm(ValuePerSqFt ~ Units +SqFt +Boro , data=housing )
housingmod2 <- lm(ValuePerSqFt ~ Units * SqFt +Boro , data=housing )
housingmod3 <- lm(ValuePerSqFt ~ Units +SqFt *Boro + Class, data=housing )
housingmod4 <- lm(ValuePerSqFt ~ Units +SqFt +Boro + SqFt*Class , data=housing )
housingmod5  <- lm(ValuePerSqFt ~ Boro + Class , data=housing )
#Comparamos los modelos con los estimadores
AIC(housingmod1, housingmod2,housingmod3,housingmod4,housingmod5)
BIC (housingmod1, housingmod2,housingmod3,housingmod4,housingmod5)
#Obtenemos los siguientes resultados
```

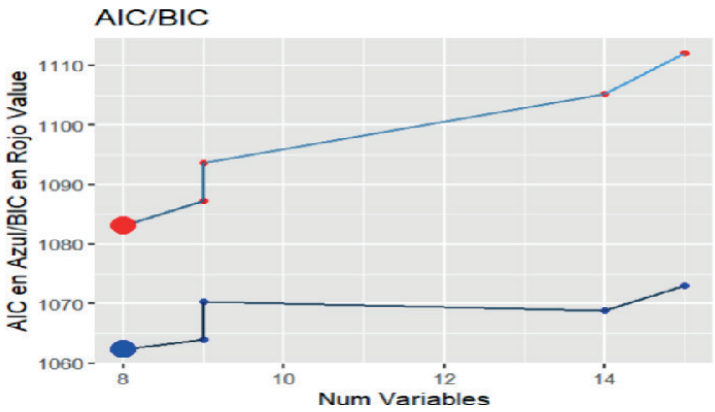
	df	AIC	BIC
housingmod1	8	1062.328	1083.169
housingmod2	9	1063.890	1087.337
housingmod3	15	1072.995	1112.073
housingmod4	14	1068.836	1105.308
housingmod5	9	1070.264	1093.710

```
#Que lo podemos graficar
```

Figura 9

Comparación de 5 modelos con estimadores AIC y BIC

Creación del autor Alfonso Prado



Note que en este caso los 2 estimadores recomiendan el mismo modelo, aunque sus valores son distintos.

De la tabla de los estimadores vale la pena aclarar el termino df. En primer lugar, df significa grados de libertad, que en este caso se traduce a la cantidad de variables predictoras. Si se fija en la creación del modelo 1, este toma 3 variables Units +SqFt +Boro, las 2 primeras son variables contínuas y la tercera es una variable categórica que tiene 5 niveles, los cuales han sido automáticamente codificados mediante one-hot, por lo tanto glm ha creado 5 variables codificadas para la variable Boro. Además tenemos el intercept del modelo con el cual suma o considera que el modelo tiene 8 variables.

En el modelo 2 tenemos, además de las anteriores, una variable que incluye los efectos combinados de Units:SqFt. Y así sucesivamente con el resto de modelos. Estos grados de libertad vienen a ser la cantidad de variables sobre las cuales se hará la penalización en ambos estimadores.

Selección automática

De los ejercicios presentados anteriormente entendemos que existen diferentes formas de evaluar la bondad de un modelo, sin embargo es interesante notar que esto ha requerido una gran cantidad de tiempo de parte del analista, por lo que es importante conocer de mecanismos automáticos que nos permitan ubicar los mejores modelos en una forma oportuna.

Para esto existen 4 enfoques:

- ✓ Todos los subconjuntos posibles
- ✓ Eliminación hacia atrás
- ✓ Selección hacia adelante incorporando variables
- ✓ Regresión de a pasos

Todos los conjuntos posibles

Si el dataset tiene p predictores teóricamente se podría crean 2^p modelos. Mediante este algoritmo crearemos efectivamente esta cantidad de modelos y evaluará mediante cualquier métrica descrita anteriormente cual es el subconjunto óptimo. Por supuesto, esto significa que se realizarán 2^p regresiones, lo cual podría ser problemático para valores de $p > 10$.

Eliminación hacia atrás

En este algoritmo, iniciamos con un modelo que contiene todas las covariables, y analizamos los valores t y pvalue para cada coeficiente, si todos los pvalues $< \alpha$, entonces el modelo completo es el mejor, caso contrario elimina la variable que tenga el mayor pvalue, manteniendo las restantes en el modelo. Se evalúa las métricas del modelo. Si el retiro de dicha variable ha provocado un descenso considerable de la métrica entonces el último modelo sería el mejor.

Selección hacia adelante

Es el inverso del anterior, iniciamos con un modelo con una variable y vamos incorporando variables adicionales hasta el punto en el cual las ganancias en el valor de la métrica ya no son significativas. En este caso la métrica que se utiliza es el estadístico F que nos muestra la relación del modelo con respecto a otro que solo tiene el intercept. Recuerde que este estadístico debe compararse con un Fcritico y cuando esta relación supera el valor α el proceso se detiene

Paso a paso

Es una modificación del procedimiento hacia adelante, que elimina una variable en el modelo si ésta pierde significancia cuando se agregan otras variables. El algoritmo es similar al de selección hacia adelante excepto que, a cada paso, después de incorporar una variable, el procedimiento elimina del modelo las variables que ya no tienen significancia.

Es importante mencionar que no siempre el algoritmo hacia adelante y el algoritmo hacia atrás terminarán seleccionando el mismo modelo.

Veamos un ejemplo de movilidad con mtcars

```
# Algoritmo hacia adelante
data(mtcars)
minimo<-  lm(mpg ~1 , data=mtcars)
summary(minimo)
step(minimo, direction="forward", scope=formula(completo))

Start:  AIC=115.94
mpg ~ 1

Step:  AIC=73.22
mpg ~ wt

Step:  AIC=63.2
mpg ~ wt + cyl

Step:  AIC=62.66
mpg ~ wt + cyl + hp

#Veamos algoritmo hacia atrás
 completo <- lm(mpg ~. , data=mtcars)
summary(completo)
step (completo, direction="backward")

Start:  AIC=70.9
mpg ~ cyl + disp + hp + drat + wt + qsec + vs + am + gear + carb
```

Métodos paso a paso

Presenta casos de uso

Enlace

Referencias citadas en la Clase 15.

Szretter M. (2017) Apunte de Regresión Lineal, https://mate.dm.uba.ar/~meszre/apunte_regresion_lineal_szretter.pdf

Faraway J. (2020), Extending the linear model with R, CRC Press

Definición de los términos citados en la Clase 15.

Varianza insesgada	Un estimador insesgado de la varianza es aquel cuya distribución de estimaciones, al tomar múltiples muestras, tiene una media que es igual a la varianza poblacional real. La insesgabilidad es una propiedad deseable en los estimadores, ya que garantiza que, en promedio, el estimador no se desvía sistemáticamente del valor verdadero del parámetro que se está estimando
Likelihood	En estadística, la función de verosimilitud (o simplemente, verosimilitud) es una función que permite realizar inferencias sobre los parámetros de un modelo estadístico, basándose en un conjunto de observaciones. Función de Verosimilitud: Es una función que evalúa qué tan bien un modelo estadístico describe los datos observados, para un determinado conjunto de parámetros.

Profundización Clase 15.

Comparación de Modelos

Presenta casos de comparación basado en distintas métricas

Enlace

PUCE Virtual

La excelencia no se improvisa

síguenos