RELACIÓN ENTRE DOS VARIABLES NUMÉRICAS. REGRESIÓN LINEAL SIMPLE. CORRELACIÓN.

Los métodos de regresión se usan para estudiar la relación entre dos variables numéricas. Puede interesar por ejemplo estudiar la relación entre estatura y perímetro cefálico de niños varones recién nacidos, o la relación entre la estatura del hijo y la estatura del padre (éste es un famoso ejemplo histórico de Galton 1880 que dió origen a la denominación "modelo de regresión").

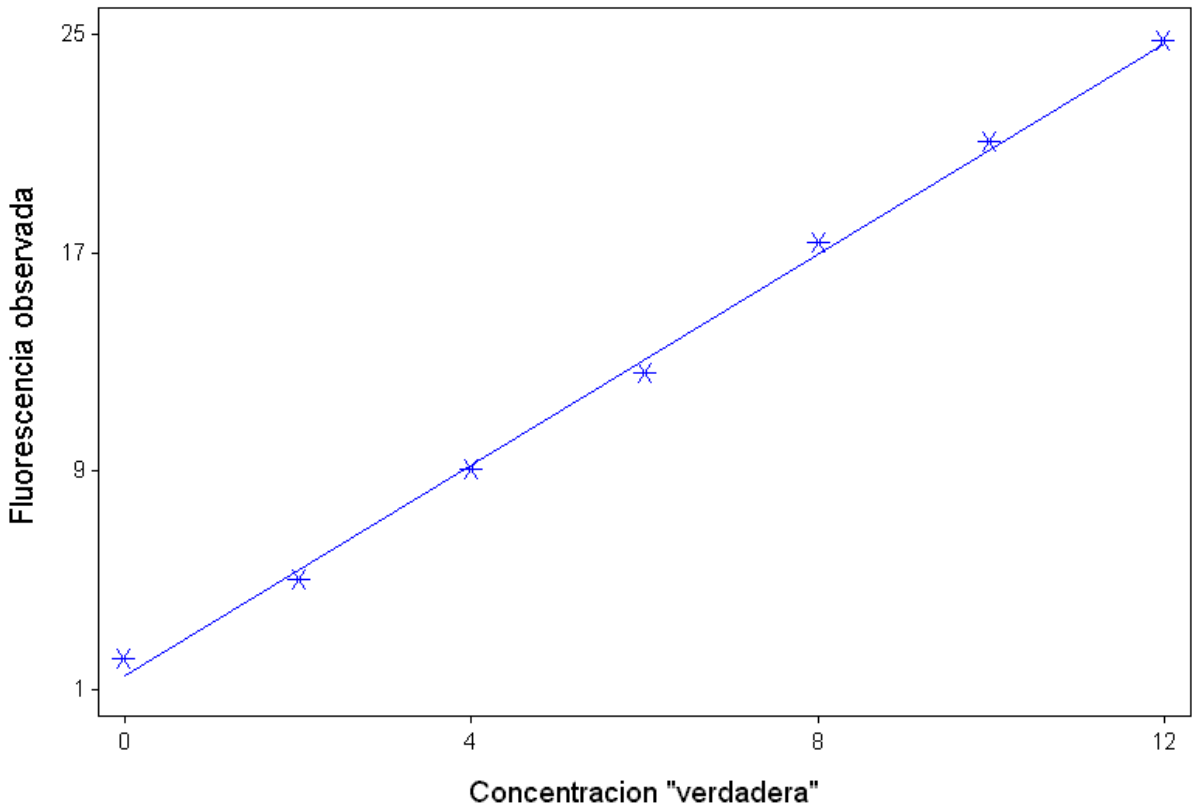
En química analítica se usa el modelo de regresión para calibrar un método de medición.

Ejemplo 1: Para calibrar un fluorímetro se han examinado 7 soluciones estándar de fluoresceína (de las que se conoce la concentración medida con mucha precisión) en el fluorímetro. Los siguientes datos son las "verdaderas" ("casi verdaderas") concentraciones y la intensidad de fluorescencia observada en el fluorímetro:

Concentración, pg/ml:	0	2	4	6	8	10	12
Intensidad de fluorescencia:	2.1	5.0	9.0	12.6	17.3	21.0	24.7

En un problema de calibración, queremos, a partir de mediciones hechas en muestras standard, estudiar la relación entre las mediciones y el "verdadero valor". Esta relación permitirá en el futuro, medir una muestra desconocida y conocer aproximadamente su verdadero valor.

Lo primero que se hace para estudiar la relación entre dos variables numéricas es un diagrama de dispersión (scatter plot), como el que se presenta a continuación. Para obtenerlo con el Statistix, se entra a "Statistics","Summary Statistics", "Scatter Plot".



Para ayudar a visualizar la relación, hemos agregado al gráfico de dispersión una recta que se llama "recta de regresión" o "recta de cuadrados mínimos". Para ello, basta marcar (en el Statistix) donde dice "Display Regression Line".

Recta de cuadrados mínimos.

La recta representada en el gráfico anterior es la recta de cuadrados mínimos. La recta de cuadrados mínimos es la que está "más cerca" de los puntos, en el sentido siguiente: hace mínima la suma de los cuadrados de las distancias de cada punto a la recta, midiendo las distancias verticalmente. O sea minimiza:

$$\Sigma (y_i - (a + b\, x_i))^2 \qquad (31)$$

Statistix calcula la ecuación de esa recta. Para ello hay que marcar "Statistics", "Linear Models", "Linear Regression". Ponemos "Fluorescencia" como variable dependiente y "Concentracion" como independiente y obtenemos:

```
UNWEIGHTED LEAST SQUARES LINEAR REGRESSION OF FLUORESCE

PREDICTOR
VARIABLES    COEFFICIENT    STD ERROR     STUDENT'S T       P
---------    -----------    ---------     -----------    ------
CONSTANT        1.51786       0.29494         5.15       0.0036
CONCENTRA       1.93036       0.04090        47.20       0.0000

R-SQUARED           0.9978      RESID. MEAN SQUARE (MSE)    0.18736
ADJUSTED R-SQUARED  0.9973      STANDARD DEVIATION          0.43285

SOURCE         DF       SS           MS          F        P
----------    ---   ----------   ----------   -----   ------
REGRESSION      1     417.343      417.343  2227.53   0.0000
RESIDUAL        5     0.93679      0.18736
TOTAL           6     418.280

CASES INCLUDED 7   MISSING CASES 0
```

Observando los "coeficientes" de la salida vemos que la recta de cuadrados mínimos tiene ordenada al origen `1.51786` y pendiente `1.93036`. Si los puntos (como en este ejemplo) están cerca de la recta, podemos decir que

$$y \cong 1.51786 + 1.93036\, X$$

o

$$\text{Fluorescencia} \cong 1.51786 + 1.93036\ \text{Concentración}$$

Por ejemplo si la verdadera concentración de fluoresceína de una muestra es 8, la ordenada de la recta es 1.51786 + 1.93036 *8 = 16.96. Obviamente esto no quiere decir que para la muestras que tengan concentración=8 la intensidad de la fluorescencia es 16.96 (ver gráfico, los puntos están muy cerca de la recta, pero no están sobre la recta).

Modelo de regresión lineal .

Para hace inferencias (aplicar test de hipótesis y calcular intervalos de confianza) se necesita, como siempre, suponer un modelo, que se llama "modelo de regresión lineal simple". La palabra "simple" es porque consideramos una sola variable independiente o predictora (X). Se generaliza en forma natural al caso en que hay varias variables independientes y en ese caso se llama "modelo de regresión lineal múltiple". Las suposiciones del modelo de regresión lineal simple (que es el que estudiaremos en este curso) son las siguientes.

MODELO: Se observan pares de valores (x_i, Y_i) para i=1,...n, que cumplen:

$$Y_i = \alpha + \beta\, x_i + e_i \quad \text{(para i=1,...,n)} \qquad (32)$$

donde $e_1, e_2, ..., e_n$ son variables aleatorias tales que

1) $E(e_i) = 0$ para todo i
2) $Var(e_i) = \sigma^2$ (o sea es siempre la misma para todas las observaciones)
3) $e_1, e_2, ..., e_n$ son vs as independientes

Para obtener algunos resultados alcanzan las suposiciones 1) a 3), pero para otros es necesario agregar:

4) $e_i \sim$ Normal

Obviamente las suposiciones 1) a 4) se pueden escribir en forma más breve:

$$1) \text{ a } 4) \iff e_i \text{ vs. as. i.i.d. } N(0,\sigma)$$

Comentario: Hay dos modelos un poco diferentes: el modelo con x_i's fijas y el modelo con x_i's aleatorias. En el primero los valores x_i's no son variables aleatorias sino que son números fijados por el experimentador. En el segundo tanto x_i como Y_i son observaciones de variables aleatorias. Los problemas de calibración son ejemplo con x_i's fijas. El problema de estudiar la relación entre estatura y perímetro cefálico de recién nacidos es un ejemplo con x_i's aleatorias. Pensaremos en esta clase en el modelo con x_i's fijas, que es más simple, pero casi todos los resultados (IC y tests) son los mismos para ambos modelos.

Una forma equivalente de escribir el modelo de regresión lineal simple (en el caso en que las x_i's son números fijos) es la siguiente:

1*) $E(Y_i) = \alpha + \beta\, x_i$ (para i=1,...,n)
2*) $Var(Y_i) = \sigma^2$ (para i=1,...,n)
3*) $Y_1, Y_2, ..., Y_n$ son vs as independientes
4*) $Y_i \sim$ Normal

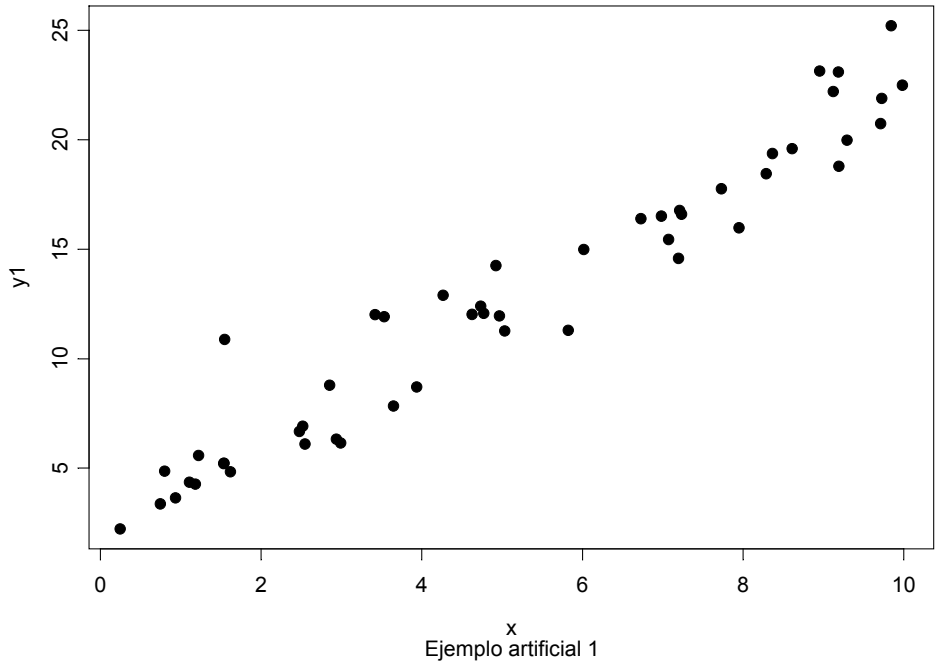
Nuevamente, las suposiciones 1*) a 4*) se pueden escribir en forma más breve:

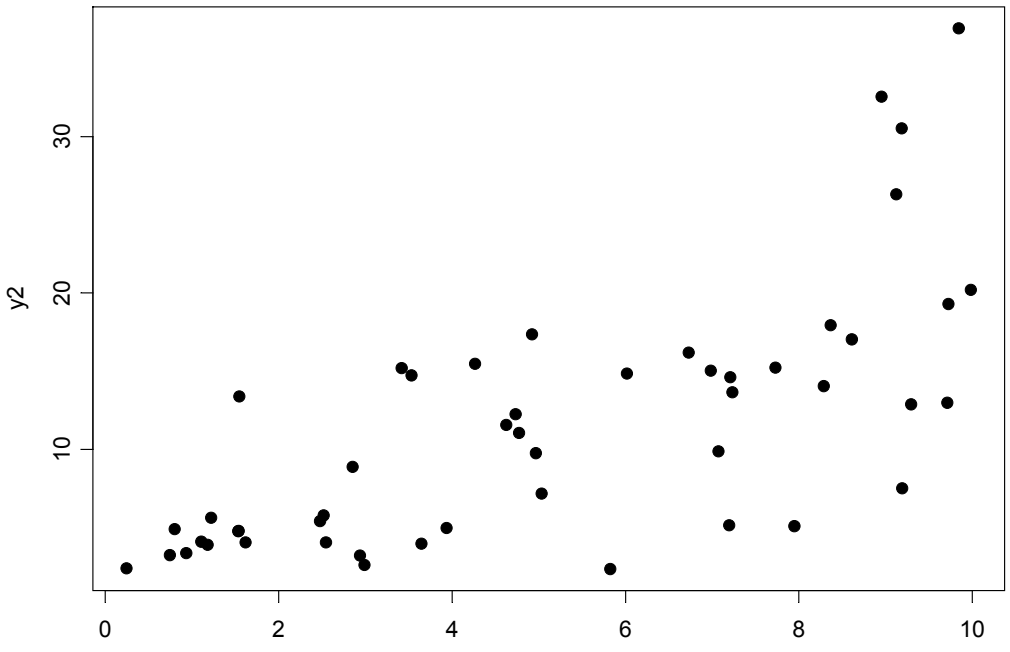
$$1^*) \text{ a } 4^*) \iff Y_i \text{ vs. as. i.i.d. } N(\alpha + \beta\, x_i, \sigma^2)$$

Comentario: en el modelo con x_i's aleatorias, no hay que hacer ninguna suposición sobre la distribución de las x_i's . Puede ser normal o no.

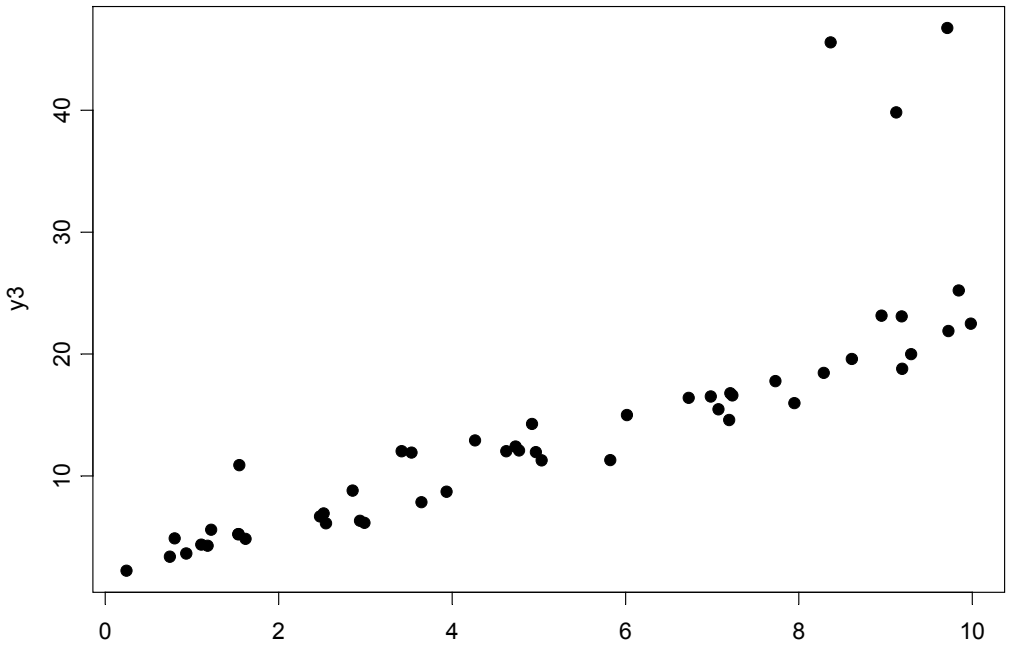
Como de costumbre, no se espera que las suposiciones del modelo se cumplan exactamente en un problema real, pero al menos que sean aproximadamente válidas. Si están lejos de cumplirse, las conclusiones pueden ser erróneas. Por ejemplo la presencia de algunos valores de Y atípicos (alejados de la recta, lo que implica que no se cumple la suposición 4)) pueden invalidar las conclusiones. En efecto, la recta de cuadrados mínimos, al igual que la media, es sensible a unos pocos valores atípicos.

Les presento a continuación gráficos de dispersión para cinco ejemplos artificiales, generados con un programa (generando números pseudoaleatorios). Algunos fueron generados de modo que cumplan todas las suposiciones del modelo de regresión lineal, otros no. ¿Detecta usted en cuáles de estos ejemplos no se cumple alguna de las suposiciones y cuál es la suposición que no se cumple?

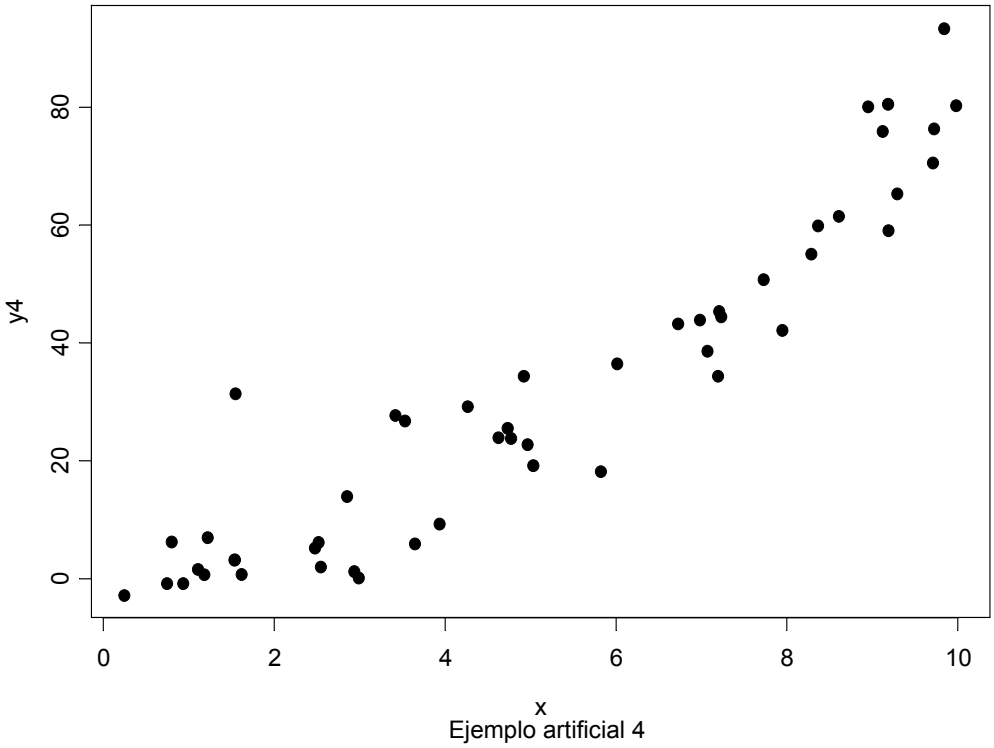




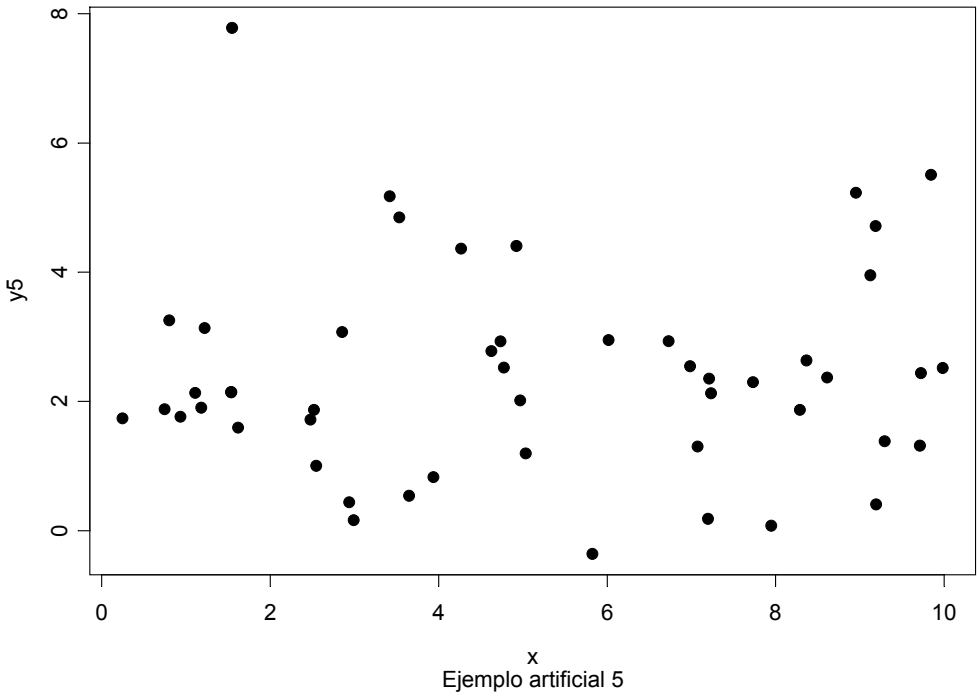
Ejemplo artificial 2



Ejemplo artificial 3



Ejemplo artificial 4



Ejemplo artificial 5

Estimadores de α y β por el método de cuadrados mínimos.

Llamemos $\hat{\alpha}$ y $\hat{\beta}$ a los valores de a y b que minimizan (31) que se llaman "estimadores de cuadrados mínimimos" de α y β. Se puede demostrar (derivando (31) e igualando a cero) que.

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} = \frac{(\sum_{i=1}^{n} x_i Y_i) - n\bar{x}\bar{Y}}{(\sum_{i=1}^{n} x_i^2) - n\bar{x}^2} \tag{33}$$

$$\hat{\alpha} = \bar{Y} - \hat{\beta}\,\bar{x} \tag{34}$$

Se puede demostrar que estos estimadores son óptimos si se cumplen las suposiciones 1) a 4).

Residuos: Se llaman residuos las diferencias entre los valores observados y las respectivas ordenadas de la recta:

$$\hat{e}_i = Y_i - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}\,x_i)$$

Estimador de σ^2. σ^2 es Var(e_i). Los e_i son vs. as. "no observables". Parece natural que el estimador de σ^2 se base en los residuos $\hat{e}_i$. Se puede demostrar que el estimador

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{e}_i^2}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}\,x_i))^2}{n-2} \tag{35}$$

es un estimador insesgado de σ^2

Varianza de $\hat{\alpha}$ y $\hat{\beta}$. Se puede demostrar fácilmente que:

$$E(\hat{\beta}) = \beta \tag{36}$$

$$Var(\hat{\beta}) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \tag{37}$$

y que

$$\mathrm{cov}(\bar{Y}, \hat{\beta}) = 0 \tag{38}$$

(Demostrar (36) y (37)).

Usando (36) a (38), se puede demostrar que

$$E(\hat{\alpha}) = \alpha \qquad ; \qquad Var(\hat{\alpha}) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]$$

Los estimadores de Var($\hat{\alpha}$) y Var($\hat{\beta}$) se obtienen reemplazando σ^2 por s^2.

Intervalo de confianza para β

Llamemos

$$ES(\hat{\beta}) = \sqrt{\hat{Var}(\hat{\beta})} = \sqrt{\frac{s^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}}$$

Es fácil justificar que el intervalo

$$\hat{\beta} \pm t_{n-2;\alpha/2}\, ES(\hat{\beta}) \tag{39}$$

es un IC para β con nivel 1-α. Si la suposición 4) (de normalidad) no se cumple, este intervalo, bajo condiciones muy generales, tiene nivel asintótico 1-α.

Una medida de cuán buena es X para predecir Y: el coeficiente de correlación lineal "r" de Pearson.

Este coeficiente puede interpretarse como una medida de cuán cerca están los puntos de una recta. La definición de r^2 es la siguiente:

$$r^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 - \sum_{i=1}^{n} (Y_i - (\hat{\alpha} + \hat{\beta} x_i))^2}{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2} \tag{40}$$

Puede observarse que r^2 compara la dispersión de los valores de y con respecto a la recta de cuadrados mínimos con la dispersión de los valores de y con respecto a su media. r^2 es la proporción de la "variación total" entre los valores de y que se puede explicar prediciéndolos por un recta en función de los valores de x.

Siempre es

$$0 \leq r^2 \leq 1$$

Significado del valor de r^2

$r^2 = 1$ significa que los puntos están exactamente sobre una recta (*)
r^2 cerca de 1 los puntos están cerca de una recta

r^2 cerca de 0 significa que la recta de cuadrados mínimos es prácticamente horizontal y por lo tanto no hay relación creciente ni decreciente.

(*) En las aplicaciones prácticas es "casi imposible" que r^2 valga exactamente igual a 1.

El coeficiente de correlación r es la raiz de r^2 y se le pone signo negativo si la pendiente de la recta de cuadrados mínimos es negativa (recta decreciente).
Otra expresión equivalente para calcular r es:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2}} \qquad (41)$$

Siempre es

$$-1 \leq r \leq 1$$

y r cerca de 1 o -1 indicará que los puntos están cerca de una recta creciente o decreciente respectivamente.

En el ejemplo de la fluorescencia, se ve en la salida del Statistix que R-SQUARED 0.9978 y, como la pendiente es positiva, es r = raiz(0.9978) = 0.9989. Ambos muy cerca de 1, son una medida de lo que vemos en el gráfico: los puntos están muy cerca de una recta

En el caso en que las x_i's son aleatorias, el coeficiente r es un estimador consistente del coeficiente de correlación $\rho(X,Y)$.

Estimación del valor esperado de Y para un valor fijado de x y su intervalo de confianza.

Si fijamos un valor de la variable independiente, digamos en x_0, cual es el valor esperado de Y para ese valor de X?
Por el modelo supuesto, por la suposición 1) o 1*) el valor esperado de Y es

$$E(Y) = \alpha + \beta x_0$$

Su estimador es

$$\hat{\alpha} + \hat{\beta}\, x_0$$

Usando (37) y (38) e puede demostrar que la varianza de este estimador es:

$$\mathrm{Var}(\hat{\alpha} + \hat{\beta} x_0) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \right] \qquad (42)$$

y que el intervalo de extremos

$$\left[\hat{\alpha} + \hat{\beta}\, x_0 - t_{n-2;\alpha/2} \sqrt{s^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]} \quad ; \quad \hat{\alpha} + \hat{\beta}\, x_0 + t_{n-2;\alpha/2} \sqrt{s^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]} \right] \tag{43}$$

es un IC con nivel 1-α para el valor esperado de Y, para $x = x_0$.

Predicción de un nuevo valor de Y conocido el valor de x e intervalo de predicción.
Los estimadores de los parámetros del modelo se basaron en una muestra de n observaciones (xi, Yi) (i=1,...,n).
Supongamos ahora que hacemos una nueva observación, pero sólo conocemos su valor de x (llamémoslo x_{n+1}), no conocemos su valor de Y, que llamaremos Y_{n+1}. Queremos en esta sección dar un valor aproximado para Y_{n+1} (se dice que queremos "predecir" Y_{n+1}) y un intervalo que contiene a Y_{n+1} con una probabilidad 0.95 (o 1-α) (que se llama intervalo de predicción para Y_{n+1}).

Ejercicio: Pensar en un problema concreto, por ej un problema de calibración en el que x es el verdadero contenido de una sustancia e Y la medición o un problema en el que x es la dosis de un fertilizante e Y la producción de trigo. ¿Que significa estimar E(Y) para un valor $x=x_0$ y que significa predecir un nuevo valor de Y en estos ejemplos? ¿Cuál problema la parece más útil?

Supondremos que el nuevo individuo observado cumple el mismo modelo que los n anteriores. Entonces:

$$Y_{n+1} = \alpha + \beta\, x_{n+1} + e_{n+1}$$

donde e_{n+1} es una v.a. con esperanza cero y es independiente de $e_1, e_2, ..., e_n$.
Es intuitivamente razonable que el mejor predictor de Y_0 sea:

$$\hat{Y}_{n+1} = \hat{\alpha} + \hat{\beta}\ x_{n+1} \tag{44}$$

El error de predicción es:

$$Y_{n+1} - \hat{Y}n+1 = (\alpha + \beta\, x_{n+1}) + e_0 - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}\ x_{n+1})$$

Se puede demostrar que este error de predicción tiene esperanza cero y varianza

$$\mathrm{Var}(Y_{n+1} - \hat{Y}_{n+1}) = \mathrm{Var}(e_{n+1}) + \mathrm{Var}(\hat{\alpha} + \hat{\beta} x_{n+1}) \quad = \sigma^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_{n+1} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]$$

y que el intervalo de extremos

$$\left[\hat{Y}_{n+1} - t_{n-2;\alpha/2} \sqrt{s^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_{n+1} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]} \; ; \; \hat{Y}_{n+1} + t_{n-2;\alpha/2} \sqrt{s^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_{n+1} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]} \right] \qquad (45)$$

es un "intervalo de predicción" con nivel 1-α para una nueva observación Y_0. ¿Sabe usted definir que significa esta afirmación?

Volvamos al ejemplo de la fluorescencia. De la salida del programa mostrada anteriormente obtenemos:

$$\hat{\alpha} = 1.51786 \quad ; \qquad \hat{\beta} = 1.93036 \quad ; \qquad s^2 = 0.18736$$

$$ES(\hat{\beta}) = \sqrt{\hat{Var}(\hat{\beta})} = 0.04090$$

No aparece directamente en la salida el IC para β, pero es fácil obtenerlo usando (39). Si queremos un IC al 95%, necesitamos el valor de t con 7-2=5 gl, con p=0.05 en las dos colas. En Statistix o en tablas obtenemos: $t_{5;\,0.025} = 2.57$ y, reemplazando en (39):

$$1.93036 \pm 2.57*0.04090$$
$$1.93036 \pm 0.10511$$

o, redondeando

IC para β con nivel 95%: [1.83; 2.04]

El IC al 95% para α se obtiene en forma análoga:

$$1.51786 \pm 2.57*0.29494$$

redondeando:

$$1.52 \pm 0.76$$

Predicción: Vamos a calcular ahora el predictor de la medición de fluorescencia y un intervalo de predicción para una nueva muestra standard cuya concentración de fluoresceína.es 8 pci/ml. El predictor es fácil de calcular:

$$\hat{Y}_{n+1} = \hat{\alpha} + \hat{\beta}\, x_{n+1} = 1.51786 + 1.93036*8 = 16.96$$

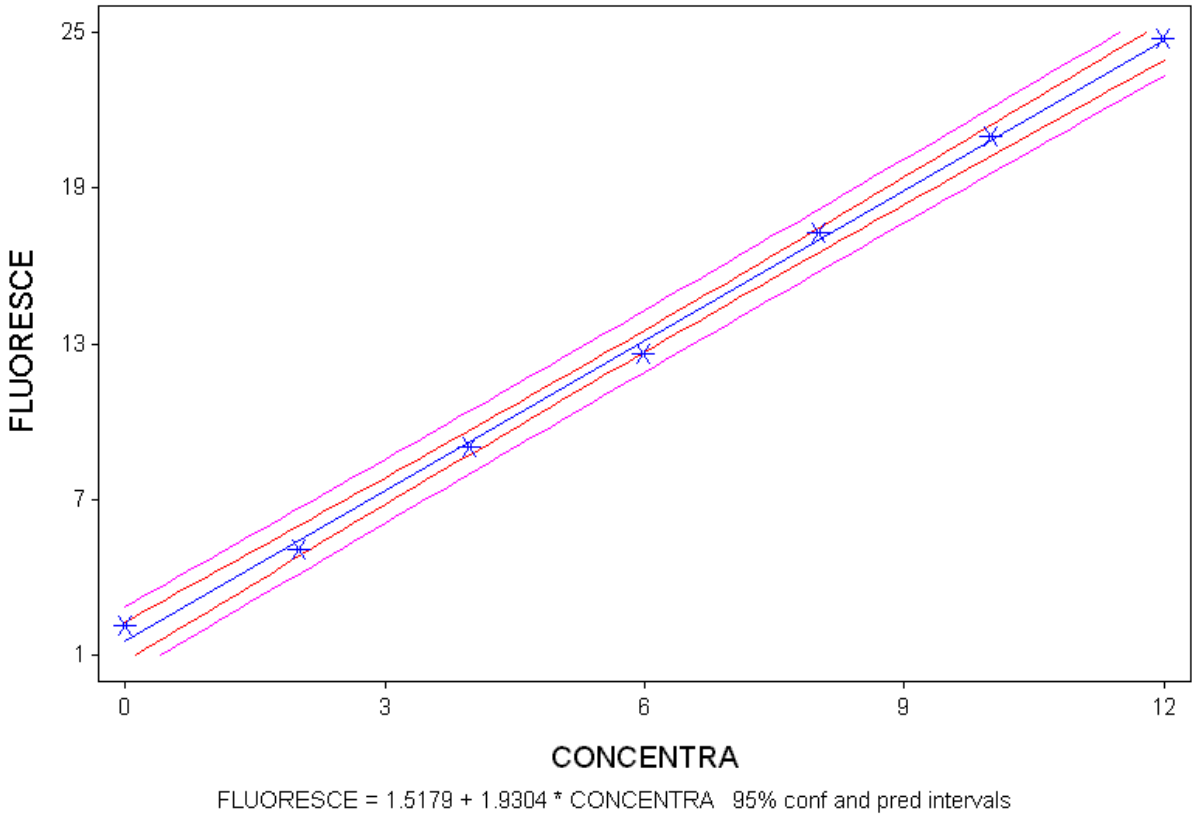
Para obtener el intervalo de predicción para Y_{n+1} hay que usar la expresión (45). Pero Statistix calcula automáticamente dicho intervalo. Para ello, inmediatamente después de obtener la salida de la regresión, marcamos "Results", "Prediction", ponemos en la ventana "Predictor Values" el número 8 y obtenemos:

```
PREDICTED/FITTED VALUES OF FLUORESCE

LOWER PREDICTED BOUND     15.753     LOWER FITTED BOUND     16.491
PREDICTED VALUE           16.961     FITTED VALUE           16.961
UPPER PREDICTED BOUND     18.169     UPPER FITTED BOUND     17.431
```

```
SE (PREDICTED VALUE)       0.4699     SE (FITTED VALUE)       0.1829

UNUSUALNESS (LEVERAGE)     0.1786
PERCENT COVERAGE             95.0
CORRESPONDING T              2.57

PREDICTOR VALUES: CONCENTRA = 8.0000
```

Vemos que el predictor es 16.961 y el intervalo de predicción al 95% es [15.753 ; 18.169]. También se muestra en esta salida el IC al 95% para el valor esperado de la medición de fluorescencia para muestras con concentración de fluoresceína=8. Observar este intervalo y ver que tiene menor longitud. ¿Cuál es la interpretación intuitiva de ambos intervalos en este ejemplo ? ¿Es intuitivamente razonable que el IC para el valor esperado tenga menor longitud?

Con Statistix también podemos representar gráficamente los intervalos de prediccion y los IC para el valor esperado de Y, para diferentes valores de x. Para ello, siempre a partir de la salida de la regresión lineal, vamos a "Results", "Plots", "Simple Regression Plot" y obtenemos:



Predicción inversa: predicción de de un nuevo valor de x conocido el valor de y cálculo de un intervalo de confianza.

Los estimadores de los parámetros del modelo se basaron en una muestra de n observaciones (xi, Yi) (i=1,...,n).

Supongamos ahora que hacemos una nueva observación, pero sólo conocemos su valor de Y, no conocemos su valor x. Queremos en esta sección calcular un estimador de x y un intervalo que contiene a x con una probabilidad 1-α.

Hemos dicho que hay dos modelos de regresión lineal simple: uno con x's fijas y otro con x's aleatorias. Pero en ambos modelos Y es aleatoria. En el caso en el que la variable x también es aleatoria, si queremos predecir X conocido Y una solución es cambiar el modelo: intercambiar en (32) el papel de las variables "Y" y "X" y luego aplicar "predicción" (o sea (44) y (45)). Pero si la variable x es fija (fijada por el experimentador), como suele ocurrir en los experimentos de calibración, no se la puede considerar como variable "Y" en (32) ya que no se cumplirían las suposiciones del modelo de regresión.

Consideremos entonces el caso x fija. Supondremos que el nuevo individuo observado cumple el mismo modelo que los n anteriores, luego

$$Y = \alpha + \beta\, x + e$$

donde e es una v.a. con esperanza cero y es independiente de e_1, e_2, ..., e_n.

Despejando x

$$x = \frac{Y - \alpha - e}{\beta}$$

Como no tenemos información ninguna sobre e, y de α y β sólo conocemos los estimadores, es intuitivamente razonable estimar x con:

$$\hat{x} = \frac{Y - \hat{\alpha}}{\hat{\beta}} \qquad (46)$$

Como $\hat{x}$ es un cociente de variables aleatorias, no es fácil calcular su varianza, pero se puede encontrar una expresión **aproximada**. El estimador de esta aproximación de la varianza es

$$\hat{V}ar(\hat{x}) = \frac{s^2}{\hat{\beta}^2}\left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(Y - \overline{Y})^2}{\hat{\beta}^2 \sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}\right] \qquad (47)$$

Llamando

$$ES(\hat{x}) = \sqrt{\hat{V}ar(\hat{x})} \qquad (48)$$

el intervalo

$$\hat{x} \pm t_{n-2;\alpha/2}\, ES(\hat{x}) \qquad (49)$$

es un intervalo de confianza con nivel aproximado 1-α para x.

Supongamos ahora que, para obtener mayor precisión, un químico hace "m" mediciones para la misma muestra. La muestra tiene un valor x desconocido y llamamos $\overline{Y}_m$ al promedio de las m observaciones Y's hechas en esa muestra. Entonces (46) y (47) se modifican así:

$$\hat{x} = \frac{\overline{Y}_m - \hat{\alpha}}{\hat{\beta}} \qquad (46^*)$$

$$\hat{Var}(\hat{x}) = \frac{s^2}{\hat{\beta}^2}\left[\frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(\overline{Y}_m - \overline{Y})^2}{\hat{\beta}^2 \sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}\right] \qquad (47^*)$$

Quedando (48) y (49) sin cambios.

Ejemplo: Lamentablemente Statistix no calcula la predicción inversa, que es el objetivo principal de un experimento de calibración. Hagamos las cuentas "a mano". Continuamos con el ejemplo de la fluoresceína. Ahora medimos una muestra de la que no conocemos la concentración de fluoresceína. La medición de fluorescencia es 13.5. ¿Cuál es la verdadera concentración de fluoresceína de la muestra? Llamemos x a esta verdadera concentración desconocida. Su estimador se calcula con (46):

$$\hat{x} = \frac{Y - \hat{\alpha}}{\hat{\beta}} = \frac{13.5 - 1.518}{1.930} = 6.21$$

El estimador de la concentración es 6.21 pg/ml. Una medida de la precisión de esta estimación la dan su Error Standar y también el IC al 95%. Necesitamos primero calcular (47). Vemos que todo lo que se necesita para calcular (47) puede encontrarse en la salida de la regresión lineal, salvo $\overline{Y}$ y $\sum(x_i - \bar{x})^2$. En este experimento en que hay n=7 pares de datos, se podrían hacer las cuentas con una calculadora. Otra forma puede ser calcular en Summary Statistics, Descriptive Statistics:

```
DESCRIPTIVE STATISTICS

VARIABLE          N        MEAN          SD    VARIANCE
CONCENTRA         7      6.0000      4.3205      18.667
FLUORESCE         7      13.100      8.3495      69.713
```

Luego $\overline{Y} = 13.10$

$\sum(x_i - \bar{x})^2$ no lo tenemos directamente, pero tenemos la varianza que es igual a $\sum(x_i - \bar{x})^2/(n-1)$. Por lo tanto multiplicando la varianza por (n-1) obtenemos

$$\sum(x_i - \bar{x})^2 = 18.667*6 = 112.0$$

Reemplazamos ahora en (47):

$$\hat{\mathrm{V}}\mathrm{ar}(\hat{x}) = \frac{0.18736}{1.93036^{2}}\left[1 + \frac{1}{7} + \frac{(13.5 - 13.10)^{2}}{1.93036^{2} * 112.0}\right] = 0.05748$$

Luego

$$\mathrm{ES}(\hat{x}) = \sqrt{0.05748} = 0.240$$

Aplicando (49) obtenemos que

$$6.21 \pm 2.57*0.240$$
$$6.21 \pm 0.62$$

son los límites de confianza al 95% para la concentración de fluoresceína en la nueva muestra observada.

Ejercicios:
1) Calcular el estimador de la concentración de fluoresceína y el IC al 95% para una muestra para la que se midió una fluorescencia de 23.0
Respuesta: 11.3 pg/ml
11.3 ± 0.68 pg/ml.

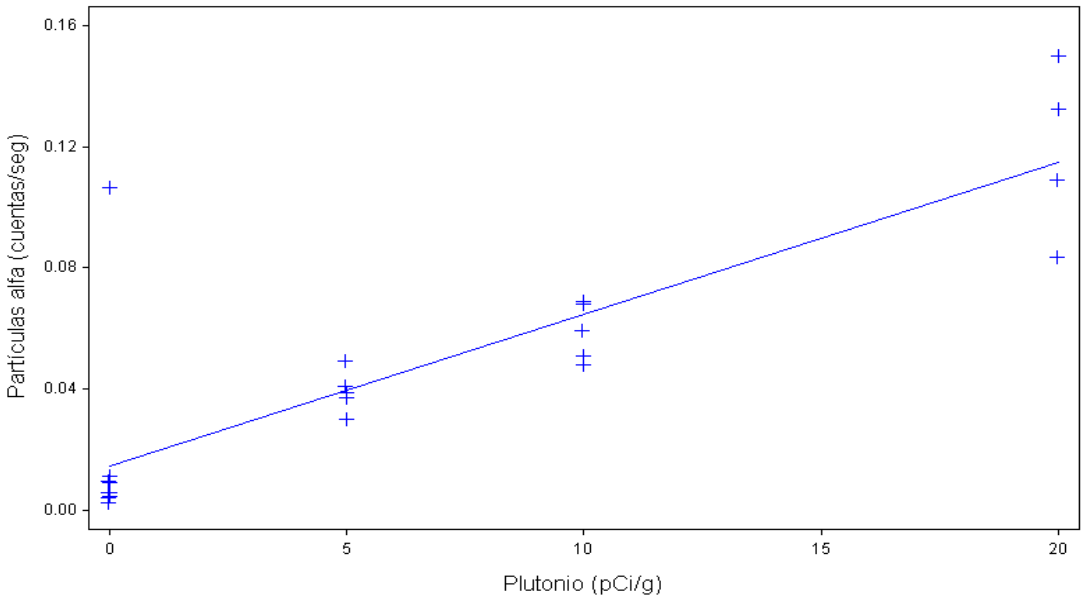
2) ¿De qué depende la longitud del IC para x? En particular, ¿la longitud es la misma para cualquier valor Y? ¿Como se deberían tomar las muestras standard en el experimento de calibración para disminuir la longitud de los intervalos de confianza para x?

Diagnóstico del modelo de regresión.

Ejemplo 2: En la clase de estadística descriptiva comenzamos a analizar los datos de un experimento de calibración. Dijimos en esa clase:

"Cuando el plutonio está presente en pequeñas cantidades mezclado con otros materiales es difícil detectarlo. Una forma de detectarlo es medir las partículas alfa que emite. En una investigación para estudiar la relación entre la cantidad de plutonio y la emisión de partículas alfa, se midieron varias veces cuatro materiales standards para los que se sabe que la actividad de plutonio (0, 5, 10 y 20 picocuries por gramo (pCi/g). Los resultados de estas mediciones están en el archivo plutonio.xls."

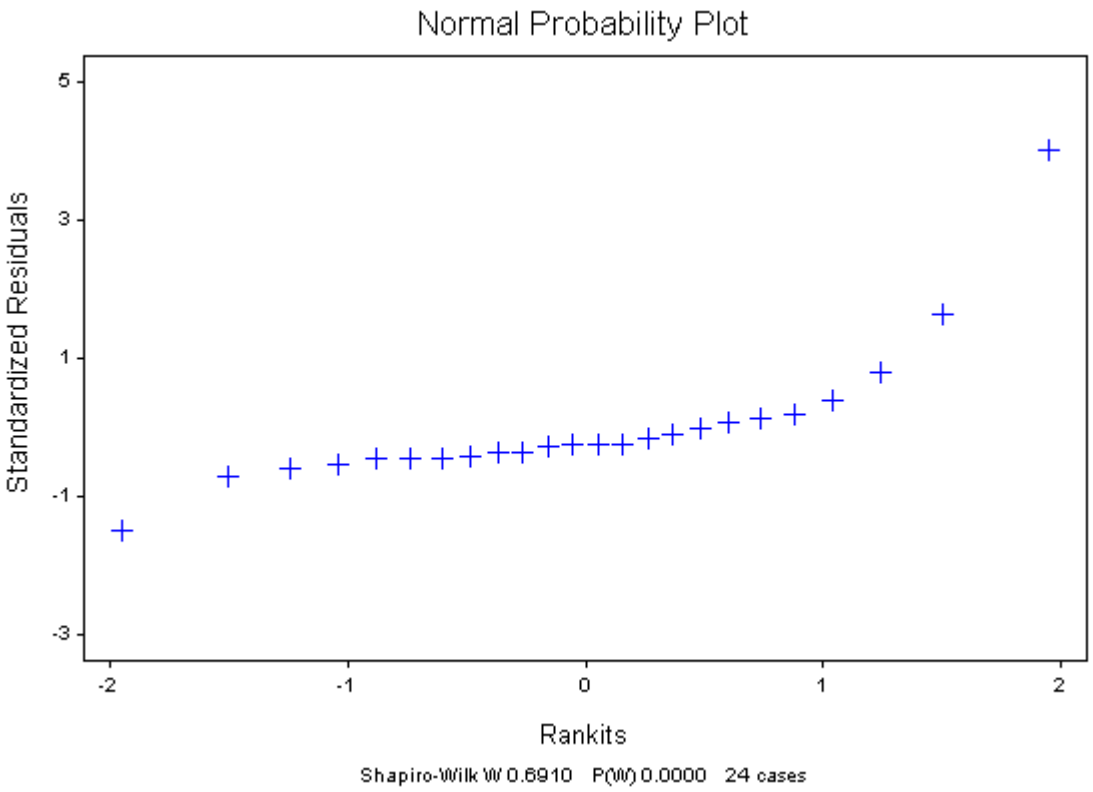
Observemos el diagrama de puntos ("Statistics","Summary Statistics", "Scatter Plot"):



Ya al ver este diagrama se observa que los datos no siguen el modelo de regresión lineal: hay un claro dato atípico y no parece cumplirse la suposición de varianza constante.
Otra forma que a veces ayuda a detectar fallas en el modelo, es estimar los parámetros del modelo y luego hacer gráficos para el ¨diagnóstico¨ del modelo. Para ello vamos a "Statistics", "Linear Models", "Linear Regression" y obtenemos:

```
UNWEIGHTED LEAST SQUARES LINEAR REGRESSION OF PARTALFA

PREDICTOR
VARIABLES     COEFFICIENT     STD ERROR      STUDENT'S T        P
---------     -----------     ---------      -----------     ------
CONSTANT          0.01453       0.00653           2.23       0.0366
PLUTONIO          0.00501     6.778E-04           7.40       0.0000

R-SQUARED             0.7133      RESID. MEAN SQUARE (MSE)  5.623E-04
ADJUSTED R-SQUARED    0.7003      STANDARD DEVIATION          0.02371

SOURCE          DF        SS            MS          F         P
----------     ---    ----------    ----------    -----    ------
REGRESSION       1      0.03078       0.03078     54.74    0.0000
RESIDUAL        22      0.01237     5.623E-04
TOTAL           23      0.04315

CASES INCLUDED 24   MISSING CASES 0
```

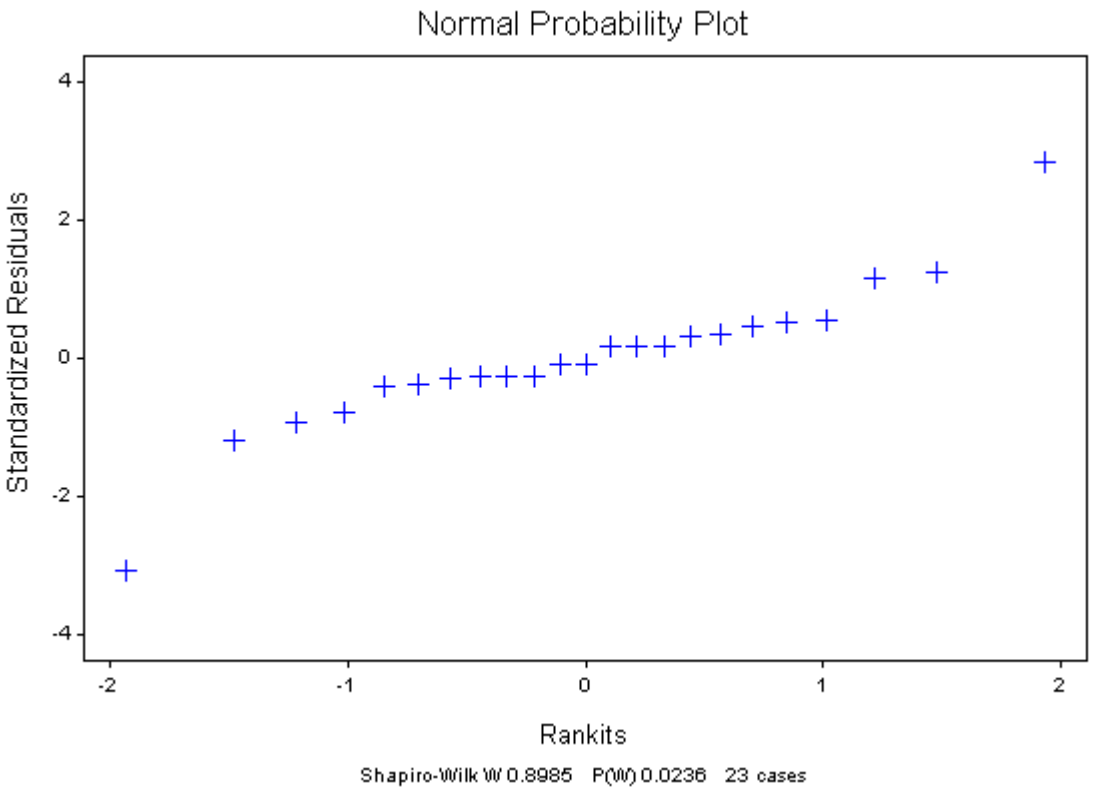
Con esta salida a la vista, se marca "Results", "Plots", "Normal Probability Plot", el programa hace el siguiente gráfico para estudiar la normalidad de los residuos:

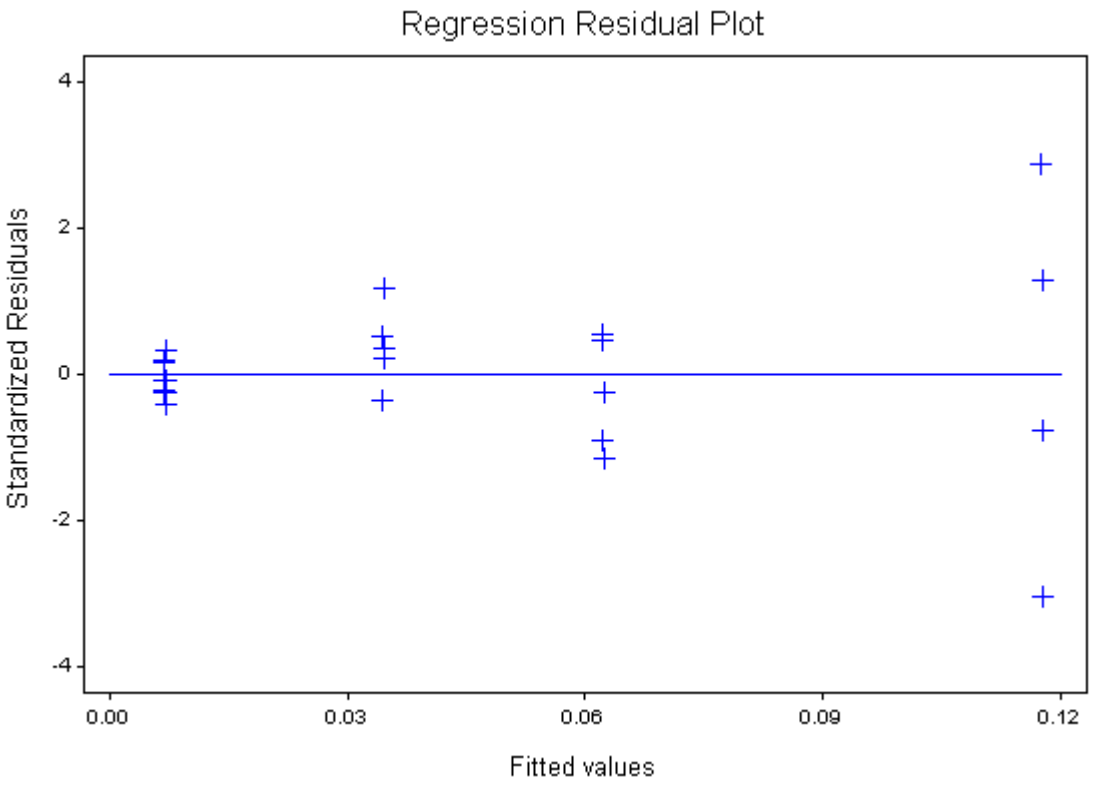


En el gráfico se observa la presencia de un valor atípico y el test de Shapiro Wilk rechaza la hipótesis de normalidad (P<0.0001).
Excluímos el dato atípico y volvemos a estimar los parámetros de la regresión y hacer gráficos con los residuos.

```
UNWEIGHTED LEAST SQUARES LINEAR REGRESSION OF PARTALFA

PREDICTOR
VARIABLES     COEFFICIENT     STD ERROR      STUDENT'S T        P
---------     -----------     ---------      -----------     ------
CONSTANT          0.00703       0.00360          1.95        0.0641
PLUTONIO          0.00554     3.659E-04         15.13        0.0000

R-SQUARED             0.9160      RESID. MEAN SQUARE (MSE)  1.580E-04
ADJUSTED R-SQUARED    0.9120      STANDARD DEVIATION          0.01257

SOURCE         DF        SS           MS          F         P
----------    ---    ----------   ----------   -----    ------
REGRESSION      1      0.03619      0.03619   229.00    0.0000
RESIDUAL       21      0.00332    1.580E-04
TOTAL          22      0.03951

CASES INCLUDED 23   MISSING CASES 0
```

Marcamos ahora Results, Plots y representamos los 2 graficos que nos ofrece el programa: grafico de probabilidad normal y grafico de residuos y valores ajustados. Estos son:





A pesar de haber excluido el dato atípico, se aprecia en el normal probability plot que los residuos no se distribuyen normalmente. El segundo grafico muestra muy claramente lo que ya vimos en el grafico de puntos originales: hay mayor dispersión “a derecha del gráfico”, parece que la variabilidad de la medición aumenta a medida que aumenta el valor esperado (no se cumple la suposición 2) del modelo lineal).

Esto indica que no es correcto ni conveniente usar para estos datos el método de cuadrados mínimos. No hay una solución automática para datos que no cumplen las suposiciones del modelo de regresión lineal. En este caso en que la dispersión aumenta con el valor esperado, se han propuesto dos tipos de soluciones. Una es la de aplicar "cuadrados mínimos ponderados". Otra es la de aplicar transformaciones a los datos.

Cuadrados mínimos ponderados.

En algunos problemas, se sabe de antemano o se observa en los datos que no se cumple la suposición de que los errores tienen igual varianza (suposición 2)), sino que la varianza cambia con x, digamos en general que es de la forma:

$$\text{Var}(e_i) = \text{funcion}(x_i) \qquad (50)$$

donde en principio la función es desconocida.

En problemas en los que e_i es el error de medición puede ser conocida de antemano la relación entre la variancia del error y lo que se quiere medir (x_i). Si tenemos la suerte de conocer de antemano algo sobre la relación que hay entre la varianza y el valor de x, o proponemos esta relación observando los datos, la solución es simple. Las relaciones más usadas son que la varianza o la desviacion standard son proporcionales a x, o sea

$$\text{a) } \text{Var}(e_i) = \text{cte. } x_i \qquad \text{b) } \text{DS}(e_i) = \text{cte. Xi} \qquad (51)$$

Observar que tanto a) como b) pueden escribirse del siguiente modo

$$\text{Var}(e_i) = \theta\, v_i$$

donde θ es una constante conocida o más frecuentemente un parámetro a estimar y v_i son constantes conocidas.

Supongamos ahora que se cumple (32) con las suposiciones 1) y 3), pero cambiando 2) por $\text{Var}(e_i) = \theta\, v_i$. Entonces si dividimos por $\sqrt{v_i}$ ambos miembros de (32) y llamamos

$$Y_i^* = \frac{Y_i}{\sqrt{v_i}}. \qquad ; \qquad x_i^* = \frac{x_i}{\sqrt{v_i}}; \qquad e_i^* = \frac{e_i}{\sqrt{v_i}}$$

obtenemos

$$Y_i^* = \alpha \frac{1}{\sqrt{v_i}} + \beta\, x_i^* + e_i^* \quad (\text{para } i=1,...,n) \qquad (52)$$

donde ahora e_i^* cumple las suposiciones 1) a 3) del modelo lineal "clásico". Luego para estimar los parámetros α y β se aplica cuadrados mínimos en (52), que equivale (demostrar) a minimizar

$$\Sigma(1/v_i)\ (y_i - (a + b\, x_i))^2 \qquad (53)$$

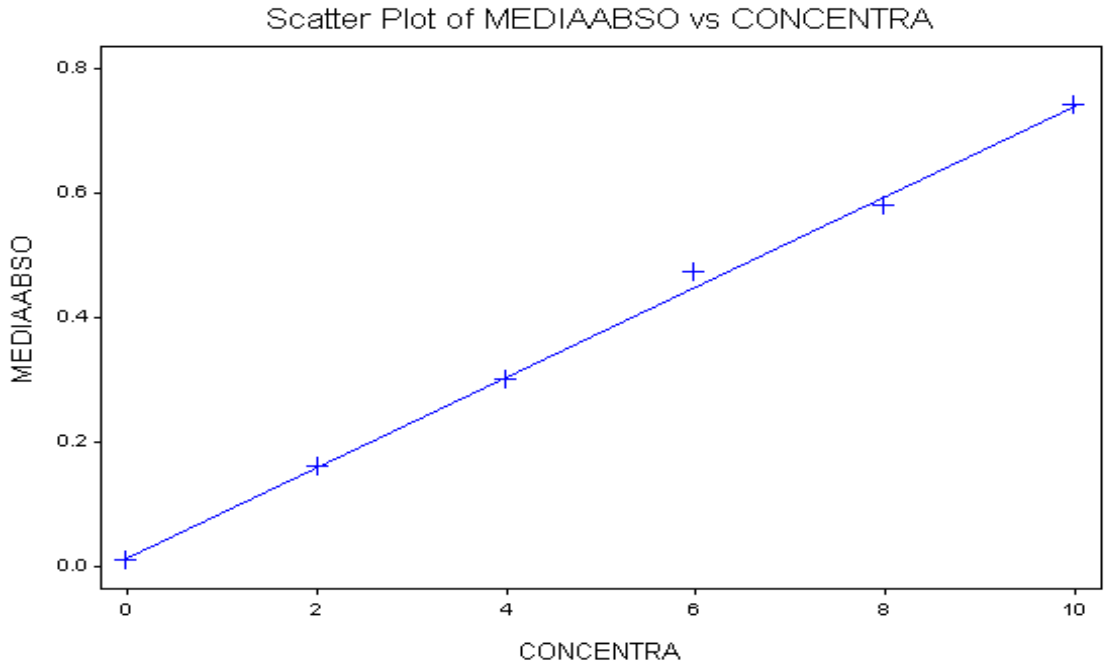
por lo que el método de estimación se llama **cuadrados mínimos pesados** (o ponderados). Observar que el peso de cada observación es inversamente proporcional a su varianza, lo que es intuitivamente razonable.

Cuando para cada valor de x se hacen **varias observaciones** de y, se puede estimar las varianzas de los errores por las varianzas muestrales en lugar de hacer suposiciones como en (51). Luego se emplean estas varianzas estimadas en el método de cuadrados mínimos ponderados. Veremos a continuación un ejemplo en el que aplicaremos este método. Este método no es recomendable si hay pocas observaciones para cada x.

Ejemplo 3: En el libro de Miller[1] se presenta el siguiente problema. En un experimento de calibración se analizaron soluciones standard con concentración conocida. Cada solución fue medida 10 veces. Se muestran las medias y las DS de las absorbancias observadas:

Concentración	0	2	4	6	8	10
Absorbancia						
Promedio	0.009	0.158	0.301	0.472	0.577	0.739
DS	0.001	0.004	0.010	0.013	0.017	0.022

Los datos de concentración y promedio de absorbancia se grafican a continuación:



Se observa en el gráfico que la relación es lineal. Pero en la tabla (esto no se ve en el gráfico, porque no tenemos los datos originales del experimento, verdad?) se ve que a medida que la verdadera concentración aumenta, crece la DS. Asi que es insostenible la suposición 2) del modelo de regresión en este ejemplo y es evidente que

$$Var(e_i) = funcion(x_i) = v_i$$

donde la función es creciente. Si no tenemos idea previa de la forma de esta función, se suele simplemente estimar cada v_i con el cuadrados de la DS correspondiente. Por ejemplo para $x_i=0$ estimamos v_i con el cuadrado de 0.001, etc. El estimador de mínimos cuadrados

ponderados usa como pesos las inversas de estos v_i estimados. El Statistix permite calcular cuadrados mínimos ponderados. Ingresamos los datos, calculamos los pesos y obtenemos la siguiente salida:

```
WEIGHTED LEAST SQUARES LINEAR REGRESSION OF MEDIAABSO

WEIGHTING VARIABLE: PESOS

PREDICTOR
VARIABLES    COEFFICIENT    STD ERROR     STUDENT'S T       P
---------    -----------    ---------     -----------    ------
CONSTANT         0.00908       0.00105          8.67      0.0010
CONCENTRA        0.07376       0.00106         69.33      0.0000

R-SQUARED           0.9992      RESID. MEAN SQUARE (MSE)    1.12503
ADJUSTED R-SQUARED  0.9990      STANDARD DEVIATION          1.06067
```

Si, por error hubiésemos calculado la recta de cuadrados mínimos sin ponderaciones, hubiésemos obtenido:

```
UNWEIGHTED LEAST SQUARES LINEAR REGRESSION OF MEDIAABSO

PREDICTOR
VARIABLES    COEFFICIENT    STD ERROR     STUDENT'S T       P
---------    -----------    ---------     -----------    ------
CONSTANT         0.01329       0.01056          1.26      0.2767
CONCENTRA        0.07254       0.00174         41.60      0.0000

R-SQUARED           0.9977      RESID. MEAN SQUARE (MSE)  2.128E-04
ADJUSTED R-SQUARED  0.9971      STANDARD DEVIATION          0.01459
```

Pregunta: Cuál es la recta que Statistix representa en el "scatter plot"?

Aunque en este ejemplo los estimadores de α y β son parecidos, debido a que los puntos están muy cerca de una recta, en otros ejemplo podría haber diferencias importantes.

Transformaciones: Otra forma de solucionar la falla en la suposición 2) que suele ser al mismo tiempo útil para lograr que los residuos tengan una distribución más próxima a la normal es aplicar transformaciones a los datos. Se suele probar con la transformación logarítmica o raíz cudrada o elegir una transformación en una familia de transformaciones que incluye a estas dos y a otras (método de Box y Cox). Existen métodos para elegir una transformación. No trataremos estos métodos en este curso. Se pueden ver por ejemplo en el libro de Neter y otros [2].

Referencias:

1. Miller y Miller. Estadística para Química Analítica. Addison Wesley.

2. Neter, Kutner, Nachtsheim y Wasserman. Applied Liner Statistical Models. Mc Graw Hill.