# CAPÍTULO 7. MODELOS LINEALES Y REGRESIÓN

#### Para leer

Box y Tiao (1973), Broemeling (1984), Gelman et al (1995), Capítulo 8, Lee (1997), Capítulo 6.

Sea  $\mathbf Y$  un vector de n observaciones. El modelo lineal para  $\mathbf Y$  es

$$Y = X\theta + \epsilon$$

donde  $\pmb{\theta}$  es un vector de parámetros de dimensión p,  $\mathbf{X}$  es una matriz de diseño de dimensión  $n \times p$  y

$$oldsymbol{\epsilon} | \phi \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, rac{1}{\phi} \mathbf{I}
ight)$$

donde I es la matriz de identidad de dimensión  $n \times n$ .

La estructura incluye muchos modelos fundamentales como ADEVA, efectos aleatorios y fijos etc.

### Ejemplo 90 Observaciones univariables

$$\mathbf{X}^T=(1,\dots,1),\quad heta$$
 escalar  $p=1.$  Luego, se tiene  $Y_i\sim \mathcal{N}\left( heta,rac{1}{\phi}
ight)$  para  $i=1,\dots,n.$ 

## Ejemplo 91 Regresión lineal simple

$$\mathbf{X}^{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$
$$E[y_i|\boldsymbol{\theta}] = \alpha + \beta x_i$$

## Ejemplo 92 ADEVA

$$y_{ij}= heta_i+\epsilon_{ij}$$
 donde  $\epsilon_{ij}|\phi\sim\mathcal{N}\left(0,rac{1}{\phi}
ight)$ , para  $i=1,\ldots,p$  y  $j=1,\ldots,n_i$ .

Entonces 
$$\theta = (\theta_1, \dots, \theta_p)^T$$
,
$$\mathbf{y} = (y_{11}, \dots, y_{1n_1}, y_{21}, \dots, y_{2n_2}, \dots, y_{pn_p})^T$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad n_1$$

y se tiene  $\mathbf{Y}|\boldsymbol{\theta}, \phi \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}, \frac{1}{\phi}\mathbf{I}\right)$ , donde  $\mathbf{I}$  es la identidad de dimensión  $n = \sum_{i=1}^{p} n_i$ .

## Inferencia para el modelo lineal dada la distribución a priori de referencia

Condicionando sobre los parámetros desconocidos, la distribución de los datos es normal multivariante.

$$\mathbf{Y}|oldsymbol{ heta}, \phi \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{X}oldsymbol{ heta}, rac{1}{\phi}\mathbf{I}
ight).$$

Luego, se puede demostrar que bajo la distribución a priori no informativa

$$f(\boldsymbol{ heta},\phi)\propto rac{1}{\phi}$$

entonces los resultados de la inferencia bayesiana coinciden numéricamente con los resultados clásicos de siempre.

**Teorema 13** Sea  $\mathbf{Y}|\boldsymbol{\theta}, \phi \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}, \frac{1}{\phi}\mathbf{I}\right)$  con distribución a priori  $f(\boldsymbol{\theta}, \phi) \propto \frac{1}{\phi}$ . Luego la distribución a posteriori de  $\boldsymbol{\theta}, \phi|\mathbf{y}$  es

$$m{ heta}|\phi,\mathbf{y}| \sim \mathcal{N}\left(\widehat{m{ heta}}, \frac{1}{\phi}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\right)$$
 $\phi|\mathbf{y}| \sim \mathcal{G}\left(\frac{n-p}{2}, \frac{(n-p)s^2}{2}\right)$ 

donde

$$\hat{\theta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad \mathbf{y}$$

$$s^2 = \frac{1}{n-p} \mathbf{y}^T \left( \mathbf{I} - \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \right) \mathbf{y}$$

Además, la distribución marginal de  $heta_i$  es

$$\frac{\theta_i - \widehat{\theta}_i}{s\sqrt{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})_{ii}^{-1}}} \mid \mathbf{y} \sim t_{n-p}.$$

### Demostración

Utilizando el teorema de Bayes,

$$f(\boldsymbol{\theta}, \phi | \mathbf{y}) \propto \frac{1}{\phi} \phi^{\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{\phi}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})^{T} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})\right)$$

$$y \text{ luego}$$

$$\propto \phi^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{\phi}{2} \left[\boldsymbol{\theta}^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{X} \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y} - \mathbf{y}^{T} \mathbf{X} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{y}^{T} \mathbf{y}\right]\right)$$

$$\propto \phi^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{\phi}{2} \left[\boldsymbol{\theta}^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{X} \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{X} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y} - \mathbf{y}^{T} \mathbf{X} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y} - \mathbf{y}^{T} \mathbf{X} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y}\right]\right)$$

$$\propto \phi^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{\phi}{2} \left[(\boldsymbol{\theta} - (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y})^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{X} (\boldsymbol{\theta} - (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y}) + \mathbf{y}^{T} \mathbf{y} - \mathbf{y}^{T} \mathbf{X} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y}\right]\right)$$

$$\propto \phi^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{\phi}{2} \left[(\boldsymbol{\theta} - (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y})^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{X} (\boldsymbol{\theta} - (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{y}) + \mathbf{y}^{T} (\mathbf{I} - \mathbf{X} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{X})^{-1}) \mathbf{X}^{T} \mathbf{y}\right)\right].$$

Luego, 
$$\theta | \phi, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}\left( (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \frac{1}{\phi} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \right).$$

Además, integrando la distribución conjunta con respeto a  $\theta$ , se tiene

$$f(\phi|\mathbf{y}) \propto \phi^{\frac{n-p}{2}-1} \exp\left(-\frac{\phi}{2}\left[\mathbf{y}^T(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1})\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right]\right)$$
 que es el núcleo de una distribución gamma.

Ahora, la distribución de  $\theta_i | \phi, \mathbf{y}$  es

$$|\theta_i|\phi, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}\left(\widehat{\theta}_i, \frac{1}{\phi}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})_{ii}^{-1}\right)$$

y entonces, la distribución conjunta de  $heta_i, \phi$  es normal gamma

$$\theta_i, \phi | \mathbf{y} \sim \mathcal{NG}\left(\widehat{\theta}_i, \frac{1}{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})_{ii}^{-1}}, \frac{n-p}{2}, \frac{(n-p)s^2}{2}\right)$$

y aplicando el Teorema 5 para la distribución marginal de  $\theta_i$  proporciona el resultado.

Ejemplo 93 Volvemos al Ejemplo 90.

Se tiene  $\mathbf{X}^T\mathbf{X} = n$  y  $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{n}$ . Además,

$$(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i = \bar{y}$$

y entonces,

$$\theta | \phi, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}\left(\overline{y}, \frac{1}{n\phi}\right).$$

El estimador de la varianza es

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \mathbf{y}^T (\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{1}) \mathbf{y}$$

donde 1 es una matriz de unos. Luego,  $s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2$  y se tiene

$$\phi|\mathbf{y}\sim\mathcal{G}\left(\frac{n-1}{2},\frac{(n-1)s^2}{2}\right),$$

el mismo resultado que se ha visto en el Capítulo 3.

### Ejemplo 94 En el Ejemplo 91,

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{X} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2} \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{n\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2} & -n\bar{x} \\ -n\bar{x} & n \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum_{i=1}^{n} x_{i}y_{i} \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \bar{y} - \bar{x}\frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})} \\ \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix}$$

donde  $\hat{\alpha}$  y  $\hat{\beta}$  son los estimadores clásicos de mínimos cuadrados.

$$\left| egin{array}{c} lpha \ eta \end{array} 
ight| \phi, \mathbf{y} \ \sim \mathcal{N} \left( \left| egin{array}{c} \widehat{lpha} \ \widehat{eta} \end{array}, rac{1}{\phi} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} 
ight)$$

Además,

$$\mathbf{y}^{T}(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T})\mathbf{y} = \left(\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \bar{y})^{2} - \widehat{\beta} \sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})\right)$$

y luego se tiene

$$\phi|\mathbf{y}\sim\mathcal{G}\left(\frac{n-2}{2},\frac{(n-2)s^2}{2}\right)$$

donde  $s^2$  es el estimador clásico del error residuo.

Se ve que los estimadores coinciden con los estimadores clásicos.

### Ejemplo 95 Retomando el Ejemplo 92,

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{X} = \begin{pmatrix} n_{1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_{2} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & n_{p} \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n_{1}} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{n_{2}} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{n_{p}} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X}^{T}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} n_{1}\bar{y}_{1} \\ n_{2}\bar{y}_{2} \\ \vdots \\ n_{p}\bar{y}_{p} \end{pmatrix} \quad donde \ \bar{y}_{i} = \frac{1}{n_{i}} \sum_{j=1}^{n_{i}} y_{ij}$$

$$(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \bar{y}_{1} \\ \bar{y}_{2} \\ \vdots \\ \bar{y}_{p} \end{pmatrix}$$

Luego se tiene

$$m{ heta} | m{y} \sim \mathcal{N} \left( egin{array}{cccc} ar{y}_{1} & m{z}_{2} & m{1} & m{0} & m{0} & \dots & m{0} \\ ar{y}_{2} & m{1} & m{0} & m{1}_{n_{2}} & m{0} & \dots & m{0} \\ ar{y}_{p} & m{z} & m{0} & m{0} & m{0} & \dots & m{1}_{n_{p}} \end{array} 
ight) 
ight)$$

Además,

$$\mathbf{y}^{T}(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{T})\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{n_{i}} y_{ij}^{2} - \sum_{i=1}^{p} n_{i}\bar{y}_{i}^{2}$$
$$= \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{n_{i}} (y_{ij} - \bar{y}_{i})^{2}$$

y entonces

$$\phi | \mathbf{y} \sim \mathcal{G}\left(\frac{n-p}{2}, \frac{(n-p)s^2}{2}\right)$$
donde  $s^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2$ .

Luego

$$\frac{\theta_i - \bar{y}_i}{s/\sqrt{n_i}} \sim t_{n-p}$$

y un intervalo de credibilidad coincide con el intervalo clásico.

Además, si se quiere estimar la diferencia entre dos efectos  $\delta_{i_1i_2} = \theta_{i_1} - \theta_{i_2}$  se tiene

$$\delta_{i_1 i_2} | \phi, \mathbf{y} \sim \mathcal{N} \left( \bar{y}_{i_1} - \bar{y}_{i_2}, \frac{1}{\phi} \left( \frac{1}{n_{i_1}} + \frac{1}{n_{i_2}} \right) \right)$$

y entonces un intervalo de credibilidad para  $\delta_{i_1i_2}$  será

$$\bar{y}_{i_1}$$
.  $-\bar{y}_{i_2}$ .  $\pm s \sqrt{\frac{1}{n_{i_1}} + \frac{1}{n_{i_2}}} t_{n-p} (0 - 025)$ 

igual al intervalo clásico de confianza.

## La distribución marginal de heta

Integrando la distribución conjunta de  $\theta$ ,  $\phi$  con respeto a  $\phi$ , se tiene

$$f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \propto \left( (\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}}) + (n - p) s^2 \right)^{-\frac{n}{2}}$$
$$\propto \left( 1 + \frac{(\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}})}{(n - p) s^2} \right)^{-\frac{n - p + p}{2}}$$

que es el núcleo de una distribución t multivariante, esclada y no centrada.

Es una densidad muy complicada pero fácil de muestrear con el siguiente algoritmo Monte Carlo:

Para 
$$j = 1, \dots, R$$

1. Muestrear 
$$\phi_j \sim \mathcal{G}\left(rac{n-p}{2},rac{(n-p)s^2}{2}
ight)$$

2. Muestrear 
$$m{ heta}_j \sim \mathcal{N}\left(\widehat{m{ heta}}, rac{1}{\phi_j}(\mathbf{x}^T\mathbf{X})^{-1}
ight)$$

#### Predicción a través de modelos lineales

Sea  $\tilde{X}$  una nueva matriz de diseño. A menudo, se quiere predecir tanto la respuesta media  $\tilde{X}\theta$  como nuevas observaciones  $\tilde{Y} = \tilde{X}\theta + \tilde{\epsilon}$ .

Luego se tiene

$$egin{array}{lll} \mathbf{ ilde{X}} oldsymbol{ heta} | \phi, \mathbf{y} & \sim & \mathcal{N}\left(\mathbf{ ilde{X}} oldsymbol{\hat{ heta}}, \frac{1}{\phi} \mathbf{ ilde{X}} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{ ilde{X}}^T
ight) \ \mathbf{ ilde{Y}} | \phi, \mathbf{y} & \sim & \mathcal{N}\left(\mathbf{ ilde{X}} oldsymbol{\hat{ heta}}, \frac{1}{\phi} \left(\mathbf{ ilde{I}} + \mathbf{ ilde{X}} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{ ilde{X}}^T
ight) 
ight) \end{array}$$

y las distribuciones predictivas de  $ilde{\mathbf{X}} heta$  y  $ilde{\mathbf{Y}}$  son distribuciones t multivariantes.

No obstante, si  $\tilde{\mathbf{x}}\theta$  es escalar e

$$\tilde{Y} = \tilde{x}\theta + \tilde{\epsilon}$$

entonces

$$egin{array}{lll} & ilde{\mathbf{x}} heta | \phi, \mathbf{y} & \sim & \mathcal{N}\left( ilde{\mathbf{x}} \widehat{oldsymbol{ heta}}, rac{1}{\phi} ilde{\mathbf{x}} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} ilde{\mathbf{x}}^T 
ight) \ & ilde{Y} | \phi, \mathbf{y} & \sim & \mathcal{N}\left( ilde{\mathbf{x}} \widehat{oldsymbol{ heta}}, rac{1}{\phi} \left( 1 + ilde{\mathbf{x}} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} ilde{\mathbf{x}}^T 
ight) 
ight) \end{array}$$

y, (integrando con respeto a  $\phi$ ,) las distribuciones predictivas de  $\tilde{\mathbf{x}}\theta$  e  $\tilde{Y}$  son

$$\frac{\tilde{\mathbf{x}}\theta - \tilde{\mathbf{x}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}{s\sqrt{\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\tilde{\mathbf{x}}^T}} \mid \mathbf{y} \sim t_{n-p}$$

$$\frac{\tilde{Y} - \tilde{\mathbf{x}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}{s\sqrt{1 + \tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\tilde{\mathbf{x}}^T}} \mid \mathbf{y} \sim t_{n-p}.$$

Entonces, los intervalos predictivos son iguales a los intervalos de predicción clásicos.

**Ejemplo 96** Volviendo a los Ejemplos 91 y 94, sea  $\tilde{Y} = \alpha + \beta \tilde{x} + \tilde{\epsilon}$  una nueva observación.

Entonces  $\tilde{\mathbf{x}} = (1, \tilde{x})$  y

$$\tilde{x}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\tilde{x}^T = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 + n(\bar{x} - \tilde{x})^2}{n\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

Luego se tiene

$$\frac{\tilde{Y} - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}\tilde{x})}{s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(\tilde{x} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}} \sim t_{n-2}$$

y un intervalo predictivo para  $\tilde{Y}$  es igual al intervalo clásico.

## Un modelo lineal más general

En el modelo inicial se ha supuesto que la varianza de  $\epsilon$  es proporcional a la identidad. Ahora sea  $\epsilon|\Sigma\sim\mathcal{N}(0,\Sigma)$  para una matriz de covarianzas más general  $\Sigma$  que implica el modelo

$$\mathbf{Y}|\mathbf{\theta}, \mathbf{\Sigma} \sim \mathcal{N}(\mathbf{X}\mathbf{\theta}, \mathbf{\Sigma})$$
.

Se consideran varias estructuras para la distribución a priori de  $\theta, \Sigma$ .

# Inferencia conjugada con $\Sigma$ conocida: el modelo lineal de dos etapas

Supongamos una distribución a priori normal,  $\theta \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}, \mathbf{V})$  con  $\mathbf{m}$  y  $\mathbf{V}$  conocidos.

Recordamos el Ejemplo 30. Este modelo (Lindley y Smith 1972) se llama *el modelo lineal de 2 etapas*.

Teorema 14 La distribución marginal de Y es

$$\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{Xm}, \mathbf{\Sigma} + \mathbf{XVX}^T
ight)$$

y la distribución a posteriori de heta dado y es

$$m{ heta}|\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}^*, \mathbf{V}^*)$$
 donde

$$\mathbf{V}^* = \left(\mathbf{V}^{-1} + \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right)^{-1}$$

$$\mathbf{m}^* = \mathbf{V}^* \left(\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m}\right)$$

$$= \left(\mathbf{V}^{-1} + \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right)^{-1} \left(\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m}\right)$$

#### Demostración

En primer lugar hallamos la distribución marginal de  $\mathbf{Y}$ . Se tiene

$$Y = X\theta + \epsilon$$

y notando que

$$\mathbf{X}oldsymbol{ heta} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{X}\mathbf{m}, \mathbf{X}\mathbf{V}\mathbf{X}^T
ight)$$

y que la distribución de marginal de  $\mathbf{Y}$  es la distribución de la suma de dos variables normales,  $\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}$  y  $\epsilon$ , entonces se tiene

$$\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{Xm}, \mathbf{XVX}^T + \mathbf{\Sigma}\right)$$
.

Ahora mediante el teorema de Bayes,

$$f(\theta|\mathbf{y}) \propto f(\theta)f(\mathbf{y}|\theta)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\theta - \mathbf{m})^T \mathbf{V}^{-1}(\theta - \mathbf{m})\right)$$

$$\exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta)^T \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta)\right)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\theta^T (\mathbf{V}^{-1} + \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})\theta - 2\theta^T (\mathbf{V}^{-1} \mathbf{m} + \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y})\right]\right)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\theta^T \mathbf{V}^{*-1} \theta - 2\theta^T \mathbf{V}^{*-1} \mathbf{y}^{*-1} \mathbf{y}\right]\right)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\theta^T \mathbf{V}^{*-1} \theta - 2\theta^T \mathbf{V}^{*-1} \mathbf{m}^{*}\right]\right)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\theta - \mathbf{m}^*)^T \mathbf{V}^{*-1}(\theta - \mathbf{m}^*)\right)$$

que es el núcleo de una distribución normal  $\mathcal{N}(\mathbf{m}^*, \mathbf{V})$ .

**Ejemplo 97** Retomando el Ejemplo 90 con observaciones univariables y la distribución a priori  $\theta \sim \mathcal{N}\left(m, \frac{1}{\alpha \phi}\right)$  se tiene

$$\mathbf{X}^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X} = n \phi$$

$$\mathbf{X}^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} = n \phi \overline{y}$$

$$\mathbf{X}^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X} + \mathbf{V}^{-1} = (n + \alpha) \phi$$

$$\mathbf{X}^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m} = n \phi \overline{y} + \alpha \phi m$$

$$m^{*} = \frac{n \overline{y} + \alpha m}{n + \alpha}$$

que es el resultado del Ejemplo 21.

#### Relación con el EMV

El estimador de mínimos cuadrados para este problema es

$$\hat{\theta} = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}$$

y entonces

$$\mathbf{m}^* = \left(\mathbf{V}^{-1} + \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right)^{-1} \left(\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m}\right)$$
$$= \left(\mathbf{V}^{-1} + \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right)^{-1} \left[\left(\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right) \hat{\boldsymbol{\theta}} + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m}\right]$$

y la media a posteriori es una media ponderada de la media a priori  ${\bf m}$  y el EMV  $\hat{\theta}$  con ponderaciones proporcionales a las matrices de precisión.

Observación 58 La media a posteriori de  $\theta$  corresponde en la estadística clásica a un estimador contraído. Se utilizan estimadores de este tipo si la matriz  $\mathbf{X}^T \mathbf{\Upsilon}^{-1} \mathbf{X}$  es casi singular, es decir si hay colinealidad entre los datos.

Ver, por ejemplo, Stein (1956).

**Observación 59** Se puede expresar la media a posteriori de otra manera.

$$\mathbf{m}^* = \mathbf{V}^* \left[ \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{m}) + \left( \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X} + \mathbf{V}^{-1} \right) \mathbf{m} \right]$$
$$= \mathbf{m} + \mathbf{V}^* \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X} \mathbf{m})$$

La cantidad  $\mathbf{y} - \mathbf{Xm}$  es la diferencia entre la observación  $\mathbf{y}$  y su esperanza a priori  $\mathbf{Xm}$ . La cantidad  $\mathbf{V}^*\mathbf{X}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}$  se llama un filtro

**Observación 60** Dejando que  $V^{-1} \rightarrow 0$  en las fórmulas del Teorema 14, proporciona el resultado de utilizar una distribución a priori uniforme para  $\theta$ . En este caso, se tiene

$$\theta | \mathbf{y} \sim \mathcal{N} \left( (\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}, (\mathbf{X}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \right).$$

Suponiendo que  $\Sigma = \frac{1}{\phi} \mathbf{I}$  se tiene el resultado del Teorema 13.

# Resultados suponiendo la varianza $\Sigma$ desconocida

Sea  $\Sigma = \frac{1}{\phi} \Upsilon$  con  $\Upsilon$  conocida.

Dada la distribución a priori no informativa

$$f(\boldsymbol{ heta},\phi)\propto rac{1}{\phi}$$

se tiene el siguiente resultado:

Teorema 15 La distribución a posteriori es

$$egin{aligned} eta|\phi,\mathbf{y} &\sim & \mathcal{N}\left((\mathbf{X}^T\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{y}, rac{1}{\phi}(\mathbf{X}^T\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{X})^{-1}
ight) \\ \phi|\mathbf{y} &\sim & \mathcal{G}\left(rac{n-p}{2}, rac{(n-p)s^2}{2}
ight) & \textit{donde} \end{aligned}$$

$$s^{2} = \frac{1}{n-p} \left( \mathbf{y}^{T} \mathbf{\Upsilon}^{-1} \mathbf{y} - \mathbf{y}^{T} \mathbf{\Upsilon}^{-1} \mathbf{X}^{T} (\mathbf{X}^{T} \mathbf{\Upsilon}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{T} \mathbf{\Upsilon}^{-1} \mathbf{y} \right).$$

#### Demostración

El resultado sigue del Teorema 13.

Sea  $\Upsilon^{-1} = \Psi^T \Psi$  donde  $\Psi$  es la descomposición de Cholesky. Luego, definiendo  $\mathbf{Z} = \Psi \mathbf{Y}$ , se tiene

$$\mathbf{Z}|oldsymbol{ heta}, \phi \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{\Psi}\mathbf{X}oldsymbol{ heta}, rac{1}{\phi}\mathbf{I}
ight).$$

Además, se tiene

$$l(\boldsymbol{\theta}, \phi | \mathbf{z}) \propto l(\boldsymbol{\theta}, \phi | \mathbf{y})$$

y entonces, mediante el Teorema 13, definiendo  $\mathbf{X}^* = \Psi \mathbf{x}$ , se tiene

$$f(\boldsymbol{\theta}, \phi | \mathbf{y}) \propto f(\boldsymbol{\theta}, \phi | \mathbf{z})$$
 $\boldsymbol{\theta} | \phi, \mathbf{z} \sim \mathcal{N}\left( (\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^{*})^{-1}\mathbf{X}^{*T}\mathbf{z}, \frac{1}{\phi}, (\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^{*})^{-1} \right)$ 
 $\phi | \mathbf{z} \sim \mathcal{G}\left( \frac{n-p}{2}, \frac{(n-p)s^{2}}{2} \right)$ 

donde

$$s^{2} = \frac{1}{n-p} \mathbf{z}^{T} \left( \mathbf{I} - \mathbf{X}^{*} (\mathbf{X}^{*T} \mathbf{X}^{*})^{-1} \mathbf{X}^{*T} \right) \mathbf{z}$$
$$= \frac{1}{n-p} \left( \mathbf{z}^{T} \mathbf{z} - \mathbf{z}^{T} \mathbf{X}^{*} (\mathbf{X}^{*T} \mathbf{X}^{*})^{-1} \mathbf{X}^{*T} \mathbf{z} \right).$$

Ahora,

$$(\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^{*}) = \mathbf{X}^{T}\mathbf{\Psi}^{T}\mathbf{\Psi}\mathbf{X}$$

$$= \mathbf{X}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{X}$$

$$\mathbf{X}^{*T}\mathbf{z} = \mathbf{X}^{T}\mathbf{\Psi}^{T}\mathbf{\Psi}\mathbf{y}$$

$$= \mathbf{X}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{y}$$

$$\mathbf{z}^{T}\mathbf{z} = \mathbf{y}^{T}\mathbf{\Psi}^{T}\mathbf{\Psi}\mathbf{y}$$

$$= \mathbf{y}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{y}$$

$$\mathbf{z}^{T}\mathbf{X}^{*}(\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^{*})^{-1}\mathbf{X}^{*T}\mathbf{z} = \mathbf{y}^{T}\mathbf{\Psi}^{T}\mathbf{\Psi}\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{y}$$

$$= \mathbf{y}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{y}\left(\mathbf{X}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{T}\mathbf{\Upsilon}^{-1}\mathbf{y}$$

Observación 61 Es posible extender los análisis al caso en que se utiliza una distribución a priori normal gamma.

En este caso, la distribución a posteriori de  $\theta$  es conjugada y la distribución marginal de  $\theta$  es t multivariante.

**Observación 62** En el caso en lo cuál no se sabe la forma de  $\Sigma$ , se puede utilizar el modelo normal Wishart introducido en el Capítulo 3, por ejemplo

$$egin{array}{lll} \mathbf{Y} | oldsymbol{ heta}, \mathbf{\Sigma} & \sim & \mathcal{N}(\mathbf{X}oldsymbol{ heta}, \mathbf{\Sigma}) \ oldsymbol{ heta} & \sim & \mathcal{N}\left(\mathbf{m}, rac{1}{lpha}\mathbf{\Sigma}
ight) \ oldsymbol{\Sigma} & \sim & \mathcal{WI}(
u, \mathbf{W}) \end{array}$$

La distribución a priori será conjugada. No obstante, su estructura es muy poco razonable en la mayoría de los problemas.

### Métodos Numéricos para Modelos Lineales

En muchos problemas, no se conocen los valores de las matrices de varianza y las distribuciones conjugadas no representan bién las creencias a priora.

**Ejemplo 98** Volvemos al modelo de regresión lineal simple del Ejemplo 91, pero con varianza desconocida

$$f(\phi) \propto \frac{1}{\phi}$$

y una distribución a priori para  $\alpha, \beta$  independiente de  $\phi$ , es decir

$$\left( \begin{array}{c} \alpha \\ \beta \end{array} \right) \sim \mathcal{N} \left( \begin{array}{cc} m_a \\ m_b \end{array}; \left( \begin{array}{cc} v_a & \mathsf{0} \\ \mathsf{0} & v_b \end{array} \right) \right).$$

En este caso, la inferencia no es conjugada pero, se pueden calcular las distribuciones acondicionadas a posteriori:

Sean  $\theta = (\alpha, \beta)^T$  y X como en el Ejemplo 91. Entonces:

$$\phi|\theta, \mathbf{y} \sim \mathcal{G}\left(\frac{n}{2}, \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta)^{T}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta)\right)$$

$$\theta|\phi, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}^{*}, \mathbf{V}^{*}) \quad donde$$

$$\mathbf{V}^{*} = \left(\phi\mathbf{X}^{T}\mathbf{X} + \mathbf{V}^{-1}\right)^{-1}$$

$$\mathbf{m}^{*} = \mathbf{V}^{*}\left(\phi(\mathbf{X}^{T}\mathbf{X})\hat{\theta} + \mathbf{V}^{-1}\mathbf{m}\right)$$

Entonces, es posible definir un algoritmo Gibbs para muestrear la distribución a posteriori conjunta de  $\phi, \alpha, \beta$ .

- 1. t=0. Valores iniciales  $\theta^{(0)}=(\alpha^{(0)},\beta^{(0)})$ ,  $\phi^{(0)}$ .
- 2. Muestrear  $\phi^{(t+1)} \sim \mathcal{G}\left(\frac{n}{2}, \frac{1}{2}(\mathbf{y} \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}^{(t)})^T(\mathbf{y} \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}^{(t)})\right).$
- 3. Sean

a) 
$$\mathbf{V}^{*(t+1)} = \left(\phi^{(t+1)}\mathbf{X}^T\mathbf{X} + \mathbf{V}^{-1}\right)^{-1}$$

b) 
$$\mathbf{m}^{*(t+1)} = \mathbf{V}^{*(t+1)} \left( \phi^{(t+1)} (\mathbf{X}^T \mathbf{X}) \hat{\boldsymbol{\theta}} + \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m} \right).$$

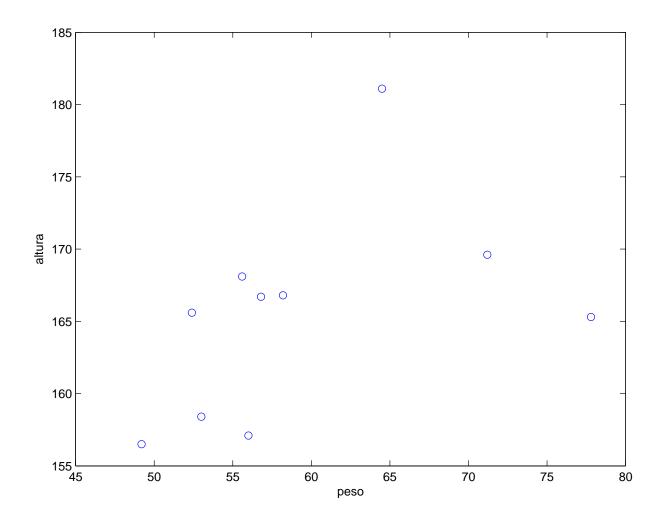
- 4. Muestrear  $oldsymbol{ heta}^{(t+1)} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{m}^{*(t+1)}, \mathbf{V}^{*(t+1)}
  ight)$ .
- 5. t = t + 1
- 6. Ir a 2.

Despues de un tiempo suficiente, los valores muestreados simulan una muestra de la distribución a posteriori de  $\alpha, \beta, \phi | \mathbf{y}$ .

**Ejemplo 99** Se tiene los siguientes datos de peso(x) y altura (y) de 10 personas.

Se ve en el siguiente gráfico que existe una relación positiva entre las dos variables. Supong-amos el modelo lineal

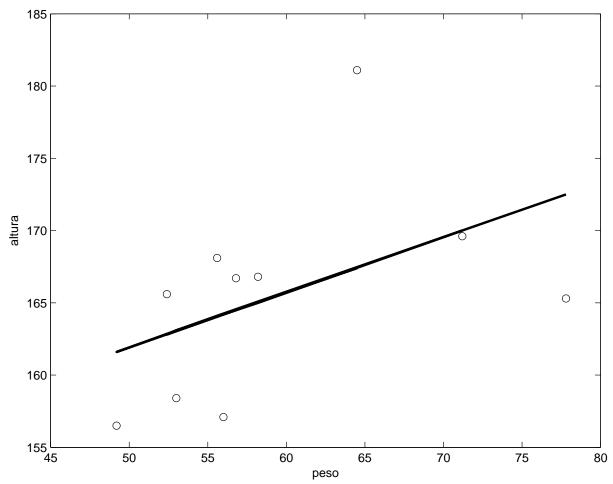
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i$$



Supongamos un modelo con distribuciones independientes (poca informativas) para  $\beta_0$ .  $\beta_1$ y  $\phi$ . Se ve el codigo Winbugs para este modelo en la siguiente transparencia.

```
#----MODEL Definition-----
model {
for(i in 1:N) {
   height[i] ~ dnorm(mu[i],tau)
   mu[i] <- beta0 + beta1* weight[i] }</pre>
beta0 ~ dnorm(0,1.0E-6)
beta1 ~ dnorm(0,1.0E-6)
#----prior 1
tau ~ dgamma(1.0E-3,1.0E-3)
sigma2 <- 1.0/tau
#----prior 2
#tau <- 1.0/(sigma*sigma)</pre>
#sigma ~ dunif(0,1000)
#sigma2 <-
sigma*sigma }
#----Initial values file-----
list(beta0=0, beta1 = 0, tau = 1) #list(beta0 = 0, beta1
=0, sigma= 1)
#----Data File-----
list(N= 10,
height=c(169.6,166.8,157.1,181.1,158.4,165.6,166.7,156.5,168.1,165.3),
weight =c(71.2,58.2,56.0,64.5,53.0,52.4,56.8,49.2,55.6,77.8))
```

Las medias a posteriori de  $\beta_0$  y  $\beta_1$  son 143,1 y 0,377 respectivamente. El siguiente dibujo ilustra la recta ajustada.



### Efectos fijos y aleatorios

Hasta ahora, se ha supuesto que la matriz de diseño  ${\bf X}$  es conocida. Observamos que para hacer inferencia sobre  $\theta$  y  $\Sigma$  , no importa si  ${\bf X}$  es fija o aleatoria ya que

$$f(\theta, \Sigma | X, y) \propto f(y | \theta, \Sigma, X) f(\theta, \Sigma | X)$$
  
  $\propto f(y | \theta, \Sigma, X) f(\theta, \Sigma)$ 

suponiendo que los efectos X no dependen de  $\theta, \Sigma$ .

No obstante, para predicción se debe tomar en cuenta la incertidumbre sobre  $\mathbf{X}$ .

# Comprobación del modelo y selección de variables

- Se puede estimar los residuos  $\mathbf{y} E[\mathbf{Y}|\boldsymbol{\theta}]$  o usar los residuos clásicos. Para otras ideas ver Gelman et al (1995).
- Para selección de variables se pueden usar factores Bayes, o el DIC o el BIC.

## Aplicación 4: El modelo Lanchester de combate

Seguimos el análisis de Wiper et al (2000).

Las ecuaciones de Lanchester (1916) para la guerra moderna entre ejércitos de tamaños x(t) e y(t) son

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\alpha y$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\beta x \tag{1}$$

Estas ecuaciones implican la ley cuadrática de Lanchester:

$$\beta(x(0)^2 - x(t)^2) = \alpha(y(0)^2 - y(t)^2)$$

donde x(0) e y(0) son los tamaños iniciales de los dos ejércitos.

### Un sistema más general

Se ha desarrollada un sistema más completa para otros tipos de guerra.

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\beta x^{\phi_1} y^{\phi_2}$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\alpha y^{\phi_1} x^{\phi_2}$$
(2)

 $\phi = (0,0)$  proporciona una ley lineal (mano-amano),

 $\phi = (0,1)$  es la ley cuadrática (guerra moderna con fuego puntado),

 $\phi = (1,1)$  es una ley lineal (fuego aleatorio),

 $\phi = (1,0)$  es una ley logística (¿guerra de gran escala?).

### Se tiene interés en

- clasificar los tipos de batalla (análisis histórica)
- medir la fuerza relativa de los dos ejércitos (es decir la razón  $\alpha/\beta$ )
- predecir el ganador de la batalla

Pero los modelos son determinísticos.

¿Cómo incluimos la incertidumbre?

### Discretizando el sistema.

Supongamos que se recuerdan las bajas al finalizar cada día. Luego, discretizando las ecuaciones de Lanchester en 2, se tiene

$$\Delta x_t \approx -\beta x_t^{\phi_1} y_t^{\phi_2}$$

$$\Delta y_t \approx -\alpha y_t^{\phi_1} x_t^{\phi_2}$$
(3)

donde  $x_t$  and  $y_t$  son los tamaños de cada ejército al inicio del día y  $\Delta x_t$  y  $\Delta y_t$  son menos las bajas diarias de los dos ejércitos.

### Linealización

Bracken (1995) utilizó el método de mínimos cuadrados para esimar los parámetros de 3 dados los datos de una batalla. Pero existen muchos problemas debidos a la no linealidad del sistema.

Tomando logarítmos en 3 y introduciendo un error tenemos un modelo lineal.

$$\mathbf{z}_t = \theta + \mathbf{P}_t \phi + \epsilon_t$$

donde  $\mathbf{z}_t$  son los logarítmos de las bajas en día t,  $\mathbf{P}_t = \begin{pmatrix} \log y_t & \log x_t \\ \log x_t & \log y_t \end{pmatrix}$  y  $\phi = (\phi_1, \phi_2)^T$ .

(Para paliar los problemas de colinealidad, también se transforma  ${f P}_t o {f P}_t - {f ar P}).$ 

Supongamos errores normales  $\epsilon_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{V})$  y ajustamos el modelo mediante el enfoque bayesiano.

¿Porqué bayesiano?

- mucha información a priori
- estimadores clásicas inestables por los problemas de colinealidad
- fáciles de ajustar

Dadas las distribuciones a priori  $(\theta, \phi \sim \mathcal{N}(\cdot, \cdot), \mathbf{V}^{-1} \sim \text{Wishart inversa})$  se usa el muestreo Gibbs para muestrear las distribuciones a posteriori.

## Ejemplo: la campaña de las Árdenas

- Datos de 32 días de la campaña
- Una batalla de muy grande escala
- fuerzas son una medida compuesta (soldados, cañones, tanques)
- los alemanes atacaron durante los primeros cinco días y luego cambió el rumbo de la batalla y los americanos empezaron a ganar la batalla.

El ajuste del modelo básico no es adecuado. Hay una gran diferencia entre las dos partes de la batalla. Se mejora el ajuste incluyendo un nuevo parámetro  $(\delta)$ , donde el modelo nuevo es

$$\mathbf{z}_t = \theta + \mathbf{P}_t \phi + \delta I_t + \epsilon_t$$

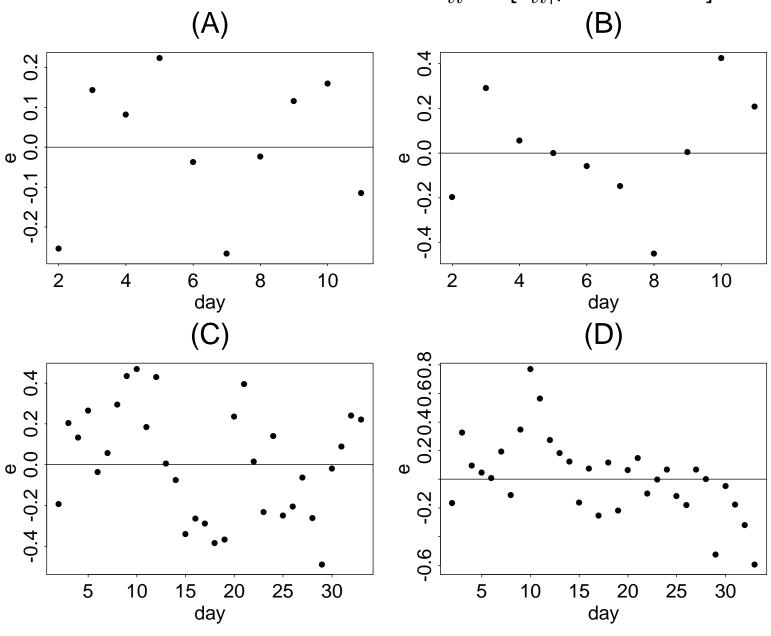
donde  $I_t$  es una función indicatriz del ejército atacante en el día t.

La tabla muestra las estimaciones a posteriori de los parámetros.

Parametro Media (Desviación típica)  $\theta$  7,88 (,09) 8,04 (,08)  $\phi$  0,84 (,41) 0,27 (,40)  $\delta$  -0,38 (,09) -0,01 (,09)

## Errores estimados del ajuste

Se estiman los errores con  $z_{ti}-E[z_{ti}|$  parámetros].



## Conclusiones para esta batalla

- 1. Pocas diferencias en ajuste para varios modelos Lanchester (factores Bayes aprox. 1).
- 2. Menos bajas americanas en los días en que atacaron.
- 3. Pocas diferencias en las fuerzas.
- 4. Evidencia de falta de ajuste para los alemanes. (¿Efectos de desmoralización?).
- 5. Distribuciones a posteriori muy robustas a cambios en las a priori de  $\theta$ ,  $\delta$ , bastante robustas a  $\phi$ , y menos robustas a cambios en  $\mathbf{V}$ .
- Modelos estocásticos pueden funcionar mejor.
   Ver Pettit et al (2003).