Modelos Lineares II

PROFESSOR: RAFAEL ERBISTI

> O modelo de regressão logística mais geral assume

$$logit(\pi_i) = log\left(\frac{\pi_i}{1 - \pi_i}\right) = \mathbf{x}_i^T \boldsymbol{\beta}$$

onde x_i é o vetor de variáveis contínuas correspondendo a covariáveis ou variáveis dummy, e β é o vetor paramétrico.

Esse modelo é amplamente usado para analisar dados envolvendo respostas binárias ou binomiais.

> Os dados podem ser agrupados como frequências para cada padrão de covariável (isto é, observações com os mesmos valores de todas as variáveis explicativas).

> Ou ainda, cada observação pode ser codificada 0 ou 1 e seu padrão de covariável ser listado separadamente.

O processo de estimação é essencialmente o mesmo em ambos os casos.

- \succ Se os dados podem ser agrupados, a resposta Y_i , o número de sucessos para o padrão de covariável i, pode ser modelado pela distribuição binomial.
- \succ Se cada observação tem um padrão de covariável diferente, então $n_i=1$ e a resposta Y_i é binária.

Exemplo: Suponha que testes clínicos sejam realizados para comparar a eficiência de um novo procedimento cirúrgico frente a uma técnica já conhecida. Os testes foram realizados em 2 hospitais ($x_1 = 1, 2$). Em cada hospital, os pacientes foram distribuídos aleatoriamente para serem submetidos a 2 procedimentos cirúrgicos ($x_2 = 1, 2$).

No primeiro mês de estudo, sete pacientes foram recrutados. Estes pacientes são listados na tabela abaixo pelo seu número de identificação e pelas classes de covariáveis.

Dados listados pelo nº do paciente			Dados listados pela classe da covariável		
Paciente nº	Covariável (x_1, x_2)	Resposta(Y)	Covariável (x_1, x_2)	Tamanho(n)	Resposta(Y)
1	1,1	0	1,1	2	1
2	1,2	1	1,2	3	2
3	1,2	0	2,1	1	0
4	2,1	0	2,2	1	1
5	2,2	1			
6	1,2	1			
7	1,1	1			

- Os dados listados pelo padrão da covariável crescem em eficiência a medida que o número de pacientes aumenta.
- Nesse caso, as respostas tem a forma y_i/n_i onde $0 < y_i < n_i$ é o número de sucessos em n_i indivíduos no i-ésimo subgrupo (padrão, classe).
- ightharpoonup Dados não agrupados podem ser considerados casos especiais em que $n_1=n_2=\cdots=n_N=1$.
- > O único problema em agrupar acontece se a ordem em que as observações aparecem for relevante.

ightharpoonup O estimador de máxima verossimilhança do parâmetro $m{\beta}$, e consequentemente das probabilidades $\pi_i = g^{-1}({m{x}}_i^T {m{\beta}})$, são obtidas maximizando a função de logverossimilhança

$$l(\boldsymbol{\pi}; \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i \log \pi_i + (n_i - y_i) \log(1 - \pi_i) + \log \binom{n_i}{y_i} \right]$$

usando o método escore iterativo.

> A deviance,

$$D = 2\sum_{i=1}^{N} \left[y_i \log \left(\frac{y_i}{\hat{y}_i} \right) + (n_i - y_i) \log \left(\frac{n_i - y_i}{n_i - \hat{y}_i} \right) \right]$$

E que pode ser escrita como

$$D = 2\sum_{i=0}^{\infty} o\log\frac{o}{e}$$

onde

o: frequências observadas y_i e (n_i-y_i) das células da tabela de observações

e: frequências esperadas estimadas ou os valores ajustados $\hat{y}_i = n_i \hat{\pi}_i$ e $(n_i - \hat{y}_i) = (n_i - n_i \hat{\pi}_i)$.

 \triangleright O somatório é realizado em todas as $2 \times N$ células da tabela de observações.

Note que a deviance do modelo logístico não depende de parâmetro de ruído (σ^2 como no modelo normal).

A bondade de ajuste pode ser avaliada e hipóteses podem ser testadas usando diretamente a aproximação

$$D \sim \chi^2(N-p)$$

onde p é o número de parâmetros estimados e N o número de padrões de covariável.

> Os métodos de estimação e as distribuições amostrais usadas para inferência dependem de resultados assintóticos.

Para estudos pequenos ou situações onde existem poucas observações para cada padrão de covariável, os resultados assintóticos podem ser não muito adequados.

A. Ao invés de usar o EMV poderíamos utilizar mínimos quadrados ponderados (estimando os parâmetros minimizando a soma ponderada dos quadrados)

$$S_{w} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_{i} - n_{i}\pi_{i})^{2}}{n_{i}\pi_{i}(1 - \pi_{i})}$$

já que $E(Y_i) = n_i \pi_i$ e $Var(Y_i) = n_i \pi_i (1 - \pi_i)$.

> Isto é, equivalente a minimizar a estatística de qui-quadrado de Pearson

$$X^2 = \sum \frac{(o-e)^2}{e},$$

onde a soma é feita sob as 2N células da tabela de observações.

O motivo dessa equivalência é que:

$$X^{2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_{i} - n_{i}\pi_{i})^{2}}{n_{i}\pi_{i}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{[(n_{i} - y_{i}) - n_{i}(1 - \pi_{i})]^{2}}{n_{i}(1 - \pi_{i})}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - n_i \pi_i)^2}{n_i \pi_i (1 - \pi_i)} (1 - \pi_i + \pi_i) = S_w$$

 \geq Quando X^2 é avaliada nas frequências estimadas, a estatística é dada por

$$X^{2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_{i} - n_{i}\hat{\pi}_{i})^{2}}{n_{i}\hat{\pi}_{i}(1 - \hat{\pi}_{i})}$$

que é assintoticamente equivalente à deviance

$$D = 2\sum_{i=1}^{N} \left[y_i \log \left(\frac{y_i}{n_i \hat{\pi}_i} \right) + (n_i - y_i) \log \left(\frac{n_i - y_i}{n_i - n_i \hat{\pi}_i} \right) \right].$$

A demonstração utiliza expansão em série de Taylor de $s \log(s/t)$ em torno de s, isto é:

$$s \log \frac{s}{t} = (s - t) + \frac{1}{2} \frac{(s - t)^2}{t} + \cdots$$

Sob a hipótese de que o modelo é correto, tem-se, assintoticamente, que $D \sim \chi^2_{N-p}$ e, portanto, $X^2 \sim \chi^2_{N-p}$.

A escolha entre D e X^2 depende da adequabilidade da aproximação à distribuição $\chi^2(N-p)$.

 \triangleright Há evidências que sugerem que, em geral, X^2 é melhor do que D, uma vez que D é influenciada por valores pequenos das frequências.

Todas as aproximações tendem a ser pobres, se as frequências esperadas são muito pequenas.

B. Algumas vezes utiliza-se a comparação entre função de log-verossimilhança do modelo ajustado e um modelo mínimo (nulo), para o qual $\pi_i = \pi$, $\forall i$.

 \geq Sob o modelo nulo tem-se: $\tilde{\pi} = (\sum y_i)/(\sum n_i)$.

 \geq Seja $\hat{\pi}_i$ a probabilidade estimada de Y_i sob o modelo de interesse $(\hat{y}_i = n_i \hat{\pi}_i)$.

> A estatística é definida por

$$C = 2[l(\widehat{\boldsymbol{\pi}}; \boldsymbol{y}) - l(\widetilde{\boldsymbol{\pi}}, \boldsymbol{y})]$$

onde l é a função log-verossimilhança.

> Assim,

$$C = 2 \sum \left[y_i \log \left(\frac{\hat{y}_i}{n_i \tilde{\pi}_i} \right) + (n_i - y_i) \log \left(\frac{n_i - \hat{y}_i}{n_i - n_i \tilde{\pi}_i} \right) \right].$$

A distribuição amostral de C é, aproximadamente, $\chi^2(p-1)$ se todos os p parâmetros, exceto o intercepto, são iguais a zero (caso contrário, C terá uma distribuição não-central).

 \succ Portanto, C é uma estatística de teste para a hipótese de que nenhuma das variáveis é necessária.

 $\succ C$ é chama de estatística de qui-quadrado da razão de verossimilhanças.

C. Em analogia ao \mathbb{R}^2 para o caso de regressão múltipla, outra estatística utilizada é

pseudo
$$R^2 = \frac{l(\widetilde{\boldsymbol{\pi}}; \boldsymbol{y}) - l(\widehat{\boldsymbol{\pi}}; \boldsymbol{y})}{l(\widetilde{\boldsymbol{\pi}}; \boldsymbol{y})}$$

que representa ganhos proporcionais na função log-verossimilhança devido aos termos do modelo de interesse, quando comparado ao modelo nulo.

D. O Critério de Informação de Akaike (AIC) e o Critério de Informação Bayesiano (BIC) são outras estatísticas de qualidade de ajuste baseadas na função verossimilhança, com penalização para o número de parâmetros estimados e para a quantidade de dados:

$$AIC = -2l(\widehat{\boldsymbol{\pi}}; \boldsymbol{y}) + 2p$$
$$BIC = -2l(\widehat{\boldsymbol{\pi}}; \boldsymbol{y}) + p \log(n)$$

onde p é o número de parâmetros estimados e n o total de observações.

- As questões estudadas na análise dos resíduos dos modelos de regressão múltipla para resposta contínua também são relevantes no contexto de respostas binárias:
 - Inclusão ou exclusão de covariáveis
 - Análise gráfica dos resíduos. Existem duas formas principais de resíduos correspondendo às medidas de bondade de ajuste D e X^2 . Se existem m diferentes níveis de covariáveis, então podemos calcular m resíduos.

- \succ Seja Y_k o número de sucessos, n_k o número de ensaios e $\hat{\pi}_k$ a probabilidade de sucesso estimada para o k-ésimo nível (padrão) de covariável.
- O resíduo de Pearson ou qui-quadrado é definido como

$$X_k = \frac{(y_k - n_k \hat{\pi}_k)}{\sqrt{n_k \hat{\pi}_k (1 - \hat{\pi}_k)}}, \qquad k = 1, ..., m$$

onde $\sum_{k=1}^m X_k^2 = X^2$, que é a estatística de qui-quadrado de Pearson da bondade de ajuste.

Os resíduos de Pearson padronizados são

$$r_{Pk} = \frac{X_k}{\sqrt{1 - h_{kk}}}$$

onde h_{kk} mede o grau de influência da observação no ajuste do modelo (leverage), e é obtido por meio do k-ésimo elemento da diagonal da matriz H.

- Um segundo tipo de resíduo é o resíduo da deviance
- \succ O valor total da deviance pode ser escrito na forma $D=\sum_{k=1}^m d_k^2$ em que cada componente individual é dada por

$$d_k = sign(y_k - n_k \hat{\pi}_k) \left\{ 2 \left[y_k \log \left(\frac{y_k}{n_k \hat{\pi}_k} \right) + (n_k - y_k) \log \left(\frac{n_k - y_k}{n_k - n_k \hat{\pi}_k} \right) \right] \right\}^{1/2}$$

onde o termo $sign(y_k - n_k \hat{\pi}_k)$ garante que d_k tenha o mesmo sinal de X_k .

> Os resíduos padronizados baseados na deviance são definidos por

$$r_{Dk} = \frac{d_k}{\sqrt{1 - h_{kk}}}.$$

- As análises de resíduos em MLG devem ser conduzidas da mesma maneira que em modelos lineares normais.
- \succ Se os dados são binários, ou se n_i é pequeno para a maioria dos níveis das covariáveis, então haverá poucos valores distintos dos resíduos e os gráficos serão pouco informativos.
- \nearrow Neste caso, será necessário confiar na estatística agregada da bondade de ajuste X^2 e D, e outros diagnósticos.

> Sobredispersão ou variação extra-binomial é um fenômeno comum que ocorre na modelagem de dados binários agrupados.

> Sua ocorrência é caracterizada quando a variação observada excede aquela assumida pelo modelo.

 \triangleright Ou seja, observações Y_i que são assumidas seguir uma distribuição binomial podem apresentar variância maior do que $n_i\pi_i(1-\pi_i)$.

 \triangleright Uma abordagem é incluir um parâmetro extra, ϕ , de modo que

$$Var(Y_i) = \phi \ n_i \pi_i (1 - \pi_i)$$

- Se $\phi = 1$ temos variabilidade binomial.
- Se $\phi > 1$ temos extra variabilidade.
- Pode haver indícios de sobredispersão quando as estatísticas de qualidade de ajuste (deviance e X^2 de Pearson) são grandes em relação aos seus graus de liberdade, (N-p).

- Entretanto, deve-se lembrar que alguns pontos aberrantes podem aumentar substancialmente o valor do desvio e a "simples eliminação desses pontos pode reduzir as evidências de sobredispersão".
- Para investigar o efeito de observações influentes as estatísticas delta-beta, delta-qui-quadrado e delta-deviance também estão disponíveis para regressão logística.
- > A sobredispersão tem duas causas possíveis:
 - um modelo especificado incorretamente: seriam necessários no modelo mais termos, tais como interações ou termos quadráticos;
 - falta de independência das observações.

 \triangleright O parâmetro ϕ pode ser estimado com base na estatística de Pearson ou na deviance, respectivamente por:

$$\tilde{\phi} = \frac{X^2}{N - p} = \frac{1}{N - p} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - \hat{\mu}_i}{\sqrt{\widehat{Var}(y_i)}} \right)^2$$

$$\tilde{\phi} = \frac{D}{N - p} = \frac{1}{N - p} \sum_{i=1}^{N} d_i^2$$

onde N-p é o total de graus de liberdade.

 \succ Na prática, multiplicamos a raiz quadrada de $\tilde{\phi}$ pelos desvios-padrão estimados dos β 's para construir intervalos de confiança e fazer testes de hipóteses.

Conceito de chance

- > Uma forma natural de quantificar as chances de um evento é utilizando probabilidades.
- > Outra forma de fazer isso é a partir da razão de probabilidades.
- \triangleright Se A e B são eventos tais que $A \cap B = \emptyset$ e $A \cup B = \Omega$, a razão de probabilidades

$$\frac{P(A)}{P(B)} = \frac{P(A)}{1 - P(A)}$$

é denominada de chances (odds) do evento A relativo ao evento B.

Conceito de chance

 \nearrow As chances do evento A também pode ser calculada como a razão entre o número de vezes que A ocorre sobre o número de vezes que ele não ocorre.

Exemplo: Uma chance de 4 significa que esperamos que ocorrências sejam 4 vezes as não ocorrências do evento.

Exemplo: A probabilidade de nascimento de um indivíduo do sexo masculino é cerca de 0,515. Então a chance desse evento é 0,515/0,485=1,062. A chance em favor do nascimento de um indivíduo do sexo masculino é 106 para 100 ou 106 nascimentos masculinos para 100 femininos.

> O modelo logístico pressupõe que o logaritmo da chance é linearmente relacionado com as variáveis explicativas.

 \succ Considere inicialmente o modelo logístico linear simples em que $\pi(x)$, a probabilidade de "sucesso" dado o valor x de uma variável explicativa qualquer, é definida tal que

$$\ln\left(\frac{\pi(x)}{1-\pi(x)}\right) = \beta_0 + \beta_1 x,$$

em que β_0 e β_1 são parâmetros desconhecidos.

Esse modelo poderia, por exemplo, ser aplicado para analisar a associação entre uma determinada doença e a ocorrência ou não de um fator particular.

- Seriam então amostrados, independentemente, n_1 indivíduos com presença do fator (x=1) e n_2 indivíduos com ausência do fator (x=0) e $\pi(x)$ seria a probabilidade de desenvolvimento da doença após um certo período fixo.
- Dessa forma, a chance de desenvolvimento da doença para um indivíduo com presença do fator fica dada por

$$\frac{\pi(1)}{1 - \pi(1)} = \exp(\beta_0 + \beta_1),$$

enquanto que a chance de desenvolvimento da doença para um indivíduo com ausência do fator é simplesmente

$$\frac{\pi(0)}{1-\pi(0)} = \exp(\beta_0).$$

Logo, a razão de chances fica dada por

$$\psi = \frac{\pi(1)}{\pi(0)} / \frac{(1 - \pi(1))}{\pi(0)} = \frac{\pi(1)\{1 - \pi(0)\}}{\pi(0)\{1 - \pi(1)\}} = \exp(\beta_1)$$

dependendo apenas do parâmetro β_1 .

> Uma das grandes vantagens da regressão logística é a possibilidade de interpretação direta dos coeficientes como medidas de associação.

Exemplo: Suponha que a variável resposta corresponda ao uso de anticoncepcional e estamos interessados na razão do número esperado de usuários para cada não usuário (chance). Como variável explicativa temos um fator com dois níveis: urbano (1) e rural (0). Suponha que as chances em favor do uso sejam de 4 para 1 em áreas urbanas e de 2 para 1 em áreas rurais.

- Então a razão de chances nas áreas urbanas para as chances em áreas rurais é 2.
- Neste caso, o número esperado de usuários para cada não usuário em áreas urbanas é duas vezes que em áreas rurais.
- \geq Em termos de porcentagem: o número esperado de usuários para cada não usuário é 100% maior em áreas urbanas comparado às áreas rurais.

> O modelo nesse caso é:

$$\ln\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right) = \beta_0 + \beta_1 x \,,$$

onde x = 1, se urbana e x = 0, se rural.

- > Para $x = 1 \Rightarrow \frac{\pi_1}{1 \pi_1} = \exp(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1) = 4$
- > Para $x=0 \Rightarrow \frac{\pi_0}{1-\pi_0} = \exp(\hat{\beta}_0) = 2$
- Então $\left(\frac{\pi_1}{1-\pi_1}\right)/\left(\frac{\pi_0}{1-\pi_0}\right) = \exp(\hat{\beta}_1) = \frac{4}{2} = 2$ (a chance em áreas urbanas é 2 vezes a chance em áreas rurais quando comparamos usuários e não usuários).

No caso em que a razão de chances resulta em um número menor que 1 a interpretação pode ser feita da seguinte forma:

> Suponha que no exemplo a razão de chances resulte em 0.2, então, a chance em áreas rurais é 5 vezes a chance em áreas urbanas quando comparamos usuários e não usuários de anticoncepcional.

Ou ainda, em termos de porcentagem, o número esperado de usuários para cada não usuário é 80% menor em áreas urbanas comparado às áreas rurais. (a chance em áreas urbanas é 80% menor do que em áreas rurais).

Exemplo: Estudo para avaliar o efeito de taxa e volume de ar que uma pessoa inspira na probabilidade de ocorrência de um acidente vascular.

Resposta igual a 1 - sucesso, ocorrência do evento

Resposta igual a 0 - fracasso, não ocorrência do evento

Neste caso, os dados aparecem não agrupados e as variáveis explicativas foram medidas em escala contínua.

O modelo a ser ajustado é da forma:

$$\ln\left(\frac{\pi_i}{1-\pi_i}\right) = \beta_0 + \beta_1 tax a_i + \beta_2 volume_i$$

onde π_i é a probabilidade de que o *i*-ésimo indivíduo sofra um acidente vascular.

```
> summary(modelo1)
Call: glm(formula = resposta ~ taxa + volume, family
=binomial(link = "logit"), data = resp)
Coefficients:
                          Std. Error
                                       z value Pr(>|z|)
              Estimate
               -9.5296
                             3.2332 -2.947 0.00320 **
 (Intercept)
             2.6491
                             0.9142 2.898 0.00376 **
 taxa
            3.8822
                             1.4286
                                         2.717 0.00658 **
volume
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
   Null deviance: 54.040 on 38 degrees of freedom
Residual deviance: 29.772 on 36 degrees of freedom AIC: 35.772
Number of Fisher Scoring iterations: 6
```

> anova(modelo1)
Analysis of Deviance Table

Model: binomial, link: logit

Response: resposta

Terms added sequentially (first to last)

	Df	Deviance Resid.	Df	Resid. Dev
NULL			38	54.040
taxa	1	4.385	37	49.655
volume	1	19.883	36	29.772

 \triangleright A chance estimada do *i*-ésimo indivíduo sofrer um acidente vascular é dada por

$$\left(\frac{\hat{\pi}_i}{1-\hat{\pi}_i}\right) = \exp(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 tax a_i + \hat{\beta}_2 volume_i)$$

> A chance estimada do terceiro indivíduo sofrer um acidente vascular é

$$\left(\frac{\hat{\pi}_3}{1-\hat{\pi}_3}\right) = \exp\{-9,530+2,649(2,5)+3,882(1,25)\} = 6,994$$

Assim, para uma pessoa que tem taxa de ar inspirado igual a 2,5 e volume igual
 1,25 a ocorrência de um acidente vascular é de aproximadamente 7 para 1.

Vamos observar o que ocorre quando variamos a taxa em uma unidade e mantemos o volume de ar constante:

$$\left(\frac{\hat{\pi}_i/1 - \hat{\pi}_i}{\hat{\pi}_j/1 - \hat{\pi}_j}\right) = \frac{\exp\{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1(taxa + 1) + \hat{\beta}_2volume_i\}}{\exp\{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1taxa + \hat{\beta}_2volume_i\}} = \exp(\hat{\beta}_1)$$

Então, para cada unidade acrescida na taxa de ar inspirado, mantendo-se o volume constante, a razão de chances aumenta em

$$\exp(\hat{\beta}_1) = \exp(2,649) = 14,14$$

De forma análoga, para um aumento de uma unidade do volume de ar inspirado, mantendo-se a taxa constante, a razão de chances aumenta em

$$\exp(\hat{\beta}_2) = \exp(3.882) = 48.52.$$

- Como ambos coeficientes estimados são positivos, tem-se que aumentos nas variáveis, implicam em aumentos na chance de ocorrência do evento.
- Verifique que, pela simetria da função logística, se tivéssemos modelado o evento complementar não ocorrência do acidente vascular, obteríamos os coeficientes com sinais trocados, mas a estatística Deviance permaneceria igual.

Considere o modelo

$$Y_i \sim Bin(n_i, \pi_i)$$

$$\ln\left(\frac{\pi_i}{1 - \pi_i}\right) = \beta_0 + \beta_1 x$$

onde x é um fator em que se x=0, ausência do fator, se x=1 presença do fator.

 \triangleright Usualmente, é mais fácil interpretar os efeitos das variáveis explicativas em termos das razões de chances do que olhar para os parâmetros β .

Baseado no modelo, podemos obter o quanto as chances aumentam na presença do fator. Então as chances são:

$$\frac{\pi(0)}{1-\pi(0)} = \exp(\beta_0)$$

quando x = 0 indicando que o fator está ausente, e

$$\frac{\pi(1)}{1-\pi(1)} = \exp(\beta_0 + \beta_1)$$

quando x = 1 indicando que o fator está presente.

Portanto,

$$\psi = \frac{\frac{\pi(1)}{1 - \pi(1)}}{\frac{\pi(0)}{1 - \pi(0)}} = \exp(\beta_1)$$

- > Se $\beta_1=0$ então $\psi=1$, o que corresponde um "não efeito" da presença do fator.
- > Denotando a razão de chances por ψ_j , no modelo de regressão logística, temos $\psi_j = \exp(eta_j)$

e podemos estimá-lo por $\exp(\hat{\beta}_i)$.

> Assim o intervalo de confiança assintótico para ψ_j com nível de confiança 100(1-lpha)% terá limites

$$\exp\left(\hat{\beta}_j \pm z_{1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{Var(\hat{\beta}_j)}\right)$$

 \geq Por exemplo, intervalos de 95% de confiança para ψ_i são calculados através de

$$\exp\left(\hat{\beta}_j \pm 1.96\sqrt{Var(\hat{\beta}_j)}\right)$$

 \nearrow Intervalos que não incluem a unidade correspondem a valores de β significativamente diferentes de zero.