ME613 - Análise de Regressão

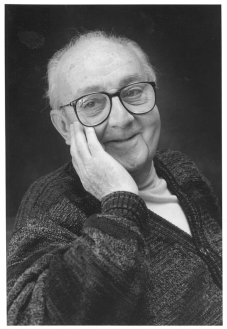
Parte 3

Samara F. Kiihl - IMECC - UNICAMP

Diagnóstico do Modelo

George Box

"All models are wrong but some are useful."



By DavidMCEddy at en.wikipedia, CC BY-SA 3.0

Introdução

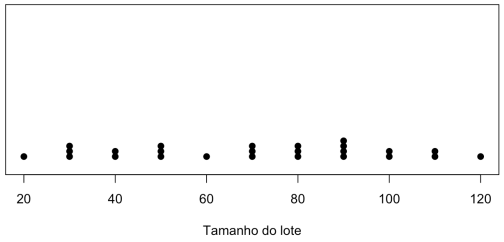
Como saber se a função de regressão é adequada para explicar a relação entre as variáveis observadas?

- Gráficos
- Testes

Caso a função de regressão não seja adequada, o que fazer?

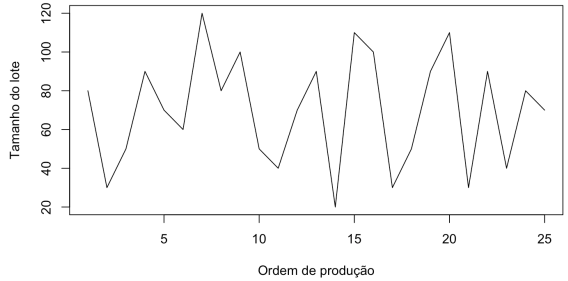
- Transformação de variáveis.
- Outro tipo de modelo.

Diagnósticos para a variável preditora



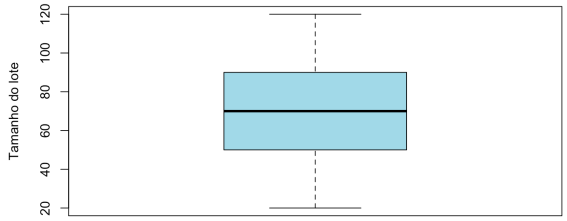
- Quantas observações em cada valor diferente de X?
- Amplitude dos valores de X.

Diagnósticos para a variável preditora



Se as observações são feitas ao longo do tempo, há correlação entre seus valores e o tempo de observação?

Diagnósticos para a variável preditora



Resíduos

Gráficos de diagnósticos para Y não são úteis em análise de regressão, pois a variável resposta é uma função da preditora.

Os gráficos de diagnósticos são feitos para os resíduos.

- Resíduos:

$$e_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

- Erros:

$$\varepsilon_i = Y_i - E(Y_i)$$

Se assumimos $\varepsilon_i \underset{iid}{\sim} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, esperamos que e_i's, os resíduos observados, reflitam as propriedades assumidas para ε_i's.

Propriedades dos resíduos

- Média dos resíduos:

$$\bar{e} = \frac{\sum_{i=1}^{n} e_i}{n} = 0$$

Como $\bar{e}$ é sempre nula, não fornece informação sobre $E(\varepsilon_i)$.

- Variância dos resíduos:

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (e_i - \bar{e})^2}{n-2} = \frac{SQErro}{n-2} = QMErro$$

Se o modelo é apropriado, s^2 é um estimador não viesado para σ^2.

Propriedades dos resíduos

- Independência: e_i's **não são variáveis aleatórias independentes**, pois dependem de $\hat{Y}_i$, que por sua vez dependem das mesmas estimativas para os parâmetros β_0 e β_1.

Quanto maior o número de observações com relação ao número de parâmetros estimados, menor é a dependência dos resíduos (pode ser ignorada).

Resíduos semi-studentizados

Para detectar outliers, muitas vezes é mais útil observar resíduos padronizados.

Resíduo semi-studentizado:

$$e_i^* = \frac{e_i}{\sqrt{QME}}$$

Suposições do modelo estudadas através da análise de resíduos

Podemos utilizar análise de resíduos para verificar se:

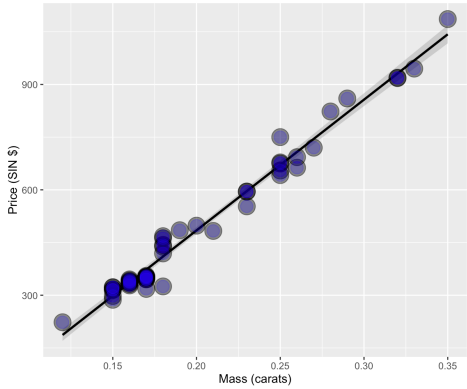
1. a função de regressão não é linear
2. erros não possuem variância constante (heterocedasticidade)
3. erros não são independentes
4. o modelo ajustado é adequado, com exceção de algumas observações outliers
5. erros não seguem distribuição normal
6. uma ou mais variáveis preditoras foram omitidas no modelo

Análise de Resíduos: gráficos

- Resíduos x Variável preditora
- Resíduos absolutos x Variável preditora
- Resíduos x Valores ajustados ($\hat{Y}$)
- Resíduos ao longo do tempo/em sequência
- Resíduos X Variável preditora não incluída no modelo
- Boxplot dos resíduos
- Gráfico de probabilidade normal dos resíduos

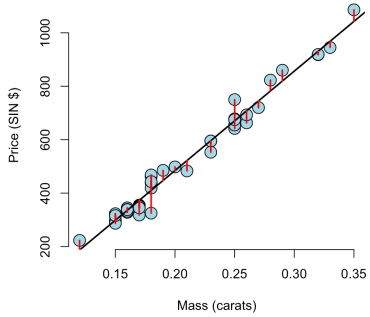
Exemplo: Preço do diamante

Preços de diamantes (dólares de Singapura) e peso em quilates (1 quilate = 0.2g).



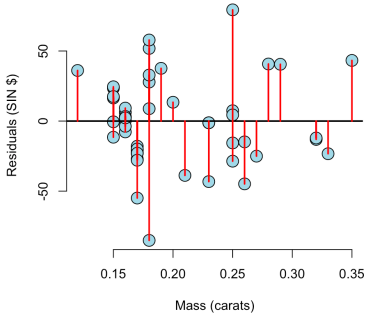
Exemplo: Preço do diamante

Resíduos: comprimento das linhas vermelhas, mantendo o sinal.



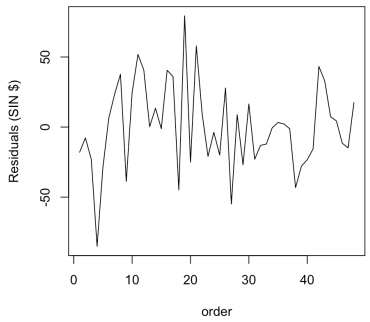
Exemplo: Preço do diamante

Resíduos X Variável preditora



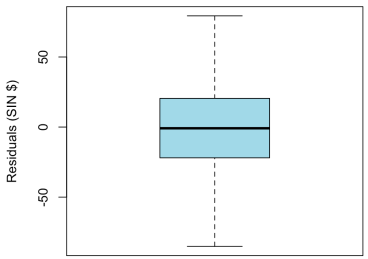
Exemplo: Preço do diamante

Resíduos X ordem



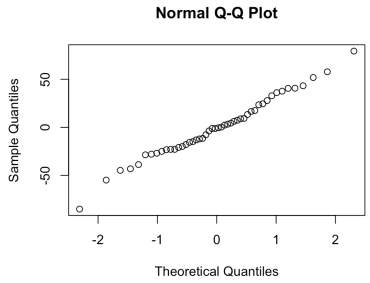
Exemplo: Preço do diamante

Boxplot dos resíduos



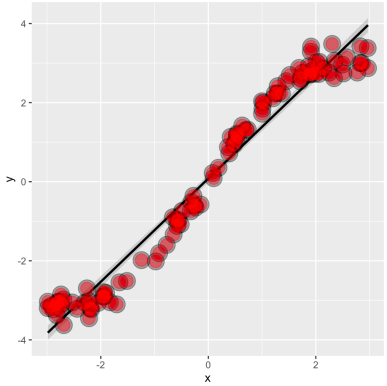
Exemplo: Preço do diamante

Gráfico de normalidade dos resíduos



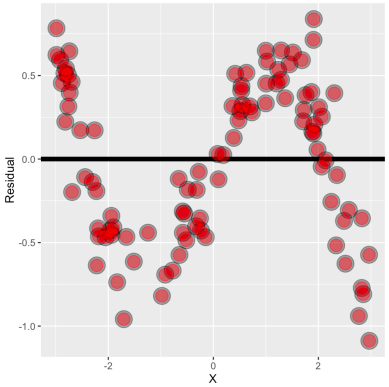
(ver Kutner pag 110)

Exemplo: não-linearidade

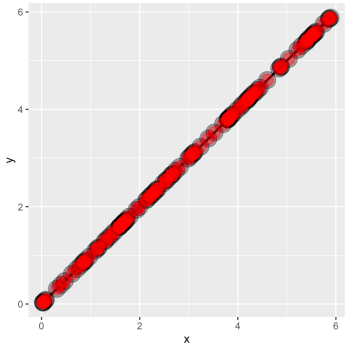


Exemplo: não-linearidade

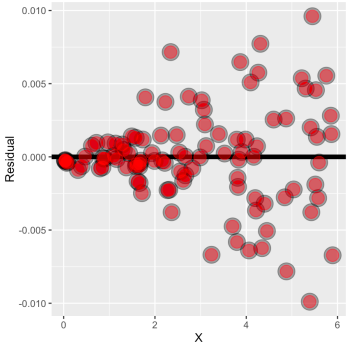
Resíduos X Variável preditora



Exemplo: heterocedasticidade



Exemplo: heterocedasticidade



Análise de Resíduos: testes de hipóteses

Além de gráficos, podemos também utilizar testes de hipóteses estatísticos para avaliar algumas suposições do modelo.

Teste de correlação para normalidade

Calcular coeficiente de correlação entre e_i e seus valores esperados, segundo a distribuição normal

Quanto maior a correlação, maior o indício de normalidade dos resíduos.

Detalhes sobre o teste: Looney & Gulledge (1985) - Use of the Correlation Coefficient with Normal Probability Plots

Teste de correlação para normalidade

Calcular a correlação entre os resíduos ordenados e

$$r = \{r_1, r_2, \ldots, r_k \ldots, r_n\}$$

em que r_k é o valor esperado do k-ésimo resíduos, segundo a suposição de normalidades.

$$r_k \approx \sqrt{QME}\left[z\left(\frac{k-0.375}{n+0.25}\right)\right]$$

$z(A)$ é o $A \times 100$ percentil da distribuição normal padrão.

Obs: Outro teste conhecido: Teste de Shapiro-Wilks.

Teste de homocedasticidade: Brown-Forsythe

- Não depende da suposição de normalidade
- Aplicável no caso de regressão linear simples quando a variância do erro aumenta ou decresce com a variável preditora X.
- Tamanho amostral grande o suficiente para que possamos assumir que os resíduos são independentes.
- Idéia parecida com um teste-t para duas amostras.

Teste de homocedasticidade: Brown-Forsythe

- X é dividida em X_1 (valores mais baixos de X) e X_2 (valores mais altos de X). Isto é, temos dois grupos.
- e_{i1} é o i-ésimo resíduo para o grupo 1 e e_{i2} é o i-ésimo resíduo para o grupo 2.
- n_j é o número de observações no grupo j
- $n = n_1 + n_2$.
- $\tilde{e}_j$ é a mediana dos resíduos do grupo j.
- $d_{i1} = |e_{i1} - \tilde{e}_1|$ $\quad$ $d_{i2} = |e_{i2} - \tilde{e}_2|$

Teste de homocedasticidade: Brown-Forsythe

Estatística do teste:

$$t^*_{BF} = \frac{\bar{d}_1 - \bar{d}_2}{s\sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}}$$

$$s^2 = \frac{\sum(d_{i1} - \bar{d}_1)^2 + \sum(d_{i2} - \bar{d}_2)^2}{n-2}$$

Se a variância é constante e n_1 e n_2 grandes o suficiente, então t^*_{BF} segue distribuição t com $n-2$ graus de liberdade.

Valores altos de t^*_{BF} indicam heterocedasticidade.

Exemplo: Toluca

```
data <- read.table("./dados/CH01TA01.txt")
x = data[,1]
y = data[,2]
ind1 = which(x<80)
ind2 = which(x>=80)
fit = lm(y~x)
resi = fit$resi
resi1 = resi[ind1]
resi2 = resi[ind2]
d1 = abs(resi1-median(resi1))
d2 = abs(resi2-median(resi2))
t.test(d1,d2)
```

Exemplo: Toluca

```
##
##  Welch Two Sample t-test
##
## data:  d1 and d2
## t = 1.3215, df = 22.999, p-value = 0.1993
## alternative hypothesis: true difference in means is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  -9.253335 41.982809
## sample estimates:
## mean of x mean of y
##  44.81507  28.45034
```

Não rejeitamos H_0, isto é, não obtemos evidências para rejeitar a hipótese de homocedasticidade dos erros.

Teste de homocedasticidade: Breusch-Pagan

Assume que $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_i^2)$.

O seguinte modelo é assumido:

$$\log_e \sigma_i^2 = \gamma_0 + \gamma_1 X_i$$

Se $\gamma_1 = 0$ temos homocedasticidade.

$H_0 \colon \gamma_1 = 0$ vs $H_1 \colon \gamma_1 \neq 0$.

Teste de homocedasticidade: Breusch-Pagan

Estatística do teste:

$$X^2_{BP} = \frac{\frac{SQRq}{2}}{\left(\frac{SQE}{n}\right)^2}$$

em que $SQRq$ é a soma de quadrados da regressão de e_i^2 em X e SQE é a soma de quadrados do erro da regressão de Y em X.

Sob H_0, $X^2_{BP} \sim \chi^2_1$.

Exemplo: Toluca

```
fit = lm(y~x)
resi = fit$resi
fit2 = lm(resi^2~x)
a1 <- anova(fit)
a2 <- anova(fit2)
estatistica <- (a2$`Sum Sq`[1]/2)/((a1$`Sum Sq`[2]/length(y))^2)
```

Exemplo: Toluca

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: y
##           Df Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
## x          1 252378  252378  105.88 4.449e-10 ***
## Residuals 23  54825    2384
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

## Analysis of Variance Table
##
## Response: resi^2
##           Df    Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## x          1   7896142 7896142  1.0914  0.307
## Residuals 23 166395896 7234604

## [1] 0.8209192
```

Teste de homocedasticidade: Breusch-Pagan

Diretamente pelo R:

```
library('car')
ncvTest(fit)

## Non-constant Variance Score Test
## Variance formula: ~ fitted.values
## Chisquare = 0.8209192    Df = 1     p = 0.3649116
```

Teste F para falta de ajuste

Queremos testar se a função de regressão proposta é adequada para os dados.

Suposições: as observações de $Y|X$ são

- independentes
- seguem distribuição normal
- variância constante σ^2

É preciso que tenhamos mais de uma observação para cada nível de X (replicações).

Teste F para falta de ajuste

Suponha que tenhamos m valores distintos para X

Para cada valor diferente de X, x_j, temos n_j observações.

- $Y_{11}, Y_{12}, \ldots, Y_{1n_1}$ são n_1 repetições para $X = x_1$.
- $Y_{21}, Y_{22}, \ldots, Y_{2n_2}$ são n_2 repetições para $X = x_2$.
- $Y_{m1}, Y_{m2}, \ldots, Y_{mn_m}$ são n_m repetições para $X = x_m$.

$$n = \sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n_j} 1 = \sum_{j=1}^{m} n_j$$

Teste F para falta de ajuste

Com replicações para cada $X = x_k$, temos um estimador para $Var(Y|X = x_k) = \sigma^2$ para todo k.

Por exemplo, quando $X = x_1$, podemos usar $Y_{11}, Y_{12}, \ldots, Y_{1n_1}$ e o seguinte estimador para $Var(Y|X = x_1)$:

$$\frac{1}{n_1 - 1} \sum_{j=1}^{n_1} (Y_{1j} - \bar{Y}_1)^2$$

Combinando todas as observações (não apenas as replicações para um dado nível de X), temos o seguinte estimador para σ^2:

$$s_e^2 = \frac{\sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n_j} (Y_{ju} - \bar{Y}_j)^2}{\sum_{j=1}^{m} (n_j - 1)}$$

Teste F para falta de ajuste

$$SQE_p = \sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n_j} = (Y_{ju} - \bar{Y}_j)^2$$

com graus de liberdade $n_e = \sum_{j=1}^{m} (n_j - 1) = \sum_{j=1}^{m} n_j - m$.

$$QME_{puro} = s_e^2 = \frac{\sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n_j} (Y_{ju} - \bar{Y}_j)^2}{\sum_{j=1}^{m} n_j - m}$$

Teste F para falta de ajuste

Relembrando:

$$SQE = \sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{n_j}(Y_{ju} - \hat{Y}_j)^2$$

Mostre[1] que a SQE pode ser particinada da seguinte forma:

$$\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{n_j}(Y_{ju} - \hat{Y}_j)^2 = \sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{n_j}(Y_{ju} - \bar{Y}_j)^2 + \sum_{j=1}^{m} n_j(\hat{Y}_j - \bar{Y}_j)^2$$

Teste F para falta de ajuste

$$\underbrace{\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{n_j}(Y_{ju} - \hat{Y}_j)^2}_{SQE} = \underbrace{\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{n_j}(Y_{ju} - \bar{Y}_j)^2}_{SQE_p} + \underbrace{\sum_{j=1}^{m} n_j(\hat{Y}_j - \bar{Y}_j)^2}_{SQF_a}$$

SQE é a soma de quadrados dos resíduos, representando a variação em torno da reta.

SQE_p é a soma de quadrados do erro puro, representando a variação de Y, para X fixo, independente do modelo (pois utilizamos as replicações).

SQF_a é a soma de quadrados da falta de ajuste, representando a falta de ajuste do modelo.

Teste F para falta de ajuste

SQE é o numerador de s^2 e SQE_p é o numerador de s_p^2.

Valores relativamente altos de SQF_a indicam discrepância entre esses dois estimadores e, consequentemente, indicam evidência contra a adequação do modelo de regressão linear simples.

Quanto mais alto o valor de SQF_a, pior é o ajuste do modelo, pois, se o modelo fosse perfeito, teríamos que $SQF_a = 0$.

Teste F para falta de ajuste

H_0: o MRLS é adequado

H_1: o MRLS não é adequado

Estatística do teste:

$$F^* = \frac{SQF_a/(m-2)}{SQE_p/(n-m)}$$

Teste F para falta de ajuste

Fonte de Variação	gl	SQ
Regressão	1	$SQReg = \sum_{i=1}^{n}(\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$
Erro	$n-2$	$SQE = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y})^2$
(Falta de ajuste)	$m-2$	$SQF_a = \sum_{j=1}^{m} n_j(\hat{Y}_j - \bar{Y}_j)^2$
(Erro puro)	$n-m$	$SQE_p = \sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{n_j}(Y_{ju} - \bar{Y}_j)^2$
Total (ajustada)	$n-1$	$SQT = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2$

Exemplo: Agências bancárias

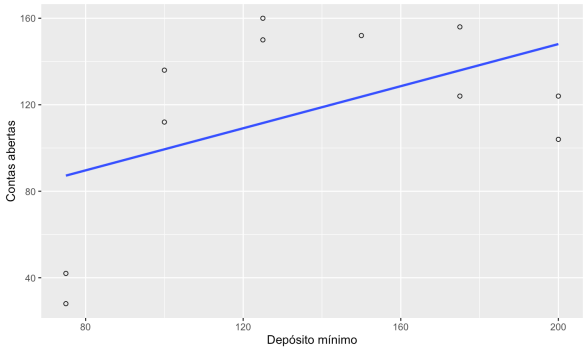
11 agências de um certo banco ofereceram brindes para novos clientes.

Um depósito inicial mínimo era necessário para qualificar para o brinde.

Cada agência especificou o valor do depósito mínimo.

Interesse: valor do depósito mínimo inicial e número de contas que foram abertas na agência.

Exemplo: Agências bancárias



Exemplo: Agências bancárias

Modelo completo:

$$Y_{ij} = \mu_j + \varepsilon_{ij}$$

Temos que $E(Y_{ij}) = \mu_j$, isto é, temos esperança diferente para cada X_j.

Exemplo: Agências bancárias

```
Full=lm(y~as.factor(x)-1)
summary(Full)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ as.factor(x) - 1)
##
## Residuals:
##   1   2   3   4   5   6   7   8   9  10  11
##   5 -12  10  -7   0  16   7 -16  -5 -10  12
##
## Coefficients:
##                 Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## as.factor(x)75     35.00      10.71   3.267 0.022282 *
## as.factor(x)100   124.00      10.71  11.573 8.45e-05 ***
## as.factor(x)125   155.00      10.71  14.466 2.85e-05 ***
## as.factor(x)150   152.00      15.15  10.031 0.000168 ***
## as.factor(x)175   140.00      10.71  13.066 4.68e-05 ***
## as.factor(x)200   114.00      10.71  10.640 0.000127 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 15.15 on 5 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9933, Adjusted R-squared:  0.9852
## F-statistic: 123.1 on 6 and 5 DF,  p-value: 2.893e-05
```

Exemplo: Agências bancárias

Modelo reduzido: reta de regressão.

```
Reduced=lm(y~x)
summary(Reduced)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x)
##
## Residuals:
##    Min     1Q Median     3Q    Max
## -59.23 -34.06  12.61  32.44  48.44
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  50.7225    39.3979   1.287     0.23
## x             0.4867     0.2747   1.772     0.11
##
## Residual standard error: 40.47 on 9 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.2586, Adjusted R-squared:  0.1762
## F-statistic: 3.139 on 1 and 9 DF,  p-value: 0.1102
```

$s = 40.47$ enquanto que, usando o modelo anterior, temos que $s_e = 15.15$.

```
Reduced=lm(y~x)
Full=lm(y~as.factor(x)-1)
anova(Reduced, Full)
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: y ~ x
## Model 2: y ~ as.factor(x) - 1
##   Res.Df   RSS Df Sum of Sq      F   Pr(>F)
## 1      9 14742
## 2      5  1148  4     13594 14.801 0.005594 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

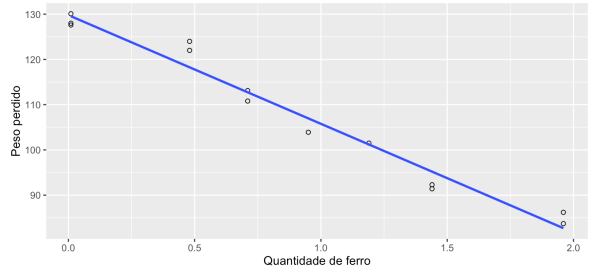
Estatística do teste:

$$F^* = \frac{SQF_a/(m-2)}{SQE_p/(n-m)} = \frac{13594/4}{1148/5} = 14.8$$

Exemplo: Ligas de cobre e níquel

13 ligas de cobre e níquel, mas quantidades diferentes de ferro.

As ligas foram submersas em água do mar por 60 dias e a perda de peso devido à corrosão foi anotada em miligramas por decímetro quadrado por dia.



Exemplo: Ligas de cobre e níquel

```
##
## Call:
## lm(formula = loss ~ Fe, data = corrosion)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -3.7980 -1.9464  0.2971  0.9924  5.7429
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  129.787      1.403   92.52  < 2e-16 ***
## Fe           -24.020      1.280  -18.77 1.06e-09 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.058 on 11 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9697, Adjusted R-squared:  0.967
## F-statistic: 352.3 on 1 and 11 DF,  p-value: 1.055e-09
```

/

Exemplo: Ligas de cobre e níquel

```
##
## Call:
## lm(formula = loss ~ factor(Fe) - 1, data = corrosion)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -1.2500 -0.9667  0.0000  1.0000  1.5333
##
## Coefficients:
##                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## factor(Fe)0.01 128.5667     0.8090  158.91 4.19e-12 ***
## factor(Fe)0.48 123.0000     0.9909  124.13 1.84e-11 ***
## factor(Fe)0.71 111.9500     0.9909  112.98 3.24e-11 ***
## factor(Fe)0.95 103.9000     1.4013   74.15 4.05e-10 ***
## factor(Fe)1.19 101.5000     1.4013   72.43 4.66e-10 ***
## factor(Fe)1.44  91.8500     0.9909   92.70 1.06e-10 ***
## factor(Fe)1.96  84.9500     0.9909   85.73 1.70e-10 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 1.401 on 6 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9999, Adjusted R-squared:  0.9998
## F-statistic: 1.145e+04 on 7 and 6 DF,  p-value: 6.062e-12
```

$s_e = 1.4$ enquanto que, usando o modelo anterior, temos que $s = 3.06$.

/

Exemplo: Ligas de cobre e níquel

```
anova(modeloreduzido,modelocompleto)
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: loss ~ Fe
## Model 2: loss ~ factor(Fe) - 1
##   Res.Df     RSS Df Sum of Sq      F   Pr(>F)
## 1     11 102.850
## 2      6  11.782  5    91.069 9.2756 0.008623 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Estatística do teste:

$$F^* = \frac{SQF_a/(m-2)}{SQE_p/(n-m)} = \frac{91.069/5}{11.782/6} = 9.28$$

/

Exemplo: Ligas de cobre e níquel

```
library(alr3)
pureErrorAnova(modeloreduzido)
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: loss
##              Df Sum Sq Mean Sq   F value    Pr(>F)
## Fe            1 3293.8  3293.8 1677.4028 1.417e-08 ***
## Residuals    11  102.9     9.4
##  Lack of fit  5   91.1    18.2    9.2756  0.008623 **
##  Pure Error   6   11.8     2.0
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

/

Como melhorar o modelo

Se nos testes e/ou gráficos de diagnóstico do modelo determinarmos que o mesmo não é adequado, o que fazer?

- Abandonar o modelo e procurar outro mais adequado: regressão logística, regressão não-paramétrica, regressão robusta…
- Aplicar alguma transformação nos dados, de maneira que a regressão linear simples fique adequada.

Leitura

- Applied Linear Statistical Models: 3.1-3.7.
- Caffo - Regression Models for Data Science in R: Residuals.
- Draper & Smith - Applied Regression Analysis: Capítulo 2.
- Weisberg - Applied Linear Regression: Capítulo 2.
- Faraway - Linear Models with R: 8.3.