Software R: curso avançado

Felipe Micail da Silva Smolski Iara Denise Endruweit Battisti 2018-08-30

Sumário

Prefácio						
In	trod	ução	3			
1	Deli	ineamentos Experimentais	4			
	1.1	Princípios básicos da Experimentação	5			
	1.2	Análise de Variância	5			
	1.3	Hipóteses estatísticas	6			
	1.4	Delineamento Inteiramente Causalizado (DIC)	6			
	1.5	Delineamento Blocos Casualizados (DBC)	11			
2	Análise Fatorial					
	2.1	Pressupostos	18			
	2.2	Estatísticas Associadas a Análise Fatorial	18			
	2.3	Passos da Análise Fatorial	20			
3	Regressão Múltipla					
	3.1	Modelo geral	31			
	3.2	Variável dummy	31			
	3.3	Métodos seleção de variáveis na regressão múltipla	35			
4	Regressão Logística					
	4.1	O modelo	39			
	4.2	Regressão Logística Simples	42			
	4.3	Regressão Logística Múltipla	52			
	4.4	Regressão Logística Múltipla com variável categórica	58			
	4.5	Exercícios	63			
R	eferê	ncias	65			

Prefácio

Esta é a estrutura provisória de capítulos do Curso Avançado em Estatística com R da UFFS:

- Delineamentos Experimentais
- Análise Fatorial
- Regressão Múltipla
- Regressão Logística

Introdução

Capítulo 1

Delineamentos Experimentais

A experimentação é uma parte da estatística probabilística que estuda o planejamento, execução, coleta de dados, análise de dados e interpretação dos resultados provenientes de um experimento.

Um experimento é um procedimento planejado com base em uma hipótese, que tem por objetivo provocar fenômenos (tratamentos) de forma controlada, analisando e interpretando os resultados obtidos.

O tratamento é o método, elemento ou material cujo efeito desejamos avaliar em um experimento. Por exemplo: formas de preparo de solo, diferentes cultivares, doses de adubação, controle de insetos e outras pragas, controle de uma doença. Num experimento, somente o tratamento variade uma unidade experimental para outra, as demais condições são mantidas constantes, salvo erros não controláveis.

E alguns experimentos, utiliza-se a testemunha (nas ciências agrárias e ambientais) ou placebo (na saúde), que são as unidades experimentais que não recebem tratamento.

A unidade experimental é a unidade que recebe o tratamento uma vez e, normalmente são chamadas de parcelas. A escolha da unidade experimental depende dos tipos de tratamentos que serão avaliados. Podem ser: uma área de campo, um vaso com solo, um animal, uma placa de Petri, uma planta. Em áreas de campo, normalmente utiliza-se a bordadura. Num experimento, recomenda-se, no mínimo, a utilização de 20 UEs.

Em um experimento, a variável a ser avaliada chamamos de variável resposta. Por exemplo, núumero de grãos por planta, número de folhas por planta, altura das plantas.

1.1 Princípios básicos da Experimentação

1.1.1 Repetição

A repetição consiste na aplicação do mesmo tratamento sobre duas ou mais unidades experimentais. Permite estimar o erro experimental e avaliar de forma mais precisa o efeito de cada tratamento.

O erro experimental é caracterizado pela variância entre as unidades experimentais que receberam o mesmo tratamento.

1.1.2 Casualização

A casualização consiste na aplicação dos tratamentos aleatoriamente (sorteio) sobre as unidades experimentais. A casualização é usada para obter a independência dos erros, ou seja, evitar que determinados tratamentos sejam favorecidos.

1.1.3 Controle local

Quando tiver heterogeneidade no material experimental: plantas de diferentes alturas, animais de diferentes idades, solo com declividade, deve-se separar o material em grupos homogêneos e aplicar o tratamento uma vez dentro de cada grupo (blocos). A homogeneidade ou não do material dá origem aos tipos de delineamentos:

- Delineamento Inteiramente Casualizado (DIC): material experimental homogêneo;
- Delineamento Blocos Casualizados (DBC): material experimental com uma fonte de heterogeneidade;
- Delineamento Quadrado Latino (DQL): material experimental com duas fontes de heterogeneidade.

1.2 Análise de Variância

Para saber se existe diferença significativa entre as médias resultados dos efeitos de tratamentos, realiza-se a Análise de Variância (ANOVA).

	Graus de	Soma de	Quadrado		
Fonte de	Liberdade	$\mathbf{Quadrados}$	Médio		
Variação	(GL)	(SQ)	(QM)	Falc	\mathbf{P}
Tratamento	I-1	SQtrat	QMat	QMatr/QMerro	Р

Tabela 1.1: Nome da Tabela

Fonte de Variação	Graus de Liberdade (GL)	Soma de Quadrados (SQ)	$egin{aligned} ext{Quadrado} \ ext{M\'edio} \ ext{(QM)} \end{aligned}$	Falc	P
Erro Total	GLerro IJ-1	$egin{aligned} ext{SQerro} \ ext{SQtotal} \end{aligned}$	QMerro		

1.3 Hipóteses estatísticas

- H0: Não existe diferença entre as médias dos tratamentos
- H1: Existe, pelo menos, uma diferença entre as médias dos tratamentos

1.4 Delineamento Inteiramente Causalizado (DIC)

É utilizado quando as unidades experimentais são homogêneas. É o mais simples dos delineamentos e os tratamentos são designados às unidades experimentais de forma casualizada, por meio de um único sorteio. Usado principalmente em pequenos animais, casas de vegetação e em laboratórios.

Exemplo: Um produtor deseja avaliar 4 variedades de pera (A, B, C e D). Para tanto, instalou um experimento no delineamento inteiramente casualizado, utilizando 5 repetições por variedade. Os resultados, peso médio do fruto, estão apresentados a seguir:

Existe diferença significativa entre as variedades de pera, considerando o peso médio dos frutos de cada variedade?

Para responder esta pergunta, utilizamos a Análise de Variância (ANOVA).

No software RStudio:

Criar o arquivo acima em planilha eletrônica. Nomear como DIC e salvar em formato .xls.

Importar no RStudio:

```
require(readx1)
url <- "https://github.com/Smolski/softwarelivrer/raw/master/avancado/dic.xls"
destfile <- "dic.xls"
curl::curl_download(url, destfile)
DIC <- read_excel(destfile)
attach(DIC)</pre>
```

O comando que gera a análise de variância é o aov() e o comando que exibe o quadro da ANOVA é o anova. Então, podemos gerar o quadro da análise de uma são vez associando os dois comandos.

	A	В	С
1	Variedade	Repeticao	Peso
2	Α	1	78
3	Α	2	88
4	Α	3	72
5	Α	4	74
6	Α	5	98
7	В	1	79
8	В	2	56
9	В	3	71
10	В	4	96
11	В	5	55
12	С	1	63
13	C C C	2	68
14	С	3	58
15	С	4	79
16	С	5	59
17	D	1	60
18	D	2	65
19	D	3	59
20	D	4	54
21	D	5	58
22			

Figura 1.1: Variedades de pera separadas por grupos em faixas de peso e repetição

B-D 12.2 -8.016 32.42 0.3429

B-C 6.0 -14.216 26.22 0.8303 A-C 16.6 -3.616 36.82 0.1282 A-B 10.6 -9.616 30.82 0.4602

2.584 43.02 0.0245

A-D 22.8

```
anova=aov(Peso~Variedade)
summary(anova)
             Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
Variedade
                  1414
                            471
                                   3.78 0.032 *
Residuals
             16
                  1997
                            125
Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' 1
      Hipóteses estatísticas:
  • H0: ti = 0 (as médias dos tratamentos nãao diferem entre si)
  • H1: ti \neq 0 (existe, no mínimo, uma diferença entre as médias dos tratamentos)
      Como p = 0.0319 (0.01 \leq p "menor ou igual a" 0.05), rejeita-se H0 com nível de signi-
ficância de 5% e conclui-se que existe diferença significativa entre as médias dos tratamentos.
      Para saber quais as médias que diferem, utilizamos o teste de Tukey.
attach(DIC)
The following objects are masked from DIC (pos = 3):
    Peso, Repeticao, Variedade
TukeyHSD(anova,as.factor("Variedade"),ordered=TRUE)
  Tukey multiple comparisons of means
    95% family-wise confidence level
    factor levels have been ordered
Fit: aov(formula = Peso ~ Variedade)
$Variedade
    diff
              lwr
                    upr p adj
C-D 6.2 -14.016 26.42 0.8164
```

Para que o RStudio apresente uma tabela com as médias e letras indicando quais as médias que diferiram, devemos instalar o pacote agricolae.

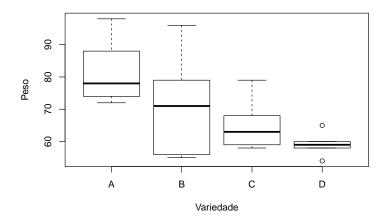
```
library(agricolae)
HSD.test(anova,as.factor("Variedade"),console=TRUE)
```

Peso, Repeticao, Variedade

boxplot(Peso~Variedade,xlab="Variedade",ylab="Peso")

boxplot(Peso~Variedade)

```
Study: anova ~ as.factor("Variedade")
HSD Test for Peso
Mean Square Error:
                     124.8
Variedade,
            means
  Peso
          std r Min Max
A 82.0 10.863 5 72
                      98
B 71.4 17.097 5 55 96
C 65.4 8.562 5 58 79
D 59.2 3.962 5 54
Alpha: 0.05; DF Error: 16
Critical Value of Studentized Range: 4.046
Minimun Significant Difference: 20.22
Treatments with the same letter are not significantly different.
  Peso groups
A 82.0
            а
B 71.4
           ab
C 65.4
           ab
D 59.2
      *Médias dos tratamentos não seguidas por mesma letra diferem pelo teste de Tukey,
ao nível de 5% de significância.
      Conclusão: A variedade de pera A apresentou o maior peso médio dos frutos, que
não diferiu significativamente do peso médio das variedades B e C. A variedade de pera D
apresentou o menor peso médio dos frutos, que não diferiu significativamente do peso médio
das variedades B e C. As variedades B e C apresentaram peso médio dos frutos intermediário.
attach(DIC)
The following objects are masked from DIC (pos = 4):
    Peso, Repeticao, Variedade
The following objects are masked from DIC (pos = 5):
```



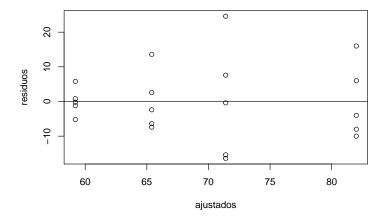
tapply(Peso, Variedade, mean)

A B C D 82.0 71.4 65.4 59.2

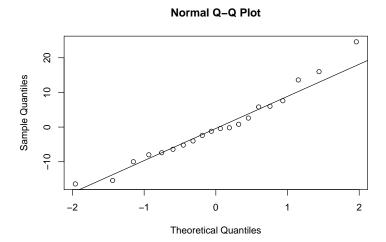
tapply(Peso, Variedade, sd)

A B C D 10.863 17.097 8.562 3.962

residuos=residuals(anova)
ajustados=fitted(anova)
plot(ajustados,residuos)
abline(h=0)



qqnorm(residuos)
qqline(residuos)



1.5 Delineamento Blocos Casualizados (DBC)

É utilizado quando as unidades experimentais são heterogêneas. Os tratamentos são designados às unidades experimentais de forma casualizada, por meio de sorteio por blocos. Na área agrícola, é usado principalmente em áreas de campo e grandes animais.

Exemplo: Uma Nutricionista elaborou 4 dietas e quer aplicá-las em 20 pessoas a fim detestar suas eficiências quanto à perda de peso. Porém ela notou que entre essas 20 pessoas existem 5 grupos de faixas iniciais de peso. Então, para aumentar a eficácia do teste ela separou os 20 indivíduos em 5 grupos de faixas de peso.

Criar o arquivo acima em planilha eletrônica. Nomear como DBC e salvar em formato .xls.

Importar no RStudio:

```
require(readxl)
url <- "https://github.com/Smolski/softwarelivrer/raw/master/avancado/dbc.xls"
destfile <- "dbc.xls"
curl::curl_download(url, destfile)
DBC <- read_excel(destfile)
attach(DBC)
anova=aov(Perda~Tratamentos+Blocos)
summary(anova)</pre>
```

```
Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
Tratamentos 3 25.2 8.4 6.00 0.0097 **
Blocos 4 3.2 0.8 0.57 0.6885
Residuals 12 16.8 1.4
```

	Α	В	С
1	Tratamentos	Blocos	Perda
2	Dieta 1	peso A	2
3	Dieta 2	peso A	5
4	Dieta 3	peso A	2
5	Dieta 4	peso A	5
6	Dieta 1	peso B	3
7	Dieta 2	peso B	7
8	Dieta 3	peso B	4
9	Dieta 4	peso B	3
10	Dieta 1	peso C	2
11	Dieta 2	peso C	6
12	Dieta 3	peso C	5
13	Dieta 4	peso C	4
14	Dieta 1	peso D	4
15	Dieta 2	peso D	5
16	Dieta 3	peso D	1
17	Dieta 4	peso D	3
18	Dieta 1	peso E	2
19	Dieta 2	peso E	5
20	Dieta 3	peso E	4
21	Dieta 4	peso E	4
22	1		

Figura 1.2: Indivíduos separados por grupos em faixas de peso

```
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Hipóteses estatísticas:

- H0: ti = 0 (as médias dos tratamentos não diferem entre si)
- H1: $ti \neq 0$ (existe, no mínimo, uma diferença entre as médias dos tratamentos)

Como p = 0.00973 ($p \le 0.01$), rejeita-se H0 com nível de significância de 1% e conclui-se que existe diferença significativa entre as médias dos tratamentos.

- H0: σ^2 blocos = 0
- H1: σ^2 blocos < 0

Como p = 0,68854 (p \leq 0,05), não rejeita-se H0 e conclui-se que a variância entre os blocos não é significativa.

```
attach(DBC)
HSD.test(anova,as.factor("Tratamentos"),console=TRUE)
```

```
Study: anova ~ as.factor("Tratamentos")
```

HSD Test for Perda

Mean Square Error: 1.4

Tratamentos, means

```
Perda std r Min Max
Dieta 1 2.6 0.8944 5 2 4
Dieta 2 5.6 0.8944 5 5 7
Dieta 3 3.2 1.6432 5 1 5
Dieta 4 3.8 0.8367 5 3 5
```

Alpha: 0.05; DF Error: 12

Critical Value of Studentized Range: 4.199

Minimun Significant Difference: 2.222

Treatments with the same letter are not significantly different.

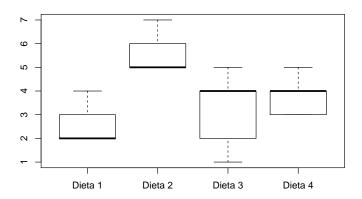
```
Perda groups
Dieta 2 5.6 a
Dieta 4 3.8 ab
Dieta 3 3.2 b
Dieta 1 2.6 b
```

Médias dos tratamentos não seguidas por mesma letra diferem pelo teste de Tukey, ao nível de 5% de significância.

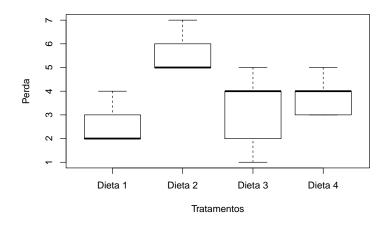
Conclusão: A dieta que resultou na maior perda de peso foi a dieta 2, que não diferiu da dieta 4. A dieta que resultou na menor perda de peso foi a dieta 1, que não diferiu das dietas 3 e 4.

Medidas descritivas com a variável resposta:

boxplot(Perda~Tratamentos)



boxplot(Perda~Tratamentos,xlab="Tratamentos",ylab="Perda")



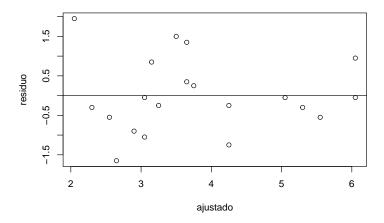
tapply(Perda,Tratamentos,mean)

```
Dieta 1 Dieta 2 Dieta 3 Dieta 4
2.6 5.6 3.2 3.8
```

tapply(Perda,Tratamentos,sd)

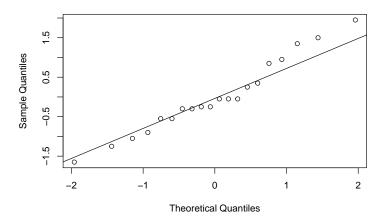
Dieta 1 Dieta 2 Dieta 3 Dieta 4 0.8944 0.8944 1.6432 0.8367

```
residuo=residuals(anova)
ajustado=fitted(anova)
plot(ajustado,residuo)
abline(h=0)
```



qqnorm(residuo)
qqline(residuo)

Normal Q-Q Plot



Capítulo 2

Análise Fatorial

A análise fatorial é um método estatístico utilizado para descrever a variabilidade entre variáveis observadas e possivelmente correlacionadas em termos de um número potencialmente menor de variáveis não observadas chamadas fatores.

Assim, é possível que as variaçõess de três ou quatro variáveis observadas possam ser explicadas por somente um fator, o que evidencia a utilidade da análise fatorial para descrever um conjunto de dados utilizando para isso apenas alguns fatores.

Diferentemente da análise de variância, regressão e análise discriminante, onde uma das variáveis é identificada como a variável dependente, examina-se todo o conjunto de relações interdependentes entre variáveis.



Fonte: Azevedo, R. Métodos Quantitativos: Análise multivariada.

A análise fatorial aborda o problema de analisar a estrutura das inter-relações (correlações) entre um grande número de variáveis (escores de testes, itens de testes, respostas de questionários), definindo um conjunto de dimensões latentes comuns, chamados fatores. Então, a análise fatorial, permite primeiro identificar as dimensões separadas da estrutura e então determinar o grau em que cada variável é explicada por cada dimensão. Uma vez que essas dimensões e a explicação da cada variável estejam determinadas, os dois principais usos da análise fatorial podem ser conseguidos:

- Resumo: ao resumir os dados, a análise fatorial obtém dimensões latentes que, quando interpretadas e compreendidas, descrevem os dados em um núumero muito menor de conceitos do que as variáveis individuais originais.
- Redução de dados: pode ser obtida calculando escores para cada dimensão latente e substituindo as variáveis originais pelos mesmos.

As técnicas analíticas fatoriais podem ser classificadas quanto aos seus objetivos como **exploratória** ou **confirmatória**. Exploratória, útil na busca da estrutura em um conjunto de variáveis ou como um método de redução de dados. Sob esta perspectiva, as técnicas analíticas fatoriais "consideram o que os dados oferecem"e não estabelecem restriçoes *a priori* sobre o número de componentes a serem extraídos. O uso da análise fatorial em situações, que se deseja testar hipóteses envolvendo questões sobre, quais variáveis deveriam ser agrupadasem fator ou número exato de fatores, por exemplo, a análise fatorial desempenha um papel confirmatório, ou seja, avalia o grau em que os dados satisfazem a estrutura esperada.

Exemplo: em maketing, fatores associados às características do produto, clientes e até mesmo da organização.

Em estudos visando analisar o inter-relacionamento e o agrupamento de indivíduos, cidade ou regiões em grupos homogêneos em relação à mobilidade, preferências pessoais, condições de desenvolvimento, entre outras variáveis.

2.1 Pressupostos

A análise fatorial clássica exige que alguns pressupostos sejam satisfeitos, quais sejam (MALHOTRA, 2001):

- a. Normalidade dos dados: apesar deste pressuposto não ser crítico quando a estimação é realizada por mínimos quadrados ordinários, a exigência de normalidade auxilia na análise, evitando possíveis assimetrias e a presença de *outliers*.
- b. Variáveis quantitativas medidas em escala Intervalar ou de Razão. Esse pressuposto é crítico, pois a análise deve ser realizada com variáveis quantitatias e, frequentemente, alguns estudos são realizados utilizando variáveis ordinais (as quaiss são qualitativas) na análise fatorial clássica (o que é errado de muitas maneiras).
- c. Como diretriz inicial deve haver ao menos quatro a cinco vezes mais observações do que variáveis.

2.2 Estatísticas Associadas a Análise Fatorial

Em geral, as estatísticas utilizadas no processo de análise fatorial são (AAKER-KUMARDAY, 2001):

- Teste de esfericidade de Bartlett: estatística de teste usada para examinar a hipótese de que as variáveis não sejam correlacionadas na população, ou seja, a matriz de correlação da população é uma matriz identidade onde cada variável se correlaciona perfeitamente com ela própria (r=1), mas não apresenta correlação com as outras variáveis (r=0).
- Matriz de correlação: o triângulo inferior da matriz exibe as correlações simples, r, entre todos os pares possíveis de variáveis incluídas na análise, enquanto os elementos da diagonal, que são todos iguais a 1, em geral são omitidos.
- Comunalidade: porção da variância que uma variável compartilha com todas as outras variáveis consideradas, sendo também a proporção de variância explicada pelos fatores comuns.
- Autovalor: representa a variância total explicada por cada fator.
- Cargas fatoriais: correlação simples entre as variáveis e os fatores.

- Gráfico das cargas dos fatores: gráfico das variáveis originais utilizando as cargas fatoriais como ordenadas.
- Matriz de fatores ou matriz principal: contém as cargas fatoriais de todos as variáveis em todos os fatores extraídos.
- Escores fatoriais: escores compostos estimados para cada entrevistado nos fatores derivados.
- Medida de adequacidade da amostra de Kaiser-Meyer-Olkin (KMO): é o índice usado para avaliar a adequacidade da análise fatorial. Valores altos (entre 0,5 e 1,0) indicam que a análise fatorial é apropriada. Valores abaixo de 0,5 indicam que a análise fatorial pode ser inadequada.
- Percentagem de variância: percentagem da variância total atribuída a cada fator.
- Resíduos: diferenças entre as correlações observadas, dadas na matriz de correlação de entrada (input) e as correlações reproduzidas, conforme estimadas pela matriz de fatores.
- Scree plot: gráfico dos autovalores versus número de fatores por ordem de extração.

Exemplo 1:

(MALHOTRA, 2001) Suponhamos que um pesquisador queira avaliar os benefícios que os consumidores esperam de um dentifrício. Foi entrevistada uma amostra de 30 pessoas em um supermercado, para que indicassem seu grau de concordância com as seguintes afirmações, utilizando uma escala de 7 pontos (1= discordância total, 7 =concordância total).

- V1: É importante comprar um creme dental que evite cáries.
- V2: Gosto de um creme dental que clareie os dentes.
- V3: Um creme dental deve fortificar as gengivas.
- V4: Prefiro um creme dental que refresque o hálito.
- V5: Manter os dentes sadios não é uma vantagem importante de um creme dental.
- V6: O aspecto mais importante na compra de um creme dental é tornar os dentes atraentes.

Inicialmente podemos explorar algumas estatísticas descritivas relacionadas às variáveis pesquisadas, utilizando a função summary:

```
require(readxl)
```

Carregando pacotes exigidos: readxl

```
url <- "https://github.com/Smolski/softwarelivrer/raw/master/avancado/creme_dental_exemp
destfile <- "creme_dental_exemplo1.xlsx"
curl::curl_download(url, destfile)
creme_dental_exemplo1 <- read_excel(destfile)
attach(creme_dental_exemplo1)
summary(creme_dental_exemplo1)</pre>
```

```
v1
                       v2
                                      vЗ
                                                     v4
                                                                    v5
Min.
       :1.00
                        :2.0
                               Min.
                                       :1.0
                                                      :2.0
                                                                      :1.0
                Min.
                                              Min.
                                                              Min.
1st Qu.:2.00
                1st Qu.:3.0
                               1st Qu.:2.0
                                               1st Qu.:3.0
                                                              1st Qu.:2.0
Median:4.00
                Median:4.0
                               Median:4.0
                                              Median:4.0
                                                              Median:3.5
Mean
       :3.93
                Mean
                        :3.9
                               Mean
                                       :4.1
                                              Mean
                                                      :4.1
                                                              Mean
                                                                      :3.5
3rd Qu.:6.00
                               3rd Qu.:6.0
                3rd Qu.:5.0
                                               3rd Qu.:5.0
                                                              3rd Qu.:5.0
Max.
       :7.00
                Max.
                        :7.0
                               Max.
                                       :7.0
                                              Max.
                                                      :7.0
                                                              Max.
                                                                      :7.0
      v6
Min.
       :2.00
1st Qu.:3.00
Median:4.00
Mean
       :4.17
3rd Qu.:4.75
       :7.00
Max.
```

2.3 Passos da Análise Fatorial

Basicamente, os seguintes passos conduzem a análise fatorial: entrada de dados, cálculo das correlações entre as variáveis, extração inicial dos fatores e a rotação da matriz.

2.3.1 Construção da Matriz de Correlação

Entrada de Dados (BASE): os dados de entrada da análise fatorial geralmente tomam a forma de um conjunto de valores de variáveis para cada objeto ou indivíduo na amostra. Toda matriz, cujos componentes ofereçam uma medida de similaridade entre variáveis, pode ser passível de análise fatorial. A medida de similaridade não precisa ser uma correlação, embora, geralmente, ou seja:

Para que a análise fatorial seja adequada, as variáveis devem ser correlacionadas. Espera-se também que as variáveis altamente correlacionadas umas com as outras se correlacionem também com o(s) mesmo(s) fatore(s).

Note que existem correlações amostrais positivas e negativas relativamente elevadas entre V1 (prevenção de cáries), V3 (gengivas fortes) e V5 (dentes sadios). Espera-se que essas variáveis se relacionem com o mesmo conjunto de fatores. Verificam-se também correlações relativamente elevadas entre V2 (clareie os dentes), V4 (hálito puro) e V6 (dentes atraentes). Essas variáveis também devem correlacionar-se com os mesmos fatores.

```
matcor <- cor(creme_dental_exemplo1)
print(matcor, digits = 2)

v1     v2     v3     v4     v5     v6
v1     1.0000 -0.053     0.873 -0.0862 -0.8576     0.0042
v2 -0.0532     1.000 -0.155     0.5722     0.0197     0.6405</pre>
```

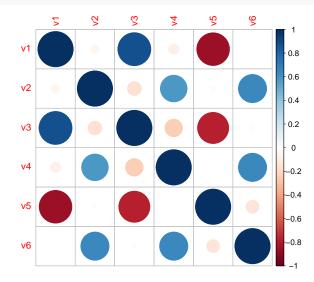
```
v3 0.8731 -0.155 1.000 -0.2478 -0.7778 -0.0181
v4 -0.0862 0.572 -0.248 1.0000 -0.0066 0.6405
v5 -0.8576 0.020 -0.778 -0.0066 1.0000 -0.1364
v6 0.0042 0.640 -0.018 0.6405 -0.1364 1.0000
```

```
require(corrplot)
```

Carregando pacotes exigidos: corrplot

corrplot 0.84 loaded

corrplot(matcor, method="circle")



Na figura acima, as correlações estão em cor azul porque são positivas, com tons mais fortes para as correlações mais altas.

Para testar a conveniência do modelo fatorial pode-se aplicar o teste de esfericidade de Bartlett para testar a hipótese nula, de que as variáveis não sejam correlacionadas na população. Um valor elevado da estatística de teste favorece a rejeição da hipótese nula.

Também, a medida de adequacidade da amostra de Kaiser-Meyer-Olkin (KMO) compara as magnitudes dos coeficientes de correlação observados com as magnitudes dos coeficientes de correlação parcial. Pequenos valores de KMO indicam que as correlações entre os pares de variáveis não podem ser explicadas por outras variáveis, indicando que a análise fatorial não é adequada.

Hipóteses:

Ho: A matriz de correlação da população é uma matriz identidade, ou seja as variáveis não são correlacionadas na população.

H1: A matriz de correlação da população não é uma matriz identidade, ou seja as variáveis são correlacionadas na população.

```
#install.packages("psych")
require(psych)

Carregando pacotes exigidos: psych
cortest.bartlett(creme_dental_exemplo1)

R was not square, finding R from data
$chisq
[1] 111.3

$p.value
[1] 9.017e-17

$df
[1] 15
```

Veja que a hipótese nula de que a matriz de correlação da população seja uma matriz identidade é rejeitada pelo teste de esfericidade de Bartlett. A estatística qui-quadrado aproximada é 111,314, com 15 graus de liberdade, significativa ao nível de 0,05.

```
KMO(creme_dental_exemplo1)
```

```
Kaiser-Meyer-Olkin factor adequacy
Call: KMO(r = creme_dental_exemplo1)
Overall MSA = 0.66
MSA for each item =
   v1   v2   v3   v4   v5   v6
0.62 0.70 0.68 0.64 0.77 0.56
```

A estatística KMO maior que 0,5 também concorda quanto ao fato de que a análise fatorial pode ser considerada uma técnica apropriada para analisar a matriz de correlação.

2.3.2 Método de Análise Fatorial

As duas abordagens básicas são a análise de componentes principais (ACP) e a análise fatorial (AFC) comum ou análise fatorial exploratória (AFE), embora existam diferentes métodos de extração de fatores da matriz de correlações, que de forma geral, são métodos numericamente complexos. Na análise de componentes principais, o objetivo da extração de fatores é encontrar um conjunto de fatores que formem uma combinação linear das variáveis originais ou da matriz de correlações. Assim, se as variáveis X1, X2, X3, ..., Xn são altamente correlacionadas entre si, elas serão combinadas para formar um fator, e assim, sucessivamente, com todas as demais variáveis da matriz de correlação.

A análise fatorial exploratória pode trazer informações importantes sobre a estrutura multivariada de um instrumento de mensuração, identificando os construtos teóricos.

O segundo objetivo da analise fatorial exploratória está relacionado à redução de dados e descoberta de ponderações ótimas para as variáveis mensuradas, de forma que um grande conjunto de variáveis possa ser reduzido a um conjunto menor de índices sumários que tenham máxima variabilidade e fidedignidade. A redução de dados é especialmente possível pela aplicação da Análise dos Componentes Principais (ACP) e não pelo uso da analise fatorial comum (AFC), havendo uma diferença fundamental entre os dois métodos: a ACP trabalha com a variância total observada, enquanto a AFC trabalha somente com a variância partilhada dos itens (variância erro e variância única são excluídas) (LAROS, 2012).

Na AFC, os fatores são estimados para explicar as covariâncias entre as variáveis observadas, portanto os fatores são considerados como as causas das variáveis observadas. Já na ACP, os componentes são estimados para representar a variância das variáveis observadas de uma maneira tão econômica quanto possível. Os componentes principais são somas otimamente ponderadas das variáveis observadas, neste sentido, as variáveis observadas são consideradas as causas dos componentes principais (LAROS, 2012).

Assim, recomenda-se a ACP, quando o objetivo é determinar o número mínimo de fatores que respondem pela máxima variância nos dados, sendo os fatores chamados componentes principais (MALHOTRA, 2001).

```
Obs.:
```

cor = TRUE: as componentes principais serão geradas a partir da matriz de correlação.

cor = FALSE: as componentes principais serão geradas a partir da matriz de covariância.

```
fit<-princomp(creme_dental_exemplo1,cor=TRUE)
fit

Call:
princomp(x = creme_dental_exemplo1, cor = TRUE)

Standard deviations:
Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5 Comp.6</pre>
```

6 variables and 30 observations.

1.6526 1.4893 0.6645 0.5842 0.4274 0.2919

```
summary(fit)
```

Importance of components:

```
Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5 Comp.6 Standard deviation 1.6526 1.4893 0.6645 0.58417 0.42735 0.2919 Proportion of Variance 0.4552 0.3697 0.0736 0.05688 0.03044 0.0142 Cumulative Proportion 0.4552 0.8249 0.8985 0.95536 0.98580 1.0000
```

A função summary(fit) mostra a aplicação da análise de componentes principais. O

fator 1 responde por 45,52% da variância total. Da mesma forma, o segundo fator responde por 36,97% da variância total, sendo que os dois primeiros fatores respondem por 82,49% da variância total. Várias considerações devem integrar a análise do núumero de fatores que devem ser usados na análise.

2.3.3 Determinação do núumero de fatores

A fim de reduzir as informações presentes nas variáveis originais, deve-se reduzir o número de fatores. Na literatura, diversos processos são sugeridos: determinação a priori, observação dos autovalores, representação gráfica (scree plot), testes de significância entre outros.

2.3.3.1 Determinação a priori

Quando o pesquisador, com base na experiência que apresentação em relação ao assunto, decide quantos fatores deseja utilizar.

2.3.3.2 Autovalores

Como o autovalor representa a quantidade de variância associada ao fator, incluem-se apenas os fatores com variância maior que 1.

2.3.3.3 Gráfico de declive (scree plot)

Trata-se de uma representação gráfica dos autovalores associada ao número de fatores na ordem de extração. O ponto em que a inclinação suaviza indica o número de fatores a ser usados, que em geral é superior ao revelado pelos autovalores.

2.3.3.4 Percentagem da variância

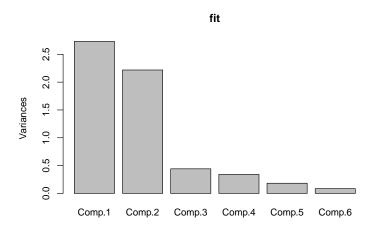
Determina que o núumero de fatores extraídos seja de no mínimo 60% da variância.

2.3.3.5 Teste de significância

É possível reter apenas os fatores estatisticamente significativos com base na significancia estatística dos autovalores separados.

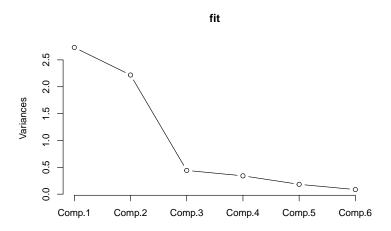
Abaixo vamos apresentar o scree-plot, em formato do gráfico de barras para o nosso exemplo

screeplot(fit)



Note que as duas primeiras componentes, aparecem em destaque, ocorrendo uma ligeira suavização das alturas nas demais colunas.

plot(fit,type="lines")



2.3.4 Análise de Componentes Principais

Rodando a Análise de Componentes Principais no R, temos:

Principal Components Analysis

		PUI	PC2
SS loadings	5	2.73	2.22
Proportion	Var	0.46	0.37
${\tt Cumulative}$	Var	0.46	0.82
Proportion	Explained	0.55	0.45
${\tt Cumulative}$	Proportion	0.55	1.00

Mean item complexity = 1.2

Test of the hypothesis that 2 components are sufficient.

The root mean square of the residuals (RMSR) is 0.07 with the empirical chi square 3.94 with prob < 0.41

Fit based upon off diagonal values = 0.98

A matriz de fatores acima, resultante da análise de componentes principais, é composta pelos coeficientes (cargas fatoriais) que expressam as variáveis padronizadas em termos dos fatores. Valores altos das cargas fatoriais, representam boa relação entre a variável e o fator. Essa matriz não rotada, apresenta dificuldades para ser interpretada pelo fato de que, em geral os fatores são correlacionados com muitas variáveis.

Com o processo da rotação, a matriz de fatores resulta numa matriz mais simples, sendo que a rotação não afeta as comunalidades e a porcentagem da variância explicada. No entanto, a percentagem da variância explicada por cada fator varia, sendo redistribuída por rotação (MALHOTRA, 2001).

Obs. comunalidades (communalities) são quantidades das variâncias (correlações) de cada variável explicada pelos fatores.

2.3.5 Matriz Rotada do Fator

Com o objetivo de possibilitar uma melhor interpretação dos fatores, é prática comum fazer uma rotação ou uma transformação dos fatores.

O conjunto de cargas fatoriais, obtidas por qualquer método de solução fatorial,

quando o número de fatores comuns é maior do que um, não é único, pois outros conjuntos equivalentes podem ser encontrados, por transformações ortogonais de cargas.

Na rotação ortogonal, os eixos são mantidos em ângulo reto, sendo o método mais utilizado o processo varimax. Esse método ortogonal de rotação minimiza o número de variáveis com altas cargas sobre um fator afim de permitir a interpretaçã dos fatores. A rotação ortogonal resulta em fatores nãocorrelacionados ao passo que a rotação oblíqua não mantém os eixos em ângulo reto e os fatores são correlacionados (MALHOTRA, 2001).

```
PCAdentevarimax <- principal (creme dental exemplo1, nfactors=2,
            n.obs=30,rotate="varimax",scores=TRUE)
PCAdentevarimax
Principal Components Analysis
Call: principal(r = creme dental exemplo1, nfactors = 2, rotate = "varimax",
    n.obs = 30, scores = TRUE)
Standardized loadings (pattern matrix) based upon correlation matrix
     RC1
           RC2
                 h2
                       u2 com
v1 0.96 -0.03 0.93 0.074 1.0
v2 -0.05 0.85 0.72 0.277 1.0
v3 0.93 -0.15 0.89 0.106 1.1
v4 -0.09 0.85 0.74 0.261 1.0
v5 -0.93 -0.08 0.88 0.122 1.0
v6 0.09 0.88 0.79 0.210 1.0
                       RC1 RC2
SS loadings
                      2.69 2.26
Proportion Var
                      0.45 0.38
Cumulative Var
                      0.45 0.82
```

Mean item complexity = 1

Proportion Explained 0.54 0.46 Cumulative Proportion 0.54 1.00

Test of the hypothesis that 2 components are sufficient.

The root mean square of the residuals (RMSR) is 0.07 with the empirical chi square 3.94 with prob < 0.41

Fit based upon off diagonal values = 0.98

Veja que na matriz rotada, o Fator 1 apresenta altos coeficientes para as variáveis V1 (prevenção de cáries), V3 (gengivas fortes) e coeficiente negativo para V5 (dentes sadios não é importante). O Fator 2 apresenta forte relação com V2 (clareie os dentes), V4 (hálito puro) e V6 (dentes atraentes).

Rotulando:

Nesta fase é usual tentar dar nomes aos fatores. Em muitos casos, isto requer um certo grau de imaginação:

Fator 1: Fator de benefício para a saúde.

Fator 2: Fator de benefício social.

Com os dois fatores acima, podemos concluir sobre o que o consumidor espera de um creme dental.

2.3.6 Autovalores

Para acessar os eingenvalues (autovalores):

PCAdentevarimax\$values

[1] 2.73119 2.21812 0.44160 0.34126 0.18263 0.08521

Confirmando, temos autovalores acima de 1, nos dois primeiros casos.

Para visualizar melhor a contribuição de cada variável (peso):

PCAdentevarimax\$loadings

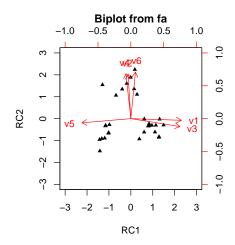
Loadings:

```
RC1 RC2
v1 0.962
v2 0.848
v3 0.933 -0.151
v4 0.855
v5 -0.934
v6 0.885
```

```
RC1 RC2
SS loadings 2.687 2.263
Proportion Var 0.448 0.377
Cumulative Var 0.448 0.825
```

Recurso importante na interpretação dos fatores, o gráfico das variáveis, apresenta ao final do eixo, as variáveis que com cargas mais altas sobre aquele fator. Quanto mais próximas da origem menores as cargas destas variáveis sobre aquele fator. Variáveis distantes dos dois eixos, estão relacionadas a ambos os fatores.

biplot(PCAdentevarimax)



Os valores dos fatores obtidos para os 30 entrevistados encontram-se na matriz de coeficiente de escore do componente mostrada abaixo. Esta ajuda a entender como cada variável se relaciona aos escores dos componentes calculados para cada participante. Para melhor compreensão da análise dos escores dos entrevistados é importante especificar e comentar o significado de cada fator:

Fator 1: Fator de benefício para a saúde.

Fator 2: Fator de benefício social.

Analisando os escores fatoriais dos entrevistados, destacamos a seguir alguns entrevistados e seus respectivos resultados:

Entrevistado 18: 1.494934982

Este entrevistado se destacou como o primeiro colocado no ranqueamento, obtendo o maior escore ponderado, demonstrando ser bastante atento à prevenção de cáries, gengivas fortes e dentes sadios.

Entrevistado 29: 2.24121650

Este entrevistado se destacou em primeiro no segundo fator, apresentando preocupação quanto ao beneffício social da dentição: boa aparência dos dentes, hálito puro e boa aparência dos dentes.

Destacando-se os entrevistados de interesse, verifica-se:

```
[8,]
[9,]
       1.314326185 -0.02535258
      -1.013720900
                    -0.63921247
[10,]
      -1.294148852
                      1.54533311
[11,]
[12,]
       1.102641284
                    -0.61319753
      -1.150922200
                    -0.30734835
[13,]
                    -0.82866966
       1.288271583
[14,]
       0.148988842
                      1.35740692
[15,]
      -1.326348572
                     -0.91233215
[16,]
       0.789822075
                    -0.33831055
[17,]
       0.608638252
                     -0.61593673
[18,]
       1.494934982
                     -0.29386303
                    -0.66541567
[19,]
      -1.026914833
[20, ]
      -0.394466651
                      1.34560335
[21,]
      -1.192010691
                     -0.89125450
[22,]
                    -0.01676177
       0.614234778
[23,]
      -0.978198322
                     -0.27595537
[24,]
                      1.88496785
      -0.006906942
[25,]
       0.833064467
                     -0.23598682
[26,]
      -0.188090764
                      1.60734167
[27,]
[28,]
       0.828974634
                     -0.32986524
      -0.677614532
                      1.06323436
[29,]
       0.182192413
                      2.24121650
[30,]
      -1.428147525 -0.95604502
```

Capítulo 3

Regressão Múltipla

3.1 Modelo geral

Um modelo de regressão múltipla é expresso como:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_k x_{ki} + \varepsilon_i$$

em que:

- y_i : valores da variável resposta, i = 1, 2, ..., n observações;
- x: valores das variáveis explicativas, k = 1, 2, ..., K variáveis;
- β_k : parâmetros do modelo;
- ε_i : erro aleatório.

A equação estimada para este modelo é definida como:

$$y_i = b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \dots + b_k x_{ki}$$

em que:

• b_k : coeficientes estimados.

3.2 Variável dummy

Em algumas situações é necessário introduzir, como variável preditora (independente), uma variável categórica no modelo de regressão linear simples ou múltiplo, como por exemplo, local (urbano ou rural), área (preservada ou degradada), etc, podendo ter mais que duas categorias. Essa variável terá que ser codificada, utilizando somente códigos 0 e 1, assim chamada variável dummy.

O número de variáveis dummy no modelo será sempre igual ao número de categorias da variável preditora original menos 1. Por exemplo:

- Para a variável preditora "local" que assume valores urbano ou rural, então têm-se a variável dummy local_dummy assumindo 0 para rural e 1 para urbano; também, poderia ser utilizado 1 para rural e 0 para urbano. Uma indicação é que a categoria que assume o valor 0 seja a categoria de referência.
- Para a variável preditora "grau de escolaridade" que assume valores ensino fundamental, ensino médio, ensino superior, então têm-se as variáveis dummy: escola1 e escola2, assim definido:
- a. escola1=0 e escola2=0 para ensino fundamental;
- b. escola1=1 e escola2=0 para ensino médio;
- c. escola1=0 e escola2=1 para ensino superior.

Exercício:

 Utilizando o banco de dados ARVORE2, ajuste um modelo de regressão linear simples para predizer a altura das árvores em função do diâmetro. Veja essa relação no diagrama de dispersão. Interprete os resultados.

Relembrando Modelos de Regressão Linear Simples – Curso Básico do Software R:

- 1.1 Ajustar a equação de regressão. Interpretá-la.
- 1.2 Encontrar e interpretar a significância da equação.
- 1.3 Encontrar e interpretar o coeficiente de determinação.
- 1.4 Analisar graficamente os resíduos.
- 1.5 Testar a normalidade dos resíduos.

Adicionalmente - Curso Avançado do Software R:

• 1.6 Analisar pontos *outliers* nos resíduos.

Para análise dos valores *outliers* nos resíduos (*residuals standard* e *residuals studentized*), utilizam-se os seguintes comandos:

```
rstudent(regressao)
rstandard(regressao)
E o gráfico para verificar valores outliers nos resíduos:
plot(rstudent(regressao))
plot(rstandard(regressao))
```

Aqueles valores maiores que |2| são possíveis outliers. Incluir uma linha y =2 e y=-2, para facilitar a visualização de outliers.

• 1.7 Analisar pontos influentes nos resíduos.

Para análise dos valores influentes, utiliza-se:

dffits(regressao)

Aqueles valores maiores que $2*(p/n)^(1/2)$ são possíveis pontos influentes. Em que, p = número de parâmetros do modelo e n = tamanho da amostra. O gráfico para detectar pontos influentes pode ser elaborado pelo comando:

```
plot(dffits(regressao))
```

Aqueles valores maiores, em módulo, são possíveis influentes. Incluir linhas para facilitar a visualização de pontos influentes.

Ainda, pode-se utilizar o comando plot(regressao) elabora diferentes gráficos para o diagnóstico do modelo.

- 2) Ajuste um segundo modelo de regressão linear simples para predizer a altura das árvores em função da espécie. Veja essa relação no diagrama de dispersão. Interprete os resultados.
- 3) Ajuste um terceiro modelo de regressão múltipla para predizer a altura das árvores em função do diâmetro e da espécie. Interprete os resultados.

```
library(readxl)
url <- "https://github.com/Smolski/softwarelivrer/raw/master/avancado/arvore2.xlsx"
destfile <- "arvore2.xlsx"
curl::curl_download(url, destfile)
arvore2 <- read_excel(destfile)
attach(arvore2)
head(arvore2)</pre>
```

```
# A tibble: 6 x 4
  Nomecientifico
                             diametro cm altura m especie
  <chr>
                                    <dbl>
                                             <dbl>
                                                      <dbl>
                                     52.2
1 Sebastiania commersoniana
                                              15.2
                                                          0
2 Sebastiania commersoniana
                                     95
                                              17.3
                                                          0
3 Sebastiania commersoniana
                                     67.3
                                              16.3
                                                          0
4 Sebastiania commersoniana
                                     46.3
                                              14
                                                          0
5 Sebastiania commersoniana
                                     64.1
                                              15
                                                          0
6 Sebastiania commersoniana
                                              22
                                                          0
                                    122
```

```
modelom=lm(altura_m~diametro_cm+especie)
modelom
```

Call:

```
lm(formula = altura m ~ diametro cm + especie)
```

Coefficients:

```
(Intercept) diametro_cm especie
12.6959 0.0571 -1.6252
```

Modelo:

$$Y = 12,328 + 0,0576x_11,423x_2$$

Ou

Altura =
$$12,328 + 0,0576$$
diâmetro $1,423$ espécie

Verificando a significância de cada coeficiente do modelo de regressão múltipla:

summary(modelom)

Call:

```
lm(formula = altura m ~ diametro cm + especie)
```

Residuals:

```
Min 1Q Median 3Q Max -3.269 -0.766 -0.124 0.813 2.873
```

Coefficients:

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.69592   0.38639   32.86   < 2e-16 ***
diametro_cm   0.05713   0.00445   12.84   < 2e-16 ***
especie    -1.62517   0.24459   -6.64   1.5e-09 ***
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Residual standard error: 1.19 on 102 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.7, Adjusted R-squared: 0.694 F-statistic: 119 on 2 and 102 DF, p-value: <2e-16

Verificar a significância do modelo completo.

Verificar o coeficiente de determinação do modelo.

Realizar análise dos resíduos.

- gráfico dos resíduos com cada variável preditora
- resíduos padronizados para verificar outlier
- verificar pontos infuentes

A interpretação dos termos de regressão é um pouco mais complicada. Em geral, um modelo com múltiplos preditores indica a diferença média na variável desfecho quando mudamos o valor de uma variável e mantemos a outra constante.

Nesse caso, entre árvores de mesmo diâmetro (x_1) , a diferença média esperada da altura (y) para a espécie $Syphoneugena\ reitzii$ em relação a espécie Sebastiania commersoniana é de cerca de 1,42m a menos (pois b_3 =-1,42).

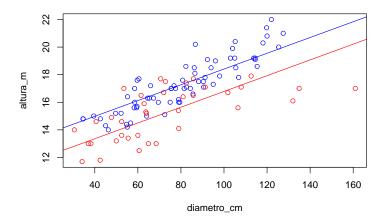
Da mesma forma, árvores da mesma espécie têm, em média, 0.05758m (pois $b_2=0.05758$) a mais a cada 1 cm de diâmetro.

Como envolvem mais variáveis, não é possível resolver o modelo inteiro num único gráfico. Como alternativa, pode-se plotar a reta para cada espécie (variável categórica).

Primeiro, os pontos são plotados. O argumento type='n' indica que não é para acrescentar nenhum ponto ao gráfico. Em seguida, os pontos são acrescentados separadamente, com a função points, a qual acrescenta pontos ao gráfico, sendo que o colchetes [espécie==0] seleciona somente os casos desejados.

Por fim, acrescentamos as retas de regressão para cada resposta a variável independente espécie. Usamos a função coef para extrair os coeficientes de interesse.

```
plot(diametro_cm,altura_m)
# Gera o gráfico sem pontos
plot(diametro_cm,altura_m,type='n')
# Acrescenta os pontos
points(diametro_cm[especie==0],altura_m[especie==0],col='blue')
points(diametro_cm[especie==1],altura_m[especie==1],col='red')
# Acrescenta as linhas
abline(coef(modelom)[1], coef(modelom)[2], col='blue')
abline(coef(modelom)[1]+coef(modelom)[3], coef(modelom)[2], col='red')
```



3.3 Métodos seleção de variáveis na regressão múltipla

3.3.1 Full model – Modelo completo

Sintaxe no software R para um modelo de regressão múltipla com três variáveis preditivas:

```
regressao=lm(y~x1+x2+x3)
summary(regressao)
```

Existem três métodos de seleção de variáveis para modelos de regressão múltipla: backward, forward e stepwise.

```
regressao=step(lm(y~x1+x2+x3),direction = 'método')
```

3.3.2 Procedimento backward

Considera todas as variáveis inicialmente, testando posteriormente, a permanência de cada uma no modelo. Se p \leq 15%, permanece no modelo (saiu do modelo não entra mais) (Riboldi, 2005).

- Passo 1) Ajustar o modelo completo de m variáveis e obter SQR_{eq}^c e σ^2 ;
- Passo 2) Para cada uma das m variáveis do modelo completo do passo 1, considerar o modelo reduzido retirando esta variável e calcular SQR_{eg}^r para obter o valor da estatística (slide 24);
- Passo 3) Achar o mínimo dos m
 valores da estatística obtidos no passo 2, denotado por
 $F_{\min};$
 - Passo 4) Seja F_{out} o valor da distribuição F com 1 e (n-m-1) gl;
 - Se $F_{min} > F_{out}$: interromper o processo e optar pelo modelo completo desta etapa;
 - Se $F_{min} < F_{out}$: voltar ao passo 1, iniciando nova etapa em que o modelo completo tem (m-1) variáveis dada a eliminação da variável cuja estatística é igual a F_{min} .

3.3.3 Procedimento forward

Inclui uma variável de cada vez, se p \leq 20%, entra no modelo. Este método não testa a permanência da variável (entrou no modelo não sai mais) (Riboldi, 2005).

- Passo 1) Ajustar o modelo reduzido de m
 variáveis e obter SQR_{eg}^c ;
- Passo 2) Para cada variável não pertencente ao modelo do passo 1, considerar o modelo completo com adição desta variável extra e calcular SQR_{eg}^r e σ^2 para obter o valor da estatística (slide 26);
- Passo 3) Achar o máximo dos valores da estatística obtidos no passo 2, denotado por F_{max} ;
 - Passo 4) Seja F_{in} o valor da distribuição F com 1 e (n-m) gl;
 - Se $F_{\rm max} > F_{\rm in}$: voltar ao passo 1, iniciando nova etapa em que o modelo reduzido tem (m+1) variáveis dada a inclusão da variável cuja estatística é igual a $F_{\rm max}$.

• Se $F_{max} < F_{in}$: interromper o processo e optar pelo modelo reduzido desta etapa;

3.3.4 Procedimento stepwise

Inclui as variáveis passo-a-passo e testa a permanência (as variáveis podem entrar e sair do modelo) (Riboldi, 2005).

- Passo 1) Ajustar o modelo reduzido de m variáveis e obter SQR_{eq}^r ;
- Passo 2) Para cada variável não pertencente ao modelo do passo 1, considerar o modelo completo com adição desta variável extra e calcular SQR_{eg}^c e σ^2 para obter o valor da estatística (slide 26);
- Passo 3) Achar o máximo dos valores da estatística obtidos no passo 2, denotado por F_{max} ;
 - Passo 4) Seja Fin o valor da distribuição F com 1 e (n-m) gl;
 - Se Fmax > Fin -> passar ao passo 5, com modelo completo composto por (m+1) variáveis as m variáveis do modelo do passo 1 e a variável cuja estatística é igual a Fmax.
 - Se Fmax < Fin -> passar ao passo 5, com modelo completo igual ao modelo do passo 1 ou encerrar o processo se no passo 8 da etapa anterior, nenhuma variável tiver sido eliminada;
- Passo 5) Ajustar o modelo completo de k variáveis sendo k igual a m ou (m+1), e obter SQR_{eq}^c e σ^2 ;
- Passo 6) Para cada uma das k
 variáveis do modelo completo do passo 5, considerar o modelo reduzido – retirando esta variável – e calcular
 SQR_{eg}^r para obter o valor da estatística;
- Passo 7) Achar o mínimo dos k
 valores da estatística obtidos no passo 6, denotado por
 F_{\min} ;
 - Passo 8) Seja F_{out} o valor da distribuição F com 1 e (n-k-1) gl;
 - Se $F_{min} > F_{out}$: não eliminar nenhuma variável e voltar ao passo 1, iniciando nova etapa com modelo reduzido com k variáveis ou encerrar o processo de no passo 4 nenhuma variável tiver sido anexada;
 - Se Fmin < Fout: eliminar a variável cuja estatística é igual a Fmin e voltar ao passo 1 iniciando nova etapa com modelo reduzido com (k-1) variáveis.

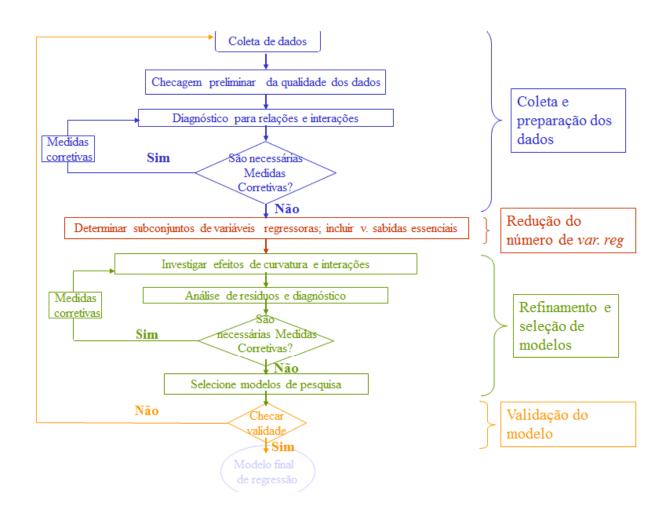


Figura 3.1: Modelagem estatística

Capítulo 4

Regressão Logística

A técnica de regressão logística é uma ferramenta estatística utilizada nas análises preditivas. O interesse em mensurar a probabilidade de um evento ocorrer é extremamente relevante em diversas áreas, como por exemplo em Marketing, Propaganda e Internet, na Aplicação da Lei e Detecção de Fraude, na Assistência Médica, com relação aos Riscos Financeiros e Seguros ou mesmo estudando a Força de Trabalho. É imprescindível elevar o conhecimento sobre quais clientes possuem maior propensão à responder o contato de marketing, quais transações serão fraudulentas, quais e-mails são *spam*, quem efetivamente fará o pagamento de uma obrigação ou mesmo qual criminoso reincidirá.¹

4.1 O modelo

O modelo de regressão logística é utilizado quando a variável dependente é binária, categórica ordenada ou mesmo categórica desordenada (quando não há relação hierárquica entre elas). Abaixo exemplificam-se algumas perguntas que podem levar a estes três tipos de variáveis.

Tabela 4.1: Tipos de variáveis

Variável dependente	Você votou na última	0 - Não; 1 - Sim
binária:	eleição?	
Variável dependente	Você concorda ou	1 - Disconcordo; 2 -
categórica ordenada:	desconcorda com o presidente?	Neutro; 3 - Concordo
Variável dependente categórica não	Se as eleições fossem hoje, em que partido você	1 - Democratas; 2 - Qualquer um; 3 -
ordenada:	votaria?	Republicanos

¹Para mais exemplos como estes sobre análises preditivas, ver SIEGEL (2017).

Fonte: Adaptado de TORRES-REYNA (2014).

Nota-se primeiramente que em sendo somente a variável dependente **binária** (0 e 1), é detectada a presença ou não de determinada característica da variável a ser estudada pelo pesquisador. Outros exemplos abrangem a qualificação dos indivíduos estaudados em sendo do sexo feminino (1) ou do sexo masculino (0), se a empresa analisada está inadimplente (1) ou não (0) no mês de referência, etc. Por outro lado, quando a variável dependente é **categórica ordenada**, há uma hierarquia determinada entre as variáveis resposta (neste caso entre Disconcordo, Neutro e Concordo). No terceiro exemplo, a variável resposta é **categórica não ordenada** não possuindo nenhuma relação de ordem entre elas (Democratas, Qualquer um, Republicanos).

A regressão logística a ser estudada neste capítulo será com a variável resposta dependente binária, portanto, tratando os grupos de interesse (variável dependente) com valores de 0 e 1. Sua funcionalidade se ocupa de prever a probabilidade de uma observação estar no grupo igual a 1 ("eventos"), em relação ao grupo igual a zero ("não eventos").

A previsão da variável dependente depende dos coeficientes logísticos e das variáveis independentes escolhidas ao modelo, lembrando que os valores sempre estarão entre 0 e 1. Convenciona-se que valores de probabilidade acima de 0,50 sejam classificados como pertencendo ao grupo de "eventos", o que pode distinguir a os resultados preditos e avaliando a precisão preditiva. Utiliza-se a razão de desigualdades - a razão entre as probabilidades dos dois resultados ou eventos: $\text{Prob}_i/(1-\text{Prob}_i)$.

Para a estimação dos coeficientes das variáveis independentes, são utilizados o valor logit ou a razão de desigualdades (HAIR et al., 2009):

$$Logit_i = ln\left(\frac{prob_{eventos}}{1 - prob_{eventos}}\right) = b_0 + b_1X_1 + \ldots + b_nX_n$$

ou

$$Logit_i = \left(\frac{prob_{eventos}}{1 - prob_{eventos}}\right) = e^{b_0 + b_1 X_1 + \dots + b_n X_n}$$

Algumas características importantes da regressão logística: a análise é semelhante à regressão linear simples/múltipla (possui a relação entre a variável dependente e a(s) variável(is) independente(s)); possui testes estatísticos diretos, incorporando variáveis métricas e não-métricas, com efeitos não-lineares; é menos afetada pela não satisfação de normalidade dos dados (pois o termo de erro da variável discreta segue a distribuição binomial) e; foi elaborada para que seja prevista a probabilidade de determinado evento ocorrer (HAIR et al., 2009).

A regressão logística utiliza a **curva logística** para assim representar a relação entre a variável dependente e as independentes. Os valores previstos portanto permanecem entre 0 e 1, sendo definidos pelos coeficientes estimados. A Figura 4.1a demonstra a relação da

curva logistica geral, enquanto a Figura 4.1b mostra uma relação pobremente ajustada dos dados reais e a Figura 4.1c demonstra um bom ajuste na relação entre as variáveis.

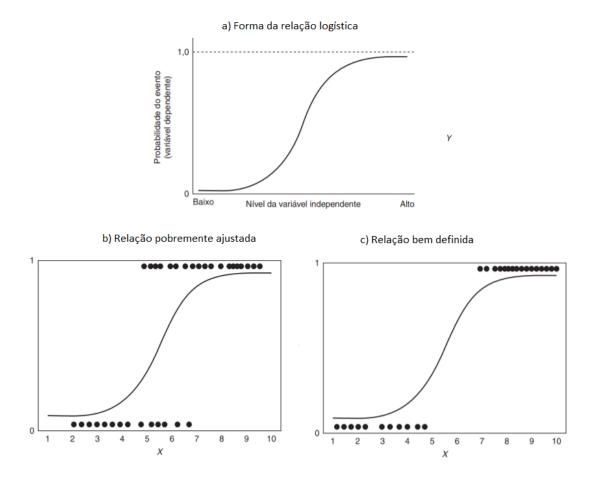


Figura 4.1: Curva logística

Fonte: Adaptado de HAIR et al. (2009).

A estimação dos coeficientes da regressão logística, ao contrário da regressão múltipla que utiliza o método dos mínimos quadrados, é efetuada pelo uso da **máxima verossimilhança**. Esta, por sua vez, busca encontrar as estimativas mais prováveis dos coeficientes e maximizar a probabilidade de que um evento ocorra. A qualidade do ajuste do modelo é avaliada pelo "pseudo" R² e pelo exame da precisão preditiva (matriz de confusão).

O valor de verossimilhança é parecido com o procedimento das somas dos quadrados da regressão múltipla, estimando o quão bem o procedimento de máxima verossimilhança se ajusta ao modelo. O ajuste da estimação do modelo dá-se pelo valor -2 vezes o logaritmo da verossimilhança (-2LL), sendo que quando menor este valor, melhor o modelo (HAIR et al., 2009).

Para otimizar o tempo do estudante, é recomendada a instalação prévia dos pacotes no RStudio a serem utilizados neste capítulo. Segue abaixo o comando a ser efetuado no console do RStudio:

```
install.packages(c("readr","mfx","caret","pRoc",
    "ResourceSelection","modEvA","foreign","stargazer"))
```

4.2 Regressão Logística Simples

Este primeiro exemplo tratará da regressão logística simples, portanto, utilizando somente uma variável independente, neste caso numérica. Os dados são originados do livro de HOSMER; LEMESCHOW (2000), tratando-se de uma amostra com 100 pessoas. A variável dependente é a ocorrência ou não (1 ou 0) de doença coronária cardíaca (CHD), associando-se com a idade (AGE) dos indivíduos, criando assim um modelo de regressão logística.

```
require(readr)
```

Carregando pacotes exigidos: readr

```
chd <- read_delim("https://goo.gl/uDAAHv",
    ";", escape_double = FALSE, col_types = cols(CHD = col_factor(levels = c())),
    trim_ws = TRUE)
summary(chd)</pre>
```

```
AGE
                     AGRP
                               CHD
               Min.
Min.
       :20.0
                       :1.00
                               0:57
1st Qu.:34.8
               1st Qu.:2.75
                               1:43
Median:44.0
               Median:4.00
Mean
       :44.4
               Mean
                       :4.48
3rd Qu.:55.0
               3rd Qu.:7.00
       :69.0
Max.
               Max.
                       :8.00
```

Observa-se na figura abaixo a dispersão dos "eventos" e dos "nao-eventos" da CHD relacionando-se com a variável idade (AGE).

```
require(ggplot2)

ggplot(chd, aes(x=AGE, y=CHD)) +
  geom_point() +
  stat_smooth(method="glm", method.args=list(family="binomial"), se=FALSE)
```

Monta-se então o modelo de regressão logística com a variável dependente CHD e a variável independente AGE. Abaixo é demonstrada a descrição da equação utilizando o comando summary() para o modelo m1 com a sintaxe básica:

```
glm(Y~modelo, family=binomial(link="logit"))
```

Assim é obtida a função de ligação estimada do modelo:

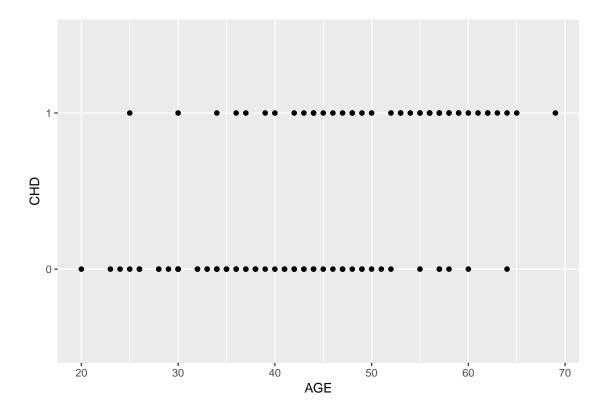


Figura 4.2: Dispersão de evendos e não-eventos

$$ln\left(\frac{prob_{CHD}}{1 - prob_{CHD}}\right) = -5,309 + 0,1109AGE$$

```
m1=glm(CHD~AGE, family = binomial(link="logit"), data = chd)
summary(m1)
```

Call:

glm(formula = CHD ~ AGE, family = binomial(link = "logit"), data = chd)

Deviance Residuals:

Min 1Q Median 3Q Max -1.972 -0.846 -0.458 0.825 2.286

Coefficients:

Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -5.3095 1.1337 -4.68 2.8e-06 ***

AGE 0.1109 0.0241 4.61 4.0e-06 ***
--Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

```
Null deviance: 136.66 on 99 degrees of freedom Residual deviance: 107.35 on 98 degrees of freedom
```

AIC: 111.4

Number of Fisher Scoring iterations: 4

Se observa o intercepto com o valor de -5,309, sendo que para a análise aqui proposta da relação entre CHD e AGE não obtém-se um significado prático para este resultado. No entanto, a variável de interesse é idade, que no modelo de regressão obteve o coeficiente de 0,1109. Pelo fato de ser positivo informa que quando a idade (AGE) se eleva, elevam-se as chances de ocorrência de CHD. De igual forma, nota-se que há significância estatística a p=0,001 na utilização da variável AGE para o modelo, mostrando que possui importância ao modelo de regressão proposto.

Por fim, o modelo é utilizado para construção da predição de todos os valores das idades de todos os indivíduos desta amostra. Para isto, será criada um novo objeto contendo somente a variável dependente do modelo (AGE) e em sequida, é criada nova coluna constando os valores preditos. Assim, pode ser plotado um gráfico completo com todas as probabilidades desta base de dados:

```
# Filtrando a idade dos indivíduos
IDADE<-chd[,1]

# Criando campo de predição para cada idade dos indivíduos
chd$PRED=predict(m1, newdata=IDADE, type="response")

# Plotando a probabilidade predita pelo modelo
require(ggplot2)
ggplot(chd, aes(x=AGE, y=PRED)) +
geom_point()</pre>
```

4.2.1 Estimando a Razão de Chances

O modelo de regressão logística, porém, traz os resultados dos estimadores na forma logarítma, ou seja, o log das chances da variável idade no modelo é 0,1109. No entanto, para uma interpretação mais enriquecida da relação da idade com o CHD é necessária a transformação deste coeficiente, ou seja, que seja efetuada a exponenciação da(s) variavel(eis) da regressão. Assim, obtém-se a razão das chances (OR - Odds Ratio em inglês) para as variáveis independentes.

Uma maneira prática de se obter a razão de chances no RStudio é utilizando o pacote mfx. Novamente o intercepto não nos interessa nesta análise mas sim a variável AGE. Como demonstrado abaixo, o resultado da razão de chances da variável AGE foi de 1,1173,

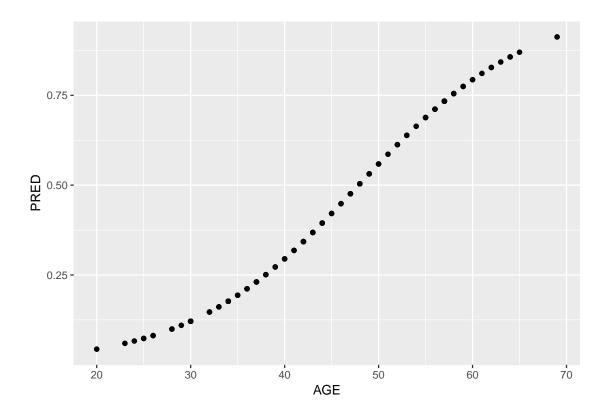


Figura 4.3: Distribuição das probabilidades preditas

o que pode assim ser interpretado: para cada variação unitária na idade (AGE), as chances de ocorrência de CHD aumentam 1,1173 vezes. Dito de outra forma, para cada variação unitária em AGE, aumentam-se 11,73% ((1,1173-1)*100) as chances da ocorrência de CHD.

```
require(mfx)
logitor(CHD~AGE,data = chd)

Call:
logitor(formula = CHD ~ AGE, data = chd)

Odds Ratio:
    OddsRatio Std. Err.    z P>|z|
AGE    1.1173    0.0269    4.61    4e-06    ***
---
Signif. codes:    0 '***'    0.001 '**'    0.05 '.'    0.1 ' ' 1
```

4.2.2 Determinando o Intervalo de Confiança

A determinação do intervalo de confiança do modelo proposto é relevante para que seja analizada a estimativa do intervalo de predição do coeficiente da variável independente, a um nível de confiança de 95%. Desta forma, em 95% dos casos, o parâmetro dos coeficientes

estará dentro deste intervalo.

De forma prática é possível determinar os intervalos de confiança com o comando confint() commo observado abaixo, sendo que o coeficiente AGE toma o valor de 1,1173, podendo variar de 1,0692 a 1,1758.

4.2.3 Predição de Probabilidades

A partir dos coeficientes do modelo de regressão logística é possível, portanto, efetuar a predição da variável categórica CHD, ou seja, saber a chance de ocorrer CHD com relação à uma determinada idade (AGE). No exemplo abaixo, primeiramente utilizamos a idade média das observações (44,38 anos), criando assim um novo data frame chamado media. Para utilizar o valor da idade média na função de regressão obtida (m1), utiliza-se a função predict(), de acordo com valor da média encontrada (data frame media). O resultado mostra que para a idade média da amostra, 44,38 anos, há uma probabilidade de 40,44% na ocorrência da doença CHD. Esta ferramenta permite também a comparação pelo pesquisador das diferentes probabilidades entre as diversas idades (variável AGE).

```
media = data.frame(AGE=mean(chd$AGE))
media

   AGE
1 44.38

media$pred.prob = predict(m1, newdata=media, type="response")
media

   AGE pred.prob
1 44.38   0.4045
```

4.2.4 Matriz de Confusão

Uma maneira prática de qualificar o ajuste do modelo de regressão logística é pela projeção do modelo na tabela de classificação (ou Matriz de Confusão). Para isto, precisa-se criar uma tabela com o resultado da classificação cruzada da variável resposta, de acordo com uma variável dicotômica em que os valores se derivam das probabilidades logísticas estimadas na regressão (HOSMER; LEMESCHOW, 2000). No entanto, é preciso definir uma regra de predição, que dirá se houve acerto ou não da probabilidade estimada com os valores reais, pois as probabilidades variam de 0 a 1 enquanto os valores reais binários possuem valores fixos de 0 "ou" 1.

É intuitivo supor que se as probabilidades aproximam-se de 1 o indivíduo estimado pode ser classificado como $\hat{Y}_i = 1$, bem como de forma contrária, se o modelo estimar probabilidades perto de 0, classificá-la como $\hat{Y}_i = 0$. Mas qual nível utilizar? Para resolver este problema, é preciso em primeiro lugar determinar um ponto de corte para classificar a estimação como 0 ou 1. Usualmente na literatura se utiliza o valor de 0,5 mas dependendo do estudo proposto pode não ser limitado a este nível (HOSMER; LEMESCHOW, 2000).

Após determinado o ponto de corte, é importante avaliar o poder de discriminação do modelo, pelo seu desempenho portanto em classificar os "eventos" dos "não eventos". Cria-se a Matriz de Confusão (vide Tabela 4.2) com as observações de Verdadeiro Positivo (VP), Falso Positivo (FP), Falso Negativo (FN) e Verdadeiro Negativo (VN) e em seguida determinam-se alguns parâmetros numéricos, a serem descritos abaixo:

Precisão: representa a proporção das predições corretas do modelo sobre o total:

$$ACC = \frac{VP + VN}{P + N}$$

onde P representa o total de "eventos" positivos (Y=1) e N é o total de "não eventos" (Y=0, ou negativo).

Sensibilidade: representa a proporção de verdadeiros positivos, ou seja, a capacidade do modelo em avaliar o evento como $\hat{Y} = 1$ (estimado) dado que ele é evento real Y = 1:

$$SENS = \frac{VP}{FN}$$

Especificidade: a proporção apresentada dos verdadeiros negativos, ou seja, o poder de predição do modelo em avaliar como "não evento" $\hat{Y} = 0$ sendo que ele não é evento Y = 0:

$$SENS = \frac{VN}{VN + FP}$$

Verdadeiro Preditivo Positivo: se caracteriza como proporção de verdadeiros positivos com relação ao total de predições positivas, ou seja, se o evento é real Y=1 dada a classificação do modelo $\hat{Y}=1$:

$$VPP = \frac{VPP}{VN + FP}$$

Verdadeiro Preditivo Negativo: se caracteriza pela proporção de verdadeiros negativos comparando-se com o total de predições negativas, ou seja, o indivíduo não ser evento Y=0 dada classificação do modelo como "não evento" $\hat{Y}=0$:

$$VPN = \frac{VN}{VN + FN}$$

Tabela 4.2: Matriz de confusão.

		Valor Observado	
Valor Estimado	$ \hat{Y}=1 \\ \hat{Y}=0 $	Y = 1 VP FN	Y = 0 FP VN

Fonte: Adaptado de FAWCETT (2006).

```
require(caret)
```

Carregando pacotes exigidos: caret

Carregando pacotes exigidos: lattice

Confusion Matrix and Statistics

```
Reference
```

Prediction 0 1 0 45 14 1 12 29

Accuracy: 0.74

95% CI: (0.643, 0.823)

No Information Rate : 0.57 P-Value [Acc > NIR] : 0.000319

Kappa : 0.467

Mcnemar's Test P-Value: 0.844519

Detection Prevalence: 0.410

Sensitivity: 0.674 Specificity: 0.789 Pos Pred Value: 0.707 Neg Pred Value: 0.763 Prevalence: 0.430 Detection Rate: 0.290 Balanced Accuracy: 0.732

'Positive' Class : 1

A matriz de confusão retoma uma excelente acurácia total do modelo em 74%, sendo que o modelo consegue acertos de 70,7% na predição de valores positivos ou dos "eventos" (29/41) e 76,3% na predição de valores negativos ou os "não eventos" (45/59).

4.2.5 Curva ROC

A Curva ROC (Receiver Operating Characteristic Curve) associada ao modelo logístico mensura a capacidade de predição do modelo proposto, através das predições da sensibilidade e da especificidade. Segundo FAWCETT (2006) esta técnica serve para visualizar, organizar e classificar o modelo com base na performance preditiva.

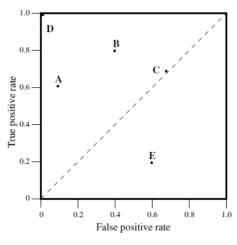
A curva ROC é produzida bi-dimensionalmente como mostra a Figura 4.4a, pela obtenção da relação entre a taxa dos verdadeiros positivos do modelo e da taxa dos falsos positivos preditos. Desta forma, o ponto inferior esquerdo (0,0) significa que não é predita uma classificação positiva; no canto oposto do gráfico (1,1) classifica os resultados incondicionalmente positivos e; o ponto (0,1) representa uma excelente classificação. Quanto mais ao noroeste do gráfico o ponto estiver melhor, assim sendo o ponto B da Figura 4.4a classifica melhor os resultados que o ponto C.

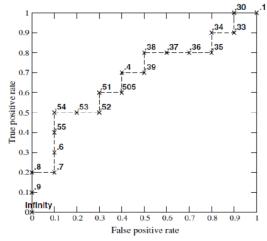
Fonte: Adaptado de FAWCETT (2006).

A Figura 4.4b mostra a formação da curva ROC para um teste com 20 instâncias, uma amostra pequena servindo portanto de exemplificação da sua criação. Para isto, o modelo de regressão logística é rodado randomicamente e a predição resultante é comparada com o valor real da variável dependente. O ponto de corte padrão, como visto anteriormente, é o valor de 0,5: acima deste valor, a predição é classificada como 1 e, abaixo dele 0. Na Figura 4.4b, a primeira predição foi 0,9 e a segunda 0,8 sendo que como estão mais perto do eixo X do gráfico, representam predições acertadas. Já para predições que não foram acertadas (como no exemplo as predições 0,7 e 0,54 por exemplo) a curva caminha para a direita. A lógica se mantém até o final da elaboração da curva.

Já na Figura 4.4c é demonstrada a elaboração do conceito da Área sobre a Curva ROC (AUC - Area Under the ROC Curve), que objetiva comparar os classificadores a partir da parformance da curva em um único valor escalar (FAWCETT, 2006). Este indicador representa a probabilidade de que o classificador efetue predições randômicas na instância positiva melhor do que na instância negativa. O indicador AUC sempre terá seu valor entre 0 e 1, sendo que quanto maior, melhor e nunca um classificador realístico deve estar abaixo de 0,5. HOSMER; LEMESCHOW (2000) sugere a utilização de AUC acima de 0,7 como aceitável. Como exemplo, a Figura 4.4c mostra que a curva ROC B tem uma melhor capacidade preditiva que a curva A.

Seguem os passos para elaboração da curva ROC.





a) O modelo gráfico da Curva ROC com 5 classificadores

b) A Curva ROC criada com o teste de 20 dados.

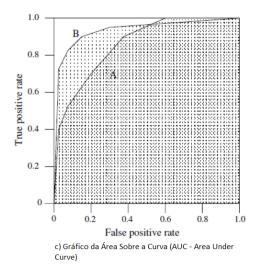


Figura 4.4: Curva ROC

Passo 1: require(pROC) roc1=plot.roc(chd\$CHD,fitted(m1))

• Passo 2:

```
plot(roc1,
    print.auc=TRUE,
    auc.polygon=TRUE,
    grud=c(0.1,0.2),
    grid.col=c("green","red"),
    max.auc.polygon=TRUE,
    auc.polygon.col="lightgreen",
```

print.thres=TRUE)

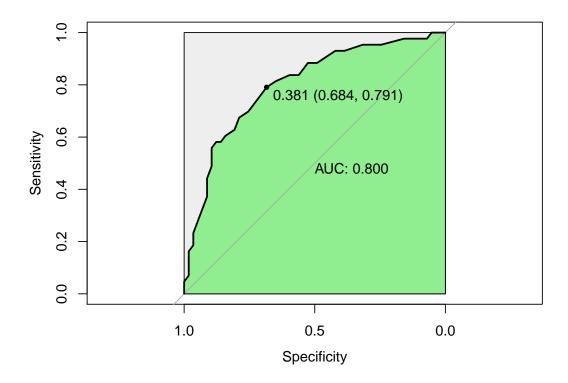


Figura 4.5: Curva Roc

4.2.6 O teste Hosmer e Lemeshow

O teste de Hosmer e Lemeshow é utilizado para demonstrar a qualidade do ajuste do modelo, ou seja, se o modelo pode explicar os dados observados. Para este teste, os dados são divididos de acordo com as probabilidades previstas em 10 grupos iguais, sendo que os números previstos e os reais são comparados com a estatística do qui-quadrado. HAIR et al. (2009) sugerem um tamanho de amostra de pelo menos 50 casos para a realização deste teste.

A hipótese nula H_0 do qui-quadrado (p=0,05) deste teste é a de que as proporções observadas e esperadas são as mesmas ao longo da amostra. Abaixo segue a estrutura do teste, sendo que o modelo apresenta dificuldade de ajuste em função de que rejeita a hipótese nula a p=0.05.

```
require(ResourceSelection)
hl=hoslem.test(chd$CHD,fitted(m1),g=10)
hl
```

Hosmer and Lemeshow goodness of fit (GOF) test

data: chd\$CHD, fitted(m1)
X-squared = 100, df = 8, p-value <2e-16</pre>

4.2.7 Pseudo \mathbb{R}^2

Semelhante ao coeficiente de determinação R^2 da regressão múltipla, a medida de pseudo R^2 representam o ajuste geral do modelo proposto. Sua interpretação, portanto, é semelhante à regressão múltipla. Abaixo segue o cálculo do pseudo R^2 :

$$R^{2}_{LOGIT} = \frac{-2LL_{nulo} - (-2LL_{modelo})}{-2LL_{nulo}}$$

Lembrando que o valor -2LL representa -2 vezes o logaritmo do valor de verossimilhança, onde a verossimilhança do modelo nulo é comparado com o modelo completo. Abaixo mostra-se o código para calcular os indicadores, sendo que constam as medidas de pseudo ${\bf R}^2$ estipuladas por Cox e Snell, Nagelkerke e McFadden.

require(modEvA)
RsqGLM(m1)

\$CoxSnell

[1] 0.2541

\$Nagelkerke

[1] 0.341

\$McFadden

[1] 0.2145

\$Tjur

[1] 0.2706

\$sqPearson

[1] 0.2726

4.3 Regressão Logística Múltipla

O exemplo abaixo abordado foi extraído de TORRES-REYNA (2014), onde observase o banco de dados criado chamado mydata, possuindo as variáveiscountry, year, y, y_bin, x1, x2, x3 eopinion. A variável dependente é y_bin, da qual foi categorizada entre 0 e 1 conforme a ocorrência de valores negativos emy. As variáveis independentes do modelo serãox1, x2 ex3.

require(foreign)

Carregando pacotes exigidos: foreign

```
mydata <- read.dta("http://dss.princeton.edu/training/Panel101.dta")
summary(mydata)</pre>
```

```
country
             year
                                                  y_bin
                                                                   x1
                               У
                :1990
                                :-7.86e+09
                                             Min.
                                                     :0.0
                                                                    :-0.568
A:10
        Min.
                        Min.
                                                             Min.
                        1st Qu.: 2.47e+08
B:10
        1st Qu.:1992
                                              1st Qu.:1.0
                                                             1st Qu.: 0.329
C:10
        Median:1994
                        Median: 1.90e+09
                                             Median:1.0
                                                             Median : 0.641
D:10
        Mean
                :1994
                        Mean
                               : 1.85e+09
                                             Mean
                                                     :0.8
                                                             Mean
                                                                    : 0.648
E:10
        3rd Qu.:1997
                        3rd Qu.: 3.37e+09
                                              3rd Qu.:1.0
                                                             3rd Qu.: 1.096
F:10
                :1999
                                : 8.94e+09
                                                     :1.0
                                                                    : 1.446
        Max.
                        Max.
                                             Max.
                                                             Max.
G:10
      x2
                        хЗ
                                         opinion
       :-1.622
                         :-1.165
                                    Str agree:20
Min.
                  Min.
1st Qu.:-1.216
                  1st Qu.:-0.079
                                    Agree
                                              :15
Median :-0.462
                  Median : 0.514
                                    Disag
                                              :19
       : 0.134
                         : 0.762
Mean
                  Mean
                                    Str disag:16
3rd Qu.: 1.608
                  3rd Qu.: 1.155
       : 2.530
                         : 7.169
Max.
                  Max.
```

Utiliza-se uma função para Modelos Lineares Generalizados (glm - em inglês Generalized Linear Models), determinando a variável dependente (y_bin), as variáveis independentes (x1+x2+x3), a base de dados a ser utilizada (data=mydata) e a família dos modelos (family = binomial(link="logit")).

Abaixo os resultados da estimação do modelo utilizando o comando summary. Observase que os valores estimados mostram os coeficientes em formato logarítmo de chances. Assim, quando x3 eleva-se em 1 (uma) unidade, o log das chances esperado para x3 altera-se em 0,7512. Neste ponto, observa-se que as três variáveis independentes possuem efeitos positivos para determinação das chances do preditor ser igual a 1, caso contrário constariam com sinal negativo. A coluna Pr(>|z|) traz os p-valores das variáveis indicando o teste da hipótese nula. Como resultado a variável x3 revelou significância estatística a 10% (\$<\$0,10), no entanto o valor usual para considerá-la estatísticamente significante é 5% (0,05). Para fins de explanação do modelo, neste trabalho, serão efetuadas as demais análises do modelo de forma explicativa.

```
logit=glm(y_bin~x1+x2+x3, data=mydata, family = binomial(link="logit"))
summary(logit)
```

```
Call:
glm(formula = y_bin ~ x1 + x2 + x3, family = binomial(link = "logit"),
    data = mydata)
```

Deviance Residuals:

```
Min 1Q Median 3Q Max -2.028 0.235 0.554 0.702 1.084
```

Coefficients:

	Estimate Std.	Error z	value	Pr(> z)
(Intercept)	0.426	0.639	0.67	0.505
x1	0.862	0.784	1.10	0.272
x2	0.367	0.308	1.19	0.234
x3	0.751	0.455	1.65	0.099 .

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

Null deviance: 70.056 on 69 degrees of freedom Residual deviance: 65.512 on 66 degrees of freedom

AIC: 73.51

Number of Fisher Scoring iterations: 5

```
require(stargazer)
stargazer(logit, title="Resultados", type = "text")
```

Resultados

Depend	ent	vari	able	:	

	y_bin
x1	0.862 (0.784)
x2	0.367 (0.308)
х3	0.751* (0.455)
Constant	0.426 (0.639)

```
Observations 70
Log Likelihood -32.760
Akaike Inf. Crit. 73.510
```

```
Note: *p<0.1; **p<0.05; ***p<0.01
```

A razão de chances (OR - odds ratio em inglês) estimada no modelo terá de ser transformada por estar apresentada na forma logarítma conforme o modelo de regressão logística o estima. Assim, utiliza-se o pacote mfx para efetuar esta transformação para todo o modelo de forma automatizada (logitor(y_bin~x1+x2+x3,data=mydata)):

```
require(mfx)
logitor(y bin~x1+x2+x3,data=mydata)
Call:
logitor(formula = y_bin ~ x1 + x2 + x3, data = mydata)
Odds Ratio:
   OddsRatio Std. Err.
                          z P>|z|
                 1.856 1.10 0.272
x1
       2.367
                 0.445 1.19 0.234
x2
       1.443
       2.120
                 0.964 1.65 0.099 .
xЗ
                0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Signif. codes:
```

O resultado acima evidencia que para uma alteração em 1 (uma) unidade em x3, a chance de que y seja igual a 1 aumenta em 112% ((2,12-1)*100). Dito de outra forma, a chance de y=1 é 2,12 vezes maior quando x3 aumenta em uma unidade (sendo que aqui mantêm-se as demais variáveis independentes constantes).

Como visto, para cada variação unitária em x3 o log das chances varia 0,7512. É possível estimar, portanto, a alteração das chances em função das médias dos valores de cada variável x1 e x2, e utilizar como exemplo os valores de 1, 2 e 3 para x3, para assim alcançar os preditores do log das chances nesta simulação, como segue abaixo:

Para facilitar a interpretação do modelo, se torna mais fácil depois de transformado a sua exponenciação dos coeficientes logísticos utilizando o comando exp(coef(logit)). Desta forma, para cada incremento unitário em x2 e mantendo as demais variáveis constantes, conclui-se que é 1,443 vezes provável que y seja igual a 1 em oposição a não ser (igual a zero), ou seja, as chances aumentam em 44,30%.

```
(Intercept) x1 x2 x3
1.531 2.367 1.443 2.120
```

O intervalo de confiança do modelo pode ser exposto utilizando o comando confint para os coeficientes estimados, como segue abaixo:

```
exp(cbind(OR=coef(logit), confint(logit)))
```

```
OR 2.5 % 97.5 % (Intercept) 1.531 0.4387 5.625 x1 2.367 0.5129 11.675 x2 1.443 0.8041 2.738 x3 2.120 1.0039 5.719
```

A partir do modelo logístico, podemos realizar **predições das probabilidades** de se encontrar o resultado y=1 conforme visto acima. Para isto, como exercício utilizaremos as médias das observações de cada variável independente do modelo. Em primeiro lugar deve ser criado um data.frame com os valores médios, como segue:

```
x1 x2 x3
1 0.648 0.1339 0.7619
```

Utiliza-se o comando predict() para predição do modelo, como segue abaixo, informando o objeto criado com a equação do modelo (logit), a base de dados com as condições dos valores médios (allmean) e o tipo de teste requerido ("response") para predizer as probabilidades. Como resultado, o modelo informa que constando os valores médios das variáveis independentes, obtêm-se a probabilidade de 83% em y se constituir igual a 1.

```
allmean$pred.prob = predict(logit, newdata=allmean, type="response")
allmean
```

```
x1 x2 x3 pred.prob
1 0.648 0.1339 0.7619 0.8329
```

4.3.1 Método Stepwise

O método Stepwise auxilia o pesquisador em selecionar as variáveis importantes ao modelo, sendo que podem ser utilizadas nas direções "both", "backward", "forward". Este método, por sua vez, utiliza o Critério de Informação de Akaike (AIC - Akaike Information Criterion) na combinação das variáveis dos diversos modelos simulados para selecionar o modelo mais ajustado. Quanto menor o AIC, melhor o ajuste do modelo. O AIC é calculado da seguitne forma:

$$AIC = -2log(L_p) + 2[(p+1) + 1]$$

onde L_p é a função de máxima verossimilhança e p é o número de variáveis explicativas do modelo. Segue o código para execução no console:

```
step(logit, direction = 'both')
Start: AIC=73.51
y_bin \sim x1 + x2 + x3
      Df Deviance AIC
- x1
      1
           66.7 72.7
- x2
      1 67.0 73.0
<none>
           65.5 73.5
- x3 1 69.4 75.4
Step: AIC=72.74
y_bin \sim x2 + x3
      Df Deviance AIC
- x2
       1 67.3 71.3
<none>
           66.7 72.7
+ x1 1
           65.5 73.5
- x3 1 70.0 74.0
Step: AIC=71.33
y_bin \sim x3
      Df Deviance AIC
       67.3 71.3
<none>
- x3 1 70.1 72.1
+ x2 1 66.7 72.7
+ x1 1 67.0 73.0
Call: glm(formula = y_bin ~ x3, family = binomial(link = "logit"),
   data = mydata)
Coefficients:
(Intercept)
                   x3
     1.134
               0.487
Degrees of Freedom: 69 Total (i.e. Null); 68 Residual
Null Deviance:
                  70.1
Residual Deviance: 67.3 AIC: 71.3
```

9.292 12.318 29.860

4.3.2 VIF - Variance Inflation Factor

Os problemas de multicolinearedade nos modelos de regressão, ou seja, as relações entre as variáveis do modelo, podem prejudicar a capacidade preditiva do mesmo. Nas palavras de HAIR et al. (2009, p. 191), "multicolinearidade cria variância "compartilhada" entre variáveis, diminuindo assim a capacidade de prever a medida dependente, bem como averiguar os papéis relativos de cada variável independente". Para resolver esta questão, utiliza-se o teste do fator de inflação da variância (VIF - Variance Inflation Factor), índice o qual não deve ficar abaixo de 10 para representar baixo problema de multicolinearidade segundo RAWLINGS; PANTULA; DICKEY (1998).

```
require(faraway)
vif(logit)

x1 x2 x3
```

4.4 Regressão Logística Múltipla com variável categórica

Agora segue um exemplo de regressão logística utilizando uma variável dependente categórica juntamente com variáveis numéricas. Trata-se de uma base de dados em que o interesse é descobrir a probabilidade de um aluno ser admitido no vestibular com base no ranqueamento de escola em que estudou no ensino médio, bem como nas notas do aluno nas provas do Gpa (Grade Point Average - uma nota de performance dos alunos nos Estados Unidos) e do Gre (Graduate Record Examinations - exame padrão que qualifica o estudante para o ensino superior nos Estados Unidos). Seguem as variáveis.

- admin: Variável dependente = 0 (não admitido) e 1 (admitido)
- Rank: Variável independente = ranking da escola de proveniência do candidato
- Gre: Variável independente = exames prévios do candidato.
- Gpa: Variável independente = exames prévios do candidato.

Abaixo seguem os resultados do modelo, partindo-se do carregamento dos dados. É observado que as variáveis **gre** e **gpa** obtiveram significância estatística em 10%, bem como rank2, já rank3 e rank4 obtiveram p=0,001. A variância do modelo nulo ficou em 499,98 e com a inclusão das variáveis ao modelo baixou para 458,52, o que mostra que contribuíram para explicação da variável dependente.

```
# Carregando o arquivo
require(readr)
binary <- read.csv("http://www.karlin.mff.cuni.cz/~pesta/prednasky/NMFM404/Data/binary.c
# Transformando a variável rank em categórica
binary$rank <- factor(binary$rank)</pre>
```

```
# Determinando a regressão
mylogit <- glm(admit ~ gre + gpa + rank, data = binary,</pre>
            family = binomial(link="logit"))
# Resultado
summary(mylogit)
Call:
glm(formula = admit ~ gre + gpa + rank, family = binomial(link = "logit"),
   data = binary)
Deviance Residuals:
  Min
          1Q Median
                        3Q
                              Max
-1.627 -0.866 -0.639
                     1.149
                            2.079
Coefficients:
          Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -3.98998
                    1.13995 -3.50 0.00047 ***
           0.00226
                    0.00109 2.07 0.03847 *
gre
          gpa
rank2
          -1.34020 0.34531 -3.88 0.00010 ***
rank3
rank4
          Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
   Null deviance: 499.98 on 399 degrees of freedom
Residual deviance: 458.52 on 394 degrees of freedom
AIC: 470.5
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

Utilizando o teste de análise de variância anova pode-se observar a variância com o modelo nulo (500) e à medida que as variáveis explicativas foram sendo incluídas, estas reduziram a variância do modelo para 459, contribuindo para o modelo.

```
anova(mylogit, test = "Chisq")
```

Analysis of Deviance Table

Model: binomial, link: logit

Response: admit

Terms added sequentially (first to last)

```
Df Deviance Resid. Df Resid. Dev Pr(>Chi)
NULL
                        399
                                   500
           13.92
                        398
                                   486
                                        0.00019 ***
      1
gre
                                   480
      1
            5.71
                        397
                                        0.01685 *
gpa
           21.83
                        394
                                   459
                                        7.1e-05 ***
rank
      3
                0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Signif. codes:
```

Caso seja interessante comparar diversos modelos de regressão com variáveis explicativas distintas, estes podem ser comparados no teste de variância anova. Utilizando a função update pode ser criada uma nova regressão com base na regressão anterior (mylogit) e é excluído do modelo a variável gre para exemplificar. Após, é efetuado novamente o teste anova, agora comparando os dois modelos, como segue abaixo. Evidencia-se que a exclusão da variável gre causou elevaçãod a variância do modelo para 463, piorando portanto a capacidade do modelo pois espera-se sempre reduções na sua variância.

```
# Criação de novo modelo com base no anterior
mylogit2=update(mylogit,~. - gre)
#
anova(mylogit,mylogit2, test = "Chisq")
```

Analysis of Deviance Table

Voltando ao modelo determinado anteriormente (mylogit), observa-se que os parâmetros da regressão logística proposta utilizando todas as variáveis foram assim determinados:

$$ln\left(\frac{prob_{admit}}{1-prob_{admit}}\right) = -3,98998 + 0.00226 gre + 0,80404 gpa - 0,67544 rank 2 - 1,34020 rank 3 - 1,55146 rank 4 rank 2 - 1,80404 gpa - 0,67544 rank 2 - 1,80404 gpa - 0,$$

Determinam-se os coeficientes exponenciados (as razões de chance) para cada variável do modelo, bem como seus intervalos de confiança:

A leitura dos resultados, para as variáveis numéricas continua sendo a mesma. Com relação ao resultado para a variável **gre**, para cada aumento unitário nesta variável, mantendose as demais constantes, elevam-se em 0,23% ((1,0023-1)*100) as chances de que o aluno seja aprovado no vestibular. Já para a cada variação unitária na variável **gpa**, aumentam em 123,45% ((2,2345-1)*100). Dito de outra forma, para cada elevação em **gpa** aumentam 2,2345 vezes as chances em ser aprovado no vestibular. Tais resultados vão de encontro ao conceito teórico de que quanto melhor a nota do aluno em exame prévios maiores as chances de este aluno passar no vestibular.

Outra questão é sobre o ranking das escolas que os alunos estudaram. Será que aqueles que estudaram em escolas melhores ranqueadas possuem mais chances de passar no vestibular? A variável **rank** traz esta análise, sendo que como é uma variável categórica (pois retoma as categorias de 1 a 4), as comparações das chances de que o aluno passe no vestibular são comparadas com a escola de ranking 1.

Desta forma, em sendo o aluno proveniente de uma escola de ranking 2, diminuem-se as chances em 49,11% ((0,5089-1)\$\$100) de que o aluno passe no vestibular. Já para os alunos que estudaramem uma escola de ranking* 3 tem 73,82% ((0,2618-1)*100) menos chances de passar no vestibular. Pioram ainda mais as chances de passar no vestibular daqueles alunos que estudaram em uma escola de ranking 4: diminuem-se em 78,81% as chances de que estes aluno passe no vestibular, mantidas as demais veriáveis.

Predição das probabilidades: a partir da equação de regressão logística auferida neste exemplo, qual é a probabilidade de que um aluno que tirou nota no **gre** de 700, no **gpa** de 3,67 e estudou em uma escola de *ranking* 1 passe no vestibular? Nota-se que a probabilidade de que este aluno passe no vestibular é de 63,32%. Segue a predição para estas variáveis:

```
gre gpa rank prob
1 700 3.67 1 0.6332
```

Comparando com um aluno que tirou as mesmas notas no \mathbf{gre} e \mathbf{gpa} , mas que estudou em uma escola rankinq 4:

```
gre gpa rank prob
1 700 3.67 4 0.2679
```

Agora será efetuada a predição comparando-se os rankings das escolas. No exemplo abaixo, é criada uma base de dados com as notas médias dos alunos nas variáveis **gre** e **gpa**, intercalando com todos os rankings das escolas onde estudaram. Após criar a tabela, esta é unida com as colunas de predição dos valores da equação. São renomeadas as variáveis de fit para prob e se.fit para se.prob, no primeiro caso pois obteiveram-se as probabilidades de cada caso e no segundo caso incluiu-se o erro padrão (se: standart error) desta probabilidade. Com este erro padrão calculou-se os limites inferior (LL: low level) e superior (UL: upper level) no intervalo de confiança de 95%.

```
# Criação da tabela
novosdados=with(binary,
                data.frame(gre=mean(gre),
                           gpa=mean(gpa),
                           rank=factor(1:4)))
# Incluindo a predição dos valores
novosdados=cbind(novosdados,predict(mylogit,
                                    newdata=novosdados,
                                    type="response",
                                    se.fit=TRUE))
# Renomeando as variáveis
names(novosdados)[names(novosdados)=='fit']="prob"
names(novosdados)[names(novosdados)=='se.fit']="se.prob"
# Estimando os intervalos de confiança
novosdados$LL=novosdados$prob-1.96*novosdados$se.prob
novosdados$UL=novosdados$prob+1.96*novosdados$se.prob
# Vizualização dos dados
novosdados
```

```
gre gpa rank prob se.prob residual.scale LL UL 1 587.7 3.39 1 0.5166 0.06632 1 0.38662 0.6466
```

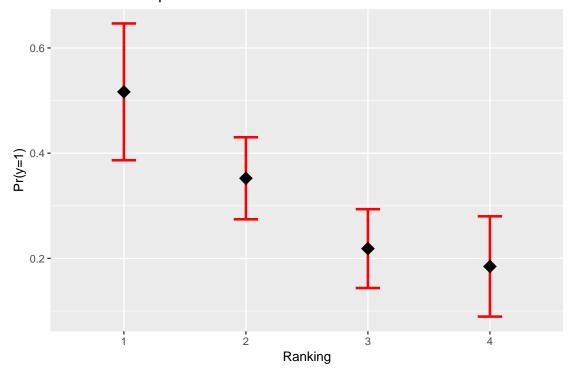
```
      2 587.7 3.39
      2 0.3523 0.03978
      1 0.27431 0.4303

      3 587.7 3.39
      3 0.2186 0.03825
      1 0.14364 0.2936

      4 587.7 3.39
      4 0.1847 0.04864
      1 0.08934 0.2800
```

```
require(ggplot2)
ggplot(novosdados, aes(x=rank,y=prob))+
  geom_errorbar(aes(ymin=LL, ymax=UL), width=0.2,lty=1,lwd=1,col="red")+
  geom_point(shape=18, size=5, fill="black")+
  scale_x_discrete(limits=c("1","2","3","4"))+
  labs(title="Probabilidades preditas", x="Ranking",y="Pr(y=1)")
```

Probabilidades preditas



4.5 Exercícios

- 1. O Titanic foi um famoso navio britânico construído a partir de março de 1909 e lançado ao mar em maio de 1911. Em sua viagem inaugural em 10 de abril de 1912, cujo objetivo era partir de Southampton para Nova Iorque passando pela França e Irlanda, colidiu com um iceberg às 23h40min do dia 14 de abril. Baixe os dados do acidente em https://vincentarelbundock.github.io/Rdatasets/csv/COUNT/titanic.csv. Esta base de dados possui as seguintes informações:
 - survived: informa se o tripulante sobreviveu ou não ("yes", "no");
 - class: representa a classe em que viajavam os tripulantes ("1st class", "2nd class" e "3rd class").

- age: variável que separa entre as crianças ("child") e adultos ("adults")
- sex: fator com o sexo do tripulante ("women", "man")
- 1.1. Importe os dados para um objeto denominado *titanic* (lembre-se de determinar que as variávei sejam fatores).
- 1.2 Crie uma nova a variável sobreviveu a partir de survived com fatores binários 0 e 1 (1 para os sobreviventes).
- 1.3 Crie um modelo de regressão logística para descobrir a probabilidade de sobrevivência dos tripulantes (variável dependente sobreviveu) em relação às variáveis class, age, sex. Utilize o comando summary com o modelo. Declare a significância estatística das variáveis.
- 1.4 Com base na resposta anterior, disserte sobre a direção do sinal do *log* da probabilidade de sobrevivência com relação à cada variável independente do modelo. Quem estava na primeira classe tinha maiores chances de sobrevivência, ou na terceira? Adultos ou crianças tinham melhores chances de sobreviver, homens ou mulheres?
- **1.5** Transforme os coeficientes encontrados em Razão de Chances (OR Odds Ratio), bem como verifique os intervalos de confiança.
- 1.6 Com base na resposta anterior, disserte sobre a razão das chances (OR) de cada variável independente do modelo.
- 1.7 Efetue a predição da probabilidade de sobrevivência de uma tripulante do sexo feminino, adulta e que viajava na primeira classe do navio.
- 1.8 Efetue a predição da probabilidade de sobrevivência de um tripulante do sexo masculino, adulto e que viajava na terceira classe do navio.
 - 1.9 Crie a matriz de confusão e a Curva ROC para o modelo, avaliando seus dados.
 - 1.10 Efetue o teste de Hosmer e Lemeschow para o modelo.
 - **1.11** Encontre as medidas de pseudo R^2 .
- ${\bf 1.12}$ Utilize o método **Stepwise** (direction='both') no modelo completo e avalie se as variáveis devem permanecer no modelo ou alguma deve sair.

Referências

FAWCETT, T. An introduction to ROC analysis. Pattern Recognition Letters, [s.l.], 2006.

HAIR, J. F. et al. Análise Multivariada de Dados. São Paulo: Bookman, 2009.

 $\rm HOSMER,~D.~W.;~LEMESCHOW,~S.~{\bf Applied~Logistic~Regression}.~New~York:~Wiley,~2000.$

RAWLINGS, J. O.; PANTULA, S. G.; DICKEY, D. A. **Applied Regression Analysis: A Research Tool**. New York: Springer, 1998.

SIEGEL, E. Análise Preditiva: O poder de prever quem vai clicar, comprar, mentir ou morrer. Rio de Janeiro: Alta Books, 2017.