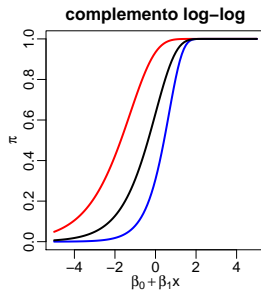
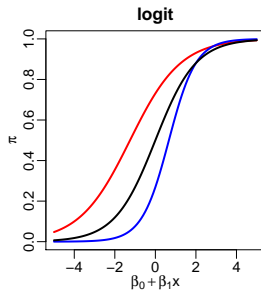
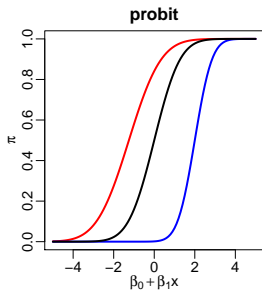


MLG – Regresión Logística



Contenido

1

- Introducción : ejemplos
- Componentes de un modelo lineal generalizado
- Estimación
- Bondad de ajuste: devianza. Inferencia
- Residuales

2

- Modelos dosis-respuesta
- Regresión logística
- Ejemplos

a) Respuesta binaria

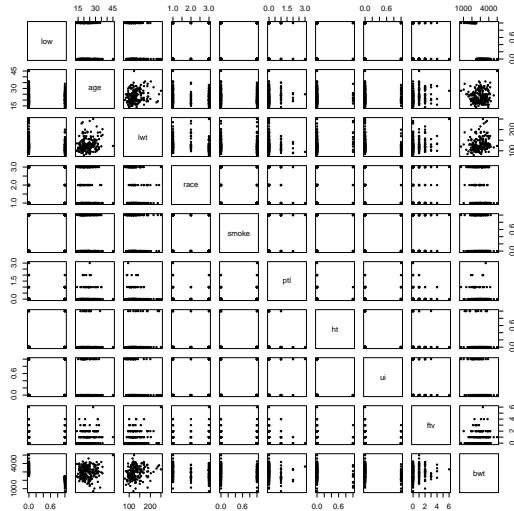
Ejemplo: Problema de recién nacidos bajos de peso¹

El problema de niños con bajo peso al nacer es una condición que preocupa a los médicos pues constituye un grupo de alto riesgo para los problemas de mortalidad infantil y tasas de defectos al nacer. El comportamiento de la madre durante el embarazo (dieta, hábitos de fumar, cuidado prenatal, etc.) puede afectar de manera importante el tiempo de gestación y en consecuencia el peso normal de un niño al nacer.

variable	código	etiqueta	
Código de identificación:	...	id	
Bajo peso:	0 = peso \geq 2500 gr. 1 = peso < 2500 gr.	low	=====
Edad de la madre:	años	age	obs id low age lwt race smoke ptl ht ui ftv bwt
Peso antes de la última menstruación:	libras	lwt	-----
Raza:	1=blanca;2=negra;3=otra	race	1 4 1 28 120 3 1 1 0 1 0 709
Hábito del fumar durante embarazo:	1=sí;0=no	smoke	2 10 1 29 130 1 0 0 0 1 2 1021
Historia de labor prematura	0=ninguna;1=una;etc.	ptl	3 11 1 34 187 2 1 0 1 0 0 1135
Historia de hipertensión	1=sí;0=no	ht	4 13 1 25 105 3 0 1 1 0 0 1330
Irritación uterina:	1=sí;0=no	ui	5 15 1 25 85 3 0 0 0 1 0 1474
Número de visitas médicas durante el primer trimestre:	0=ninguna;1=una;etc.	ftv	6 16 1 27 150 3 0 0 0 0 0 1588
Peso al nacer:	gramos	bwt
			=====

¹ Hosmer and Lemeshow (1989)

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

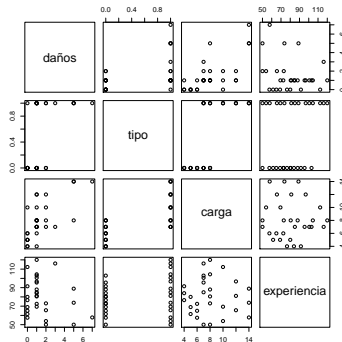


b) Respuesta conteo

Ejemplo: Número de daños a aviones²

Durante la guerra de Vietnam la marina de los E. U. usó varios tipos de aviones de ataque, en ocasiones en acciones de baja altura contra construcciones y transporte. Dos de los aviones fueron los A4 construcción de McDonnell Douglas y los A6 de Grumman. Se tiene una muestra de 30 misiones de ataque donde intervinieron ambos tipos de bombarderos. La variable respuesta de interés y es la cantidad de lugares donde se infligieron daños al avión. Las variables explicativas son: x_1 indicadora del tipo de avión ($A4=0$, $A6=1$); x_2 la carga en toneladas del avión; y x_3 la experiencia en meses de la tripulación.

obs	y	x1	x2	x3	obs	y	x1	x2	x3
1	0	0	4	91.5	16	3	1	7	116.1
2	1	0	4	84.0	17	1	1	7	100.6
3	0	0	4	76.5	18	1	1	7	85.0
4	0	0	5	69.0	19	1	1	10	69.4
5	0	0	5	61.5	20	2	1	10	53.9
6	0	0	5	80.0	21	0	1	10	112.3
7	1	0	6	72.5	22	1	1	12	96.7
8	0	0	6	65.0	23	1	1	12	81.1
9	0	0	6	57.5	24	2	1	12	65.6
10	2	0	7	50.0	25	5	1	8	50.0
11	1	0	7	103.0	26	1	1	8	120.0
12	1	0	7	95.5	27	1	1	8	104.4
13	1	0	8	88.0	28	5	1	14	88.9
14	1	0	8	80.5	29	5	1	14	73.7
15	2	0	8	73.0	30	7	1	14	57.8



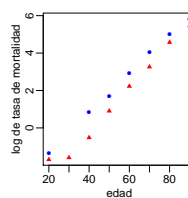
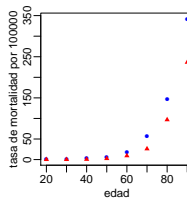
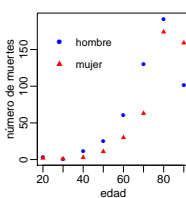
²Montgomery et al. (2002)

b) Respuesta conteo

Ejemplo: Muertes por diabetes³

En este ejemplo se estudia el número de muertes debida a la diabetes en una región de Australia en 2002. Como variables independientes se consideran el sexo x_1 y la edad x_2 .

gender	age	deaths	popn	l_popn	agemidpt	gender	age	deaths	popn	l_popn	agemidpt
Male	<25	3	1141100	13.94750	20	Female	<25	2	1086408	13.89839	20
Male	25-34	0	485571	13.09308	30	Female	25-34	1	489948	13.10205	30
Male	35-44	12	504312	13.13095	40	Female	35-44	3	504030	13.13039	40
Male	45-54	25	447315	13.01102	50	Female	45-54	11	445763	13.00754	50
Male	55-64	61	330902	12.70958	60	Female	55-64	30	323669	12.68748	60
Male	65-74	130	226403	12.33007	70	Female	65-74	63	241488	12.39458	70
Male	75-84	192	130527	11.77934	80	Female	75-84	174	179686	12.09897	80
Male	85+	102	29785	10.30176	90	Female	85+	159	67203	11.11547	90



³Jong and Heller (2008)

c) Respuesta continua

Ejemplo: Problema reclamos por daños personales⁴

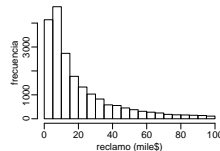
El problema considera 22036 acuerdos por seguro por daños personales en accidentes. La respuesta, total acordado, sigue aproximadamente una distribución *gamma*, que no admite transformaciones básicas.

Variables:

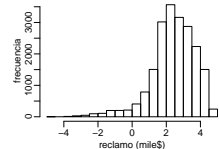
```
total      settled amount
injl, ..., injury 1,..., injury 5 coded as
1 = no injury
2, 3, 4, 5 = injury severities
6 = fatal injury
9 = not recorded
legrep     legal representation
(0 = no, 1 = yes)
accmonth   accident month
(1=July 1989,..., 120=June 1999)
repmonth   reporting month (as above)
finmonth   finalization month (as above)
op_time    operational time
```

Reclamos por daños personales

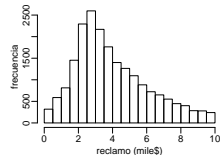
escala original



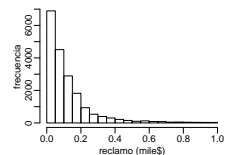
escala logarítmica



escala raíz cuadrada



escala recíproca



⁴Jong and Heller (2008)

c) Respuesta continua

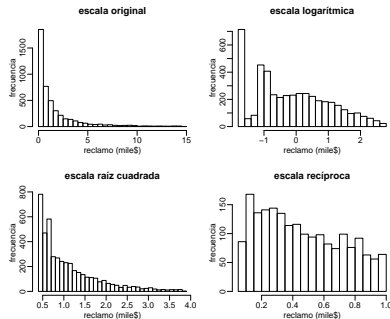
Ejemplo: Problema reclamos por daños a vehículos⁵

El problema considera 4624 pólizas de seguro por daños a vehículos en accidentes con al menos una reclamación. La respuesta, total pagado, sigue aproximadamente una distribución *inversa gaussiana*, que no admite transformaciones básicas.

Variables:

veh_value	vehicle value, in \$10,000s
exposure	0-1
clm	occurrence of claim (0 = no, 1 = yes)
numclaims	number of claims
claimst0	claim amount (0 if no claim)
veh_body	vehicle body, coded as
	BUS
	CONVT = convertible
	COUPE
	HBACK = hatchback
	MIBUS = minibus
	PANVN = panel van
	STNWG = station wagon
	TRUCK
	etc.
veh_age	age of vehicle:
	1 (youngest), 2, 3, 4
gender	gender of driver: M, F
area	driver's area of residence:
	A, B, C, D, E, F
agecat	driver's age category:
	1 (youngest), 2, 3, 4, 5, 6

Reclamos por daños a vehículos



⁵Jong and Heller (2008)

Familia Exponencial de Distribuciones

La variable aleatoria Y se dice que es miembro de la *familia exponencial de distribuciones* si su función de densidad de probabilidad, $f(y; \theta)$, puede expresarse como

$$f(y; \theta) = \exp \{ a(y)b(\theta) + c(\theta) + d(y) \} \quad (1)$$

si $a(y) = y$, la distribución anterior (1) se dice estar en su *forma canónica* y a $b(\theta)$ se le llama el *parámetro natural* de la distribución.

Ejemplos:

$$\text{Binomial : } f(y; n, p) = \begin{cases} \binom{n}{y} \pi^y (1 - \pi)^{n-y} \\ \exp \{ y \log \pi - y \log(1 - \pi) + n \log(1 - \pi) + \log \binom{n}{y} \} \end{cases}$$

$$\text{Poisson : } f(y; \lambda) = \begin{cases} \frac{\lambda^y e^{-\lambda}}{y!} \\ \exp \{ y \log \lambda - \lambda - \log y! \} \end{cases}$$

$$\text{Normal : } f(y; \mu, \sigma^2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\mu}{\sigma}\right)^2} \\ \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\sigma^2} + \frac{y\mu}{\sigma^2} - \frac{\mu^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2} \log(2\pi\sigma^2) \right\} \end{cases}$$

También incluye otras distribuciones como la *gamma*, la *lognormal*, la *gaussiana inversa*, etc.

Reparametrización

Sea y v. a. con f. d. p. $f(y, \theta)$ miembro de la familia exponencial. Entonces como alternativa a la expresión (1), f se puede escribir como

$$f(y; \theta) = \exp \left\{ [y\theta - b(\theta)] \frac{1}{a(\phi)} + c(y; \phi) \right\} \quad (2)$$

donde θ es el parámetro *natural o canónico* de localización y ϕ el parámetro de dispersión.

Distribución	Soporte	θ	$a(\cdot)$	$b(\cdot)$	$c(\cdot)$	$\mu = \mathbb{E}[Y]$
Binomial	$[1, n]/n$	$\log\left(\frac{p}{1-p}\right)$	$1/n$	$\log(1+e^\theta)$	$\log\left[\binom{n}{ny}\right]$	$e^\theta/(1+e^\theta)$
Poisson	$[0, \infty]$	$\log(\lambda)$	1	e^θ	$-\log y!$	e^θ
Binomial Negativa	$[0, \infty]$	$\log(1-p)$	1	$-r \log(1-e^\theta)$	$\log\left[\binom{r+y-1}{y}\right]$	$re^\theta/(1-e^\theta)$
Normal	$(-\infty, \infty)$	μ	ϕ	$\theta^2/2$	$-\frac{1}{2}(y^2/\phi - \log(2\pi\phi))$	θ
Gamma	$(0, \infty)$	$-\beta$	ϕ	$\log(-\theta)$	$(\phi^{-1}-1)[\log(y\phi)+\log(\phi)] - \log \Gamma(\phi^{-1})$	$1/\theta$
Gaussiana Inversa	$(0, \infty)$	$-1/2\mu^2$	ϕ	$-(-2\theta)^{1/2}$	$-\frac{1}{2}[1/y\phi - \log(-2\pi\phi y^3)]$	$(-2\theta)^{-1/2}$

Función de verosimilitud, *score*, etc.

Se define la *función de verosimilitud* por

$$L(\theta; y) = f(y; \theta) = \exp \{ a(y)b(\theta) + c(\theta) + d(y) \}$$

Y la *función log-de-verosimilitud* por

$$\ell(\theta; y) = \log L(\theta; y) = a(y)b(\theta) + c(\theta) + d(y)$$

Se define la *función score* por

$$s(\theta; y) = \frac{\partial \ell(\theta; y)}{\partial \theta} = a(y)b'(\theta) + c'(\theta)$$

entonces se puede mostrar que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[s(\theta; y)] &= \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial \ell}{\partial \theta} \right) \right] \\ &= b'(\theta) \mathbb{E}[a(y)] + c'(\theta) \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{var}(s(\theta; y)) &= \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial \ell}{\partial \theta} \right)^2 \right] = -\mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta^2} \right) \right] \\ &= [b'(\theta)]^2 \text{var}(a(y)) \\ &= I(\theta; y) \end{aligned}$$

Componentes de un modelo lineal generalizado

- 1 Se supone que las *variables respuesta*, y_1, \dots, y_n , siguen una distribución común miembro de la *familia exponencial*.
- 2 Un conjunto de *variables explicativas*, x_1, \dots, x_p , y de parámetros $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$. Así,

$$y_{n \times 1} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}; \quad \beta_{q \times 1} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}; \quad X_{n \times q} = \begin{bmatrix} x'_1 \\ \vdots \\ x'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

- 3 Una *función liga* monótona g tal que

$$g(\mu_i) = x'_i \beta$$

donde $\mu_i = \mathbb{E}[y_i]$.

Dada la muestra y_1, \dots, y_n de $y \sim f(y; \theta)$, con $\theta' = (\theta_1, \dots, \theta_m)$, el estimador $\hat{\theta}$ obtenido por el *método de máxima verosimilitud* es aquel tal que

Equivalentemente, puesto \log es una función monótona creciente

Generalmente el EMV $\hat{\theta}$ se obtiene por diferenciación de la función log-de-verosimilitud $\ell(\theta; y)$ y resolviendo el sistema

Es necesario confirmar que la solución $\hat{\theta}$ corresponde a un máximo verificando que la matriz de segundas derivadas

es definida negativa.

★ Propiedades de los estimadores de máxima verosimilitud: invarianza, consistencia, suficiencia, eficiencia asintótica.

Estimación – Mínimos cuadrados

Suponga que la respuesta y_i es tal que $\mu_i = \mathbb{E}[y_i]$ y μ_i función de los parámetros β . Esto es, $\mu_i = \mu_i(\beta)$. De esta manera, considere

$$y_i = \mu_i + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

La *suma de cuadrados* está dada por

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_i(\beta))^2 = (y - \mu)'(y - \mu)$$

Generalmente los EMC de β se obtienen por diferenciación y resolviendo el sistema

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_j} = 0, \quad j = 0, \dots, p$$

Si por alguna razón se desea *ponderar* los términos, por ejemplo por diferencia de varianzas, los estimadores se obtienen minimizando la suma

$$S_W(\beta) = \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \mu_i(\beta))^2$$

donde $w_i = 1/\text{var}(y_i)$. En el caso que $\mu = X\beta$, la suma de cuadrados es

$S_W(\beta) = (y - X\beta)' V^{-1} (y - X\beta)$, que da lugar a las ecuaciones normales

$$X' V^{-1} X \beta = X' V^{-1} y$$

que corresponde a los *mínimos cuadrados ponderados* (MCP).

Modelos lineales generalizados

Considere la muestra y_1, \dots, y_n de $y \sim f(y; \theta)$, miembro de la familia exponencial. Entonces,

$$\ell(\theta; y) = \sum y_i b(\theta_j) + \sum c(\theta_j) + \sum d(y_i)$$

En el caso de *modelos lineales generalizados*,

$$\mu_i = \mathbb{E}[y_i] = -c'(\theta)/b'(\theta)$$

$$\eta_i = g(\mu_i) = x_i' \beta$$

En el caso de la familia exponencial $\hat{\theta}$ puede obtenerse por diferenciación de ℓ , o equivalentemente, resolviendo las ecuaciones $\frac{\partial \ell}{\partial \beta} = 0$.

Se puede mostrar que tiene

$$\frac{\partial \ell}{\partial \beta_j} = s_j = \sum \frac{(y_i - \mu_i)x_{ij}}{\text{var}(y_i)} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right)$$

Ahora bien las ecuaciones, $s_j = 0$, son en general no lineales por lo que hay necesidad de resolverlas numéricamente. Si se emplea el *método de Newton-Raphson*, la r -ésima aproximación está dada por

$$\hat{\beta}^{(r)} = \hat{\beta}^{(r-1)} - \left[\frac{\partial^2 \ell}{\partial \beta_j \partial \beta_k} \right]_{\beta = \hat{\beta}^{(r-1)}}^{-1} s^{(r-1)} \quad (3)$$

donde $s_j^{(r-1)} = \partial \ell / \partial \beta_j$ evaluado en $\beta = \hat{\beta}^{(r-1)}$.

Mínimos cuadrados re-ponderados iterativos

En ocasiones el *método de scoring* es más simple que *Newton-Raphson*. En la ecuación (3) se sustituye la matriz de segundas derivadas por el negativo de la *matriz de información* \mathcal{I}

$$-\mathcal{I}_{jk} = \mathbb{E} \left[\frac{\partial^2 \ell}{\partial \beta_j \partial \beta_k} \right] = \mathbb{E} \left[\frac{\partial \ell}{\partial \beta_j} \cdot \frac{\partial \ell}{\partial \beta_k} \right]$$

Luego, la correspondiente expresión para $\hat{\beta}$

$$\hat{\beta}^{(r)} = \hat{\beta}^{(r-1)} + [\mathcal{I}^{(r-1)}]^{-1} \mathbf{s}^{(r-1)} \quad (4)$$

o bien,

$$\mathcal{I}^{(r-1)} \hat{\beta}^{(r)} = \mathcal{I}^{(r-1)} \hat{\beta}^{(r-1)} + \mathbf{s}^{(r-1)} \quad (5)$$

En el caso de MLG

$$\mathcal{I}_{jk} = \sum_{i=1}^n \frac{x_{ij} x_{ik}}{\text{var}(y_i)} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right)^2$$

por lo que

$$\mathcal{I} = X' W X$$

donde $W = \text{diag}\{w_1, \dots, w_n\}$ con

$$w_{ii} = \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right)^2 / \text{var}(y_i)$$

Inferencia – Resultados asintóticos de EMV $\hat{\theta}$

La idea básica es que el EMV $\hat{\theta}$ es un estimador consistente del parámetro θ y que si $\text{var}(\hat{\theta})$ es su varianza, entonces:

- 1 El estimador $\hat{\theta}$ es *asintóticamente insesgado*.

$$\mathbb{E}[\hat{\theta}_n] \rightarrow \theta$$

- 2 El estadístico $\hat{\theta}$ tiene distribución asintótica normal.

$$\frac{\hat{\theta} - \theta}{\sqrt{\text{var}(\hat{\theta})}} \sim N(0, 1) \implies \frac{(\hat{\theta} - \theta)^2}{\text{var}(\hat{\theta})} \sim \chi_1^2$$

- 3 En el caso multivariado el estadístico $\hat{\theta}$ tiene distribución asintótica normal.

$$\hat{\theta} \sim N(\theta, V) \implies (\hat{\theta} - \theta)V^{-1}(\hat{\theta} - \theta) \sim \chi_\nu^2$$

Considere la función de *score* $s(\theta; y) = \partial \ell(\theta; y) / \partial \theta$. En particular, $s(\beta) = \left(\frac{\partial \ell}{\partial \beta_1}, \dots, \frac{\partial \ell}{\partial \beta_p} \right)'$

$$\mathbb{E}[s(\beta)] = \mathbf{0}$$

$$\text{var}(s(\beta)) = \mathbb{E}[s(\beta)s(\beta)'] = \mathcal{I}$$

$$s(\beta)' \mathcal{I}^{-1} s(\beta) \sim \chi_p^2$$

Ejemplo: Sea y_1, \dots, y_n una m. a. de $y \sim N(\mu, \sigma^2)$, con σ^2 conocida. Entonces,

$$\ell(\mu; y) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum (y_i - \mu)^2 - \frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2) \quad (7)$$

$$s(\mu; y) = \frac{\partial \ell}{\partial \mu} = \frac{1}{\sigma^2} \sum (y_i - \mu) = \frac{n}{\sigma^2} (\bar{y} - \mu) \quad (8)$$

$$\mathcal{I} = \text{var}(s(\mu)) = \frac{n^2}{\sigma^4} \left(\frac{\sigma^2}{n} \right) = \frac{n}{\sigma^2} \quad (9)$$

Por otro lado, $\frac{\bar{y} - \mu}{\sqrt{\sigma^2/n}} \sim N(0, 1)$, por lo que efectivamente

$$s(\beta)' \mathcal{I}^{-1} s(\beta) = \frac{\frac{n^2}{\sigma^4} (\bar{y} - \mu)^2}{\frac{n}{\sigma^2}} = \frac{n}{\sigma^2} (\bar{y} - \mu)^2 \sim \chi_1^2$$

Distribución muestral de EMV $\hat{\beta}$

Sea $\hat{\beta}$ el EMV del vector de parámetros β , y suponga que $\hat{\beta}$ está cercano a β . Entonces, por aproximación de primer orden de Taylor a $s(\beta)$,

$$s(\beta) \approx s(\hat{\beta}) + H(\hat{\beta})(\beta - \hat{\beta})$$

donde $H(\hat{\beta}) = \left(\frac{\partial^2 s}{\partial \beta_j \partial \beta_k} \right) \Big|_{\beta=\hat{\beta}}$, y que por la *ley de los grandes números (LGN)* converge a $\mathbb{E}[H(\beta)] = -\mathcal{I}(\beta)$.

Luego, para grandes muestras, se tiene que

$$s(\beta) \approx s(\hat{\beta}) - \mathcal{I}(\beta)(\beta - \hat{\beta})$$

Pero $\hat{\beta}$ es EMV por lo que $s(\hat{\beta}) = 0$. Luego,

$$(\hat{\beta} - \beta) \approx \mathcal{I}^{-1}(\beta)s(\beta)$$

Ahora bien, $\mathbb{E}[(\hat{\beta} - \beta)] = 0$ pues $\mathbb{E}[s] = 0$. Entonces,

$$\text{var}(\hat{\beta} - \beta) = \mathbb{E}[(\hat{\beta} - \beta)(\hat{\beta} - \beta)'] = \mathcal{I}^{-1} E[ss'] \mathcal{I}^{-1} = \mathcal{I}^{-1}$$

y por el *teorema del límite central*

$$(\hat{\beta} - \beta) \sim N(0, \mathcal{I}^{-1}) \quad (10)$$

y por lo tanto,

$$W = (\hat{\beta} - \beta)' \mathcal{I}(\hat{\beta} - \beta) \sim \chi_p^2 \quad (11)$$

El estadístico W se conoce como *estadístico de Wald*.

Nota: en el caso de los modelos lineales con respuestas normales las distribuciones de $(\hat{\beta} - \beta)$ y del estadístico de Wald son resultados exactos.

Ejemplo⁶

Sea y_1, \dots, y_n una *m. a.* donde $y_i \sim N(x_i' \beta, \sigma^2)$, con σ^2 conocida. Sea X la matriz con filas de observaciones x_i' y tal que $X'X$ es no singular. En este caso,

$$\mathbb{E}[y_i] = \mu_i = x_i' \beta$$

La función liga es la *identidad*. Esto es, $\eta_i = g(\mu_i) = x_i' \beta$, por lo que $\partial \mu_i / \partial \eta_i = 1$. Se tienen los siguientes resultados:

$$\mathcal{I}_{jk} = \sum_{i=1}^n \frac{x_{ij} x_{ik}}{\text{var}(y_i)} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right)^2 = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_{ij} x_{ik} \implies \mathcal{I} = \frac{1}{\sigma^2} X' X$$

$$w_{ii} = \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right)^2 / \text{var}(y_i) = \frac{1}{\sigma^2} \implies W = \frac{1}{\sigma^2} I_n$$

$$z_i = \sum_j x_{ij} \hat{\beta}^{(r-1)} + (y_i - \mu_i) \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right) \implies z = X \hat{\beta} + y - X \hat{\beta} = y$$

$$X' W X \hat{\beta}^{(r)} = X' W z \implies X' X \hat{\beta} = X' y$$

y por lo tanto, resolviendo el sistema de *ecuaciones normales*

$$\hat{\beta} = (X' X)^{-1} X' y$$

⁶Dobson (1990)

Se sabe que $\hat{\beta} \sim N(\beta, \sigma^2(X'X)^{-1})$. Entonces las siguientes distribuciones son exactas

con $\mathcal{I} = \frac{1}{\sigma^2}(X'X)$ y consecuentemente

$$(\hat{\beta} - \beta)' \mathcal{I}(\hat{\beta} - \beta) \sim \chi_p^2$$

Para valorar lo adecuado del ajuste del *modelo de interés (MI)* se compara su verosimilitud con la correspondiente verosimilitud del *modelo maximal o saturado (MS)*.

El *modelo maximal* es aquel con la misma distribución y función liga que el modelo de interés y con tantos parámetros como observaciones, por lo que puede suponerse que ofrece una *descripción completa* de los datos (dada la distribución).

Sean $L(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y)$ y $L(\hat{\beta}; y)$ las funciones de verosimilitud de MS y de MI respectivamente, evaluados en sus correspondientes EMV. Si el modelo de interés describe adecuadamente los datos se puede esperar que $L(\hat{\beta}; y)$ y $L(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y)$ estén cercanos. En caso contrario $L(\hat{\beta}; y)$ será mucho menor que $L(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y)$, lo que sugiere el uso del estadístico del *cociente de verosimilitud generalizado*

$$\Lambda = \frac{L(\hat{\beta}_{\max}; y)}{L(\hat{\beta}; y)}$$

como una *medida de la bondad del ajuste*. Equivalentemente, tomando logaritmos,

$$\log \Lambda = \ell(\hat{\beta}_{\max}; y) - \ell(\hat{\beta}; y)$$

Distribución muestral del log-de-verosimilitud ℓ

Si se aproxima el log-de-verosimilitud por Taylor alrededor del vector de parámetros real β ,

$$\ell(\beta; y) \approx \ell(\hat{\beta}; y) + (\beta - \hat{\beta})' s(\hat{\beta}) + \frac{1}{2}(\beta - \hat{\beta})' H(\hat{\beta})(\beta - \hat{\beta}) \quad (12)$$

donde $s(\hat{\beta}) = \frac{\partial \ell}{\partial \beta} \Big|_{\beta=\hat{\beta}}$ y $H(\hat{\beta}) = \left(\frac{\partial^2 \ell}{\partial \beta_j \partial \beta_k} \right) \Big|_{\beta=\hat{\beta}}$. Por otro lado, como $\hat{\beta}$ es EMV $s(\hat{\beta}) = 0$, y por LGN, $H(\hat{\beta}) \rightarrow \mathbb{E}[H(\hat{\beta})] = -\mathcal{I}$. Entonces, reordenando (12)

$$\ell(\beta; y) - \ell(\hat{\beta}; y) \approx \frac{1}{2}(\hat{\beta} - \beta)' \mathcal{I}(\hat{\beta} - \beta)$$

Se sigue de la distribución del estadístico W de Wald (11) que

$$2 \log \Lambda = 2 \left[\ell(\beta; y) - \ell(\hat{\beta}; y) \right] \sim \chi_p^2$$

Estadísticos de prueba basados en el estadístico anterior son empleados para valorar la bondad del ajuste de un modelo y la comparación entre modelos.

Devianza D

Nelder y Wedderburn (1972) definieron el estadístico *log del cociente de la verosimilitud* como la **devianza D** (escalada)

$$D = 2 \log \Lambda = 2 \left[\ell(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y) - \ell(\hat{\beta}; y) \right]$$

D puede descomponerse como

$$D = \left\{ \underbrace{[\ell(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y) - \ell(\beta_{\text{máx}}; y)]}_{\chi_n^2} - \underbrace{[\ell(\hat{\beta}; y) - \ell(\beta; y)]}_{\chi_p^2} + \underbrace{[\ell(\beta_{\text{máx}}; y) - \ell(\beta; y)]}_{\geq 0} \right\}$$

En grandes rasgos, si los primeros dos sumandos son independientes y el tercero es cercano a cero, entonces

$$D \sim \chi_{n-p}^2$$

si el modelo es adecuado. Si por el contrario el modelo no es bueno el tercer término será grande y D será mucho mayor que lo esperado por una distribución χ_{n-p}^2 .

En la práctica uno tiende a comparar el D calculado de los datos con $(n - p)$, el valor medio de la distribución.

Nota: en general la descomposición anterior es una aproximación para la distribución muestral del estadístico aunque para el caso normal el resultado es exacto.

Ejemplo

Considere y_1, \dots, y_n m. a. con $y_i \sim N(\mu_i, \sigma^2)$, σ^2 común y conocida. Entonces, la función *log-de-verosimilitud* está dada por

$$\ell(\beta; y) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_i)^2 - \frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2)$$

En el caso del *modelo maximal* (MS), $\mathbb{E}[y_i] = \mu_i$, así $\beta = (\mu_1, \dots, \mu_n)'$. Luego, el EMV $\hat{\beta}_{\text{máx}}$, queda como $\hat{\mu}_i = y_i$, para $i = 1, \dots, n$, y por lo tanto

$$\ell(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y) = -\frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2)$$

Considere ahora el *modelo reducido* (MR) que tiene un único parámetro común μ . Entonces, $\hat{\mu} = \bar{y}$ y el correspondiente log-de-verosimilitud

$$\ell(\hat{\beta}; y) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2)$$

Ejemplo (cont.)

Por lo tanto, la devianza D queda dada por

$$D = 2 \left[\ell(\hat{\beta}_{\text{máx}}; y) - \ell(\hat{\beta}; y) \right] = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \frac{n-1}{\sigma^2} s^2$$

Si el modelo de un solo parámetro es correcto, sabemos que $s^2 = \frac{1}{n-1} \sum (y_i - \bar{y})^2$ y que $\frac{n-1}{\sigma^2} s^2 \sim \chi_{n-1}^2$, por lo que

$$D \sim \chi_{n-1}^2$$

es un resultado exacto.

Inferencia – Pruebas de hipótesis

Contrastes de hipótesis sobre el vector de parámetros β se llevan a cabo utilizando las distribuciones asintóticas de los siguientes estadísticos:

$$(\hat{\beta} - \beta) \sim N(0, \mathcal{I}^{-1}) \quad \text{EMV}$$

$$(\hat{\beta} - \beta)' \mathcal{I} (\hat{\beta} - \beta) \sim \chi_p^2 \quad \text{Wald}$$

$$s(\beta)' \mathcal{I}^{-1} s(\beta) \sim \chi_p^2 \quad \text{score}$$

Alternativamente se puede utilizar la *diferencias de devianzas* a la manera de *suma extra de cuadrados*. Para esto considere los modelos reducido (MR) y completo (MC) tales que las hipótesis se pueden plantear como

$$H_0 : \beta = B_0 = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_q \end{bmatrix} \quad \text{vs.} \quad H_1 : \beta = B_1 = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}$$

con $1 \leq q < p$.

Inferencia – Pruebas de hipótesis

Ahora, utilizando el estadístico $D = 2 \log \Lambda$,

$$\Delta D = D_0 - D_1 = 2 \left[\ell(\hat{B}_1; y) - \ell(\hat{B}_0; y) \right]$$

Si ambos modelos son aceptables, $\Delta D \sim \chi^2_{q-p}$, siempre que ciertas condiciones de independencia se cumplan. Si ΔD es grande y por lo mismo su correspondiente valor $-p$ es pequeño, se decide en favor del modelo completo. En caso contrario se decide en favor de la hipótesis H_0 , correspondiente a un modelo *acceptable* más simple o parsimonioso.

Ejemplo⁷

En el caso normal el incremento de devianzas da lugar exactamente a la prueba F , empleada en las pruebas de hipótesis por medio de la *suma extra de cuadrados*.

A saber, sean $\hat{\mu}_i^0$ y $\hat{\mu}_i^1$ las respuestas ajustadas bajo los modelos reducido (H_0) y completo (H_1) respectivamente. Entonces,

$$D_k = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu}_i^k)^2, \quad k = 0, 1$$

Si H_1 es válida, $D_1 \sim \chi_{n-p}^2$. Y si H_0 es también correcta $D_0 \sim \chi_{n-q}^2$ y por lo tanto,

$$\Delta D = D_0 - D_1 \sim \chi_{p-q}^2.$$

Ahora bien, para eliminar la dependencia del parámetro σ^2 , sea

$$F = \frac{\frac{D_0 - D_1}{p-q}}{\frac{D_1}{n-p}} = \frac{\left[\sum (y_i - \hat{\mu}_i^0)^2 - \sum (y_i - \hat{\mu}_i^1)^2 \right] / (p-q)}{\sum (y_i - \hat{\mu}_i^1)^2 / (n-p)}$$

que en el caso normal se tiene la distribución exacta $F \sim F_{p-q, n-p}$, como se vio que era el caso de la *suma extra de cuadrados*.

⁷Dobson (1990)

Residuales

En el caso normal se definen los **residuales** r_i por

$$y_i = \hat{\mu}_i + (y_i - \hat{\mu}_i) = \hat{\mu}_i + r_i$$

Esta definición no es empleada en MLG pues en general la varianza $\text{var}(y_i)$ depende del nivel de la respuesta.

Residual	Definición	Observaciones
Normal	$r_i = y_i - \hat{\mu}_i$	Impráctico pues en MLG la varianza no es constante.
Intuitivo	$r_{Ri} = y_i - g^{-1}(x_i' \hat{\beta})$	Impráctico pues en MLG la varianza no es constante.
Práctico	$r_{Wi} = (y_i - \hat{\mu}_i) \frac{\partial \eta}{\partial \mu} \Big _{\mu=\hat{\mu}}$	Utilizando el resultado de la última iteración.
Pearson	$r_{Pi} = \frac{y_i - \hat{\mu}_i}{\sqrt{\text{var}(y_i)}}$	Residual estandarizado.
Anscombe	$r_{Ai} = A(y_i)$	La función $A(\cdot)$ se elige dependiendo de la distribución de y_i de manera tal que $A(y_i)$ sea "tan normal" como sea posible.
Devianza	$r_{Di} = \text{sign}(y_i - \hat{\mu}_i) \sqrt{d_i}$	Residual de la devianza donde los d_i son los sumandos de la devianza. Esto es, si $D = \sum d_i$, entonces, $D = \sum r_{Di}^2$.

Nota: El análisis de residuales en MLG es similar al caso normal. Se espera un comportamiento aleatorio de los residuales. Esto es, sin patrones aparentes.

Los residuales más populares son los de Pearson y los de devianza.

Residuales

Con relación a los residuales de Anscombe, la función A es tal que $A(\mu) = \int_{-\infty}^{\mu} v^{-1/3}(t)dt$, con $v(t)$ la varianza función de la media. Luego, el residual de Anscombe está definido como

$$r_{Ai} = \frac{A(y_i) - A(\hat{\mu}_i)}{A(\hat{\mu}_i) \sqrt{\text{var}A(\hat{\mu}_i)}}$$

Por lo que se tienen los siguientes casos específicos:

$$\text{Normal : } r_{Ai} = y_i - \hat{\mu}_i$$

$$\text{Gaussiana inversa : } r_{Ai} = (\log(y_i) - \log(\hat{\mu}_i)) / (\hat{\mu}_i)^{1/2}$$

$$\text{Gamma } r_{Ai} = 3((y_i - \hat{\mu}_i)^{1/3} - 1)$$

$$\text{Poisson } r_{Ai} = \frac{3}{2}((y_i^{2/3} - \hat{\mu}_i)^{1/6} - \hat{\mu}_i^{1/2})$$

$$\text{Binomial } r_{Ai} = \sqrt{m_i} \left(B(y_i, \frac{2}{3}, \frac{2}{3}) - B(\hat{\mu}_i, \frac{2}{3}, \frac{2}{3}) \right) (\hat{\mu}_i(1 - \hat{\mu}_i))^{1/6}$$

donde B denota la *función beta*, $B(y, a, b) = \int_0^1 t^{a-1}(1-t)^{b-1}dt$.

Los correspondientes residuales de Anscombe *estandarizados* (r_{Asi}) y *studentizados* (r_{Ati}) dados por

$$r_{Asi} = \frac{r_{Ai}}{\sqrt{\hat{\phi}(1 - h_{ii})}}, \quad \text{y} \quad r_{Ati} = \frac{r_{Ai}}{\sqrt{\hat{\phi}_{(i)}(1 - h_{ii})}}$$

con $\hat{\phi}$ la estimación del parámetro de dispersión. Véase ecuación (2).

Regresión Logística

Respuesta binaria

Considere una variable que puede tomar dos valores solamente: *éxito* ó *fracaso*; *sí* ó *no*; 1 ó 0. Así,

$$Z = \begin{cases} 1 & \text{éxito, sí} \\ 0 & \text{fracaso, no} \end{cases}$$

y tal que

$$P(Z = 1) = \pi, \quad P(Z = 0) = 1 - \pi, \quad f(z) = \pi^z(1 - \pi)^{1-z}$$

Z se dice que sigue una *distribución Bernoulli parámetro π* . Sea Z_1, \dots, Z_r , independientes con $Z_j \sim \text{Ber}(\pi_j)$, entonces

$$f(\mathbf{z}; \pi) = \prod_{j=1}^r f(Z_j; \pi) = \prod \pi_j^{z_j} (1 - \pi_j)^{1-z_j}$$

que se puede reescribir como

$$\begin{aligned} f(\mathbf{z}; \pi) &= \exp \left\{ \sum_{j=1}^r z_j \log(\pi_j) + \sum_{j=1}^r (1 - z_j) \log(1 - \pi_j) \right\} \\ &= \exp \left\{ \sum z_j \log \frac{\pi_j}{1 - \pi_j} + \sum \log(1 - \pi_j) \right\} \\ &= \exp \{ a(z)b(\theta) + c(\theta) + d(z) \} \end{aligned}$$

Esto es, *la distribución Bernoulli es miembro de la familia exponencial*.

Si las v. a. Z_j son además idénticamente distribuidas con $\pi_j = \pi$, entonces

$$Y = \sum_{j=1}^r Z_j \sim \text{Bin}(r, \pi).$$

La v. a. Y representa el número de éxitos en la muestra de tamaño r . La distribución tiene el soporte $R_Y = \{0, 1, \dots, r\}$ y f. d. p.

$$f(y; \pi) = \binom{r}{y} \pi^y (1 - \pi)^{r-y} I_{R_Y}(y)$$

Supongamos una muestra de tamaño n donde $Y_i \sim \text{Bin}(n_i, \pi_i)$. Entonces,

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

La distribución binomial también es miembro de la familia exponencial.

Modelos lineales generalizados

Se desea describir las proporciones de éxito $P_i = Y_i/n_i$ en términos de *factores* (variables cualitativas) y *covariables* (cuantitativas y continuas). Para esto,

$$g(\pi_i) = x_i' \beta$$

donde las x son las *variables explicativas*, β el *vector de parámetros* y g la *función liga*. El caso más simple es el *modelo lineal*

$$\pi = x' \beta = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip}$$

donde la función liga es la identidad. El problema con tal modelo es que puede producir valores de probabilidad π fuera del intervalo $[0, 1]$.

Para asegurar que el valor de π esta en el intervalo se usan las funciones de probabilidad acumulada

$$\pi = g^{-1}(x' \beta) = \int_{-\infty}^u f(t) dt$$

y donde f es una función de densidad de probabilidad (*f. d. p.*) llamada *distribución de tolerancia*.

[Si f es *f. d. p.* entonces, $f(t) \geq 0$, y $\int f(t) dt = 1$.]

Modelos dosis-respuesta

Los primeros modelos tipo regresión lineal usados para ajustar datos binomiales fue en bioensayos. Respuestas como proporción de animales que sobreviven determinada dosis de toxinas. Tales respuestas son llamadas *respuestas cuantiles*.

Modelo probit Si la distribución de tolerancia es la normal,

$$\pi = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^x \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{t - \mu}{\sigma}\right)^2\right] dt$$

donde Φ es la *f. p. a.* de la normal estándar. Luego,

$$\Phi^{-1}(\pi) = \beta_0 + \beta_1 x$$

con $\beta_0 = -\mu/\sigma$ y $\beta_1 = 1/\sigma$ y la función liga es la inversa de la *f. p. a.* Φ^{-1} .

Los *modelos probit* se usan en áreas de las ciencias biológicas y sociales donde se dan interpretaciones naturales del modelo. Por ejemplo, $x = \mu$ es llamada al *dosis letal mediana (LD(50))*.

Modelo logístico o *logit*

Modelo que permite resultados similares al modelo *probit* pero computacionalmente más sencillo.
Para este caso la distribución de tolerancia es

$$f(t) = \frac{\beta_0 \exp(\beta_0 + \beta_1 t)}{[1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 t)]^2}$$

Lo que implica que las probabilidades π quedan determinadas por

$$\pi = \int_{-\infty}^x f(t) dt = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 t)}{1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 t)} = g^{-1}(x' \beta)$$

O bien,

$$\eta = g(\mu) = g(\pi) = \log \left(\frac{\pi}{1 - \pi} \right) = \beta_0 + \beta_1 x$$

La función liga $g(\pi) = \log \left(\frac{\pi}{1 - \pi} \right)$ se conoce como *función logística*.

El comportamiento de $f(t)$ y $\pi(x)$ es muy parecido al de la función *probit* excepto en las colas de las distribuciones.

Momios

El cociente $\frac{\pi}{1-\pi}$ se conoce como *momios* o *ventaja* (odds en inglés).

Considere la tabla de contingencia de la derecha de gente expuesta o no a cierto contaminante después de cierto tiempo y si se ha enfermado o no.

	<i>enfermo</i>	<i>no enfermo</i>
<i>expuesto</i>	π_1	$1 - \pi_1$
<i>no expuesto</i>	π_2	$1 - \pi_2$

con $0 < \pi_i < 1$

Los momios de la enfermedad, para ambos grupos, expuestos o no, son

$$\theta_i = \frac{\pi_i}{1 - \pi_i}, \quad i = 1, 2 = \text{expuesto} / \text{no-expuesto}$$

Ejemplo:

probabilidad π	ventaja $\frac{\pi}{1-\pi}$	momios	logit $\log\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right)$	explicación
1/2	1.00	1 : 1	0	éxito o fracaso indistinto
3/4	3.00	3 : 1	> 0	éxito más posible que fracaso
1/5	0.25	1 : 4	< 0	éxito menos posible que fracaso

Considere el ejemplo de la tabla de contingencia de la derecha de gente expuesta o no a cierto contaminante después de cierto tiempo y si se ha enfermado o no.

	<i>enfermo</i>	<i>no enfermo</i>
<i>expuesto</i>	π_1	$1 - \pi_1$
<i>no expuesto</i>	π_2	$1 - \pi_2$

con $0 < \pi_i < 1$

Los momios de la enfermedad, para ambos grupos, expuestos o no, son

$$\theta_i = \frac{\pi_i}{1 - \pi_i}, \quad i = 1, 2 = \text{expuesto} / \text{no-expuesto}$$

Entonces, la *razón de momios (o ventajas)* es

$$\phi = \frac{\theta_1}{\theta_2} = \frac{\pi_1(1 - \pi_2)}{\pi_2(1 - \pi_1)}$$

que es la medida de la posibilidad relativa de la enfermedad para el grupo de *expuestos* sobre los *no-expuestos*.

Para un modelo logístico simple (un solo regresor): $\log\left(\frac{\pi_i}{1 - \pi_i}\right) = \beta_0 + \beta_1 x$. Luego,

$$\frac{\pi_i}{1 - \pi_i} = e^{\beta_0 + \beta_1 x} = e^{x' \beta} \implies \pi_i = \frac{e^{x' \beta}}{1 + e^{x' \beta}}$$

Si

$$\phi = 1 = \frac{\pi_1(1 - \pi_2)}{\pi_2(1 - \pi_1)} \implies \frac{\pi_1}{1 - \pi_1} = \frac{\pi_2}{1 - \pi_2}$$

lo que significa que el *riesgo* de la enfermedad (proporción de enfermos) es la misma para los grupos de *expuestos* o *no-expuestos*.

Se conoce como la *diferencia logit* a

$$\log \phi = \log \frac{\pi_1(1 - \pi_2)}{\pi_2(1 - \pi_1)} = g(\pi_1) - g(\pi_2) = \beta_1$$

cuya interpretación es una de las razones fundamentales de porque la regresión logística ha mostrado ser de gran importancia práctica.

Si

$$\phi = 1 = \frac{\pi_1(1 - \pi_2)}{\pi_2(1 - \pi_1)} \implies \frac{\pi_1}{1 - \pi_1} = \frac{\pi_2}{1 - \pi_2}$$

lo que significa que el *riesgo* de la enfermedad (proporción de enfermos) es la misma para los grupos de *expuestos* o *no-expuestos*.

Considere ahora J tablas de contingencia 2×2 , una para nivel de un factor, por ejemplo, grupo de edad: $j = 1, \dots, J$. Entonces,

$$\pi_{ij} = \frac{\exp(\beta_{0i} + \beta_{1i}x_j)}{1 + \exp(\beta_{0i} + \beta_{1i}x_j)}, \quad i = 1, 2; j = 1, \dots, J$$

Si $\beta_{11} = \beta_{12}$ constante sobre las J tablas, entonces $\phi = \text{constante}$ y

$$\begin{aligned} \log \phi &= \log \frac{\pi_1(1 - \pi_2)}{\pi_2(1 - \pi_1)} \\ &= \log \frac{\pi_1}{1 - \pi_1} - \log \frac{\pi_2}{1 - \pi_2} \\ &= (\beta_{01} - \beta_{11}x_j) - (\beta_{02} - \beta_{12}x_j) \\ &= (\beta_{01} - \beta_{02}) - (\beta_{11} - \beta_{12})x_j \\ &= (\beta_{01} - \beta_{02}) \end{aligned}$$

Modelo de *valor extremo*

Si se emplea ahora la *distribución de valor extremo*

$$f(t) = \beta_1 \exp \{(\beta_0 + \beta_1 t) - \exp(\beta_0 + \beta_1 t)\}$$

como función de tolerancia las probabilidades quedan dadas por:

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

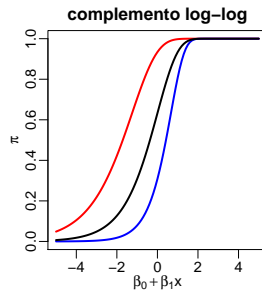
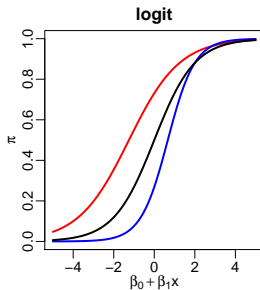
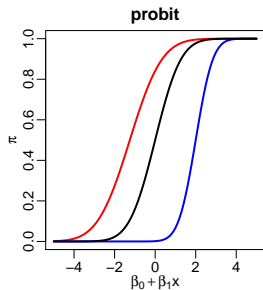
y por lo tanto,

$$\eta = g(\pi) = \log[-\log(1 - \pi)] = \beta_0 + \beta_1 x$$

En este caso la función liga es $\log[-\log(1 - \pi)]$, llamada *función complementaria log-log*. Los modelos de valor extremos son empleados en áreas como el *análisis de sobrevivencia* o *confiabilidad*.

La distribución es similar a los modelos *probit* o *logit* al rededor de 0.5 y haciéndose la diferencia más clara cerca del 0 o 1.

Funciones liga para respuestas binarias



Funciones liga

Probit: $\pi = \Phi^{-1}(x'\beta)$

Logit: $\pi = \frac{e^{x'\beta}}{1 + e^{x'\beta}}$

Complemento log-log: $\pi = 1 - \exp\{-\exp(x'\beta)\}$

Coefficientes:

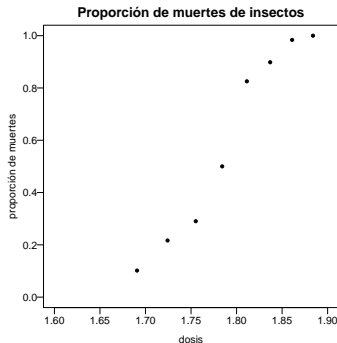
$$\begin{array}{ll} \beta_0 = 0; & \beta_1 = 1 \\ \beta_0 = 1; & \beta_1 = 4/5 \\ \beta_0 = -3; & \beta_1 = 3/2 \end{array}$$

-ebz

Problema de mortalidad de insectos⁸

La siguiente tabla muestra el número de insectos muertos después de 5 horas de exposición a gas carbónico a distintas concentraciones. La gráfica presenta la proporción de insectos muertos (y_i/n_i) como función de la dosis.

dosis x_i	número de insectos n_i	número de muertes y_i
1.6907	59	6
1.7242	60	13
1.7552	62	18
1.7842	56	28
1.8113	63	52
1.8369	59	53
1.8610	62	61
1.8839	60	60



⁸Dobson (1990)

Problema de mortalidad de insectos (cont.)

El modelo logístico sería, para $i = 1, \dots, n$

$$\pi_i = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_i)}{1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 x_i)}$$

o bien,

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

En este caso, el estadístico *log-razón-de-verosimilitud* es

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

Modelo *logit*:

```
Call:
glm(formula = y ~ x, family = binomial("logit"), weights = dat$n)

Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  -60.717      5.181  -11.72  <2e-16
x              34.270      2.912   11.77  <2e-16

Null deviance: 284.202  on 7  degrees of freedom
Residual deviance: 11.232  on 6  degrees of freedom (valor-p=0.082)
AIC: 41.43
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```


Problema de mortalidad de insectos (cont.)

Modelo *probit*:

```
Call:
glm(formula = y ~ x, family = binomial("probit"), weights = dat$n)

Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  -34.935      2.648  -13.19  <2e-16
x              19.728      1.487   13.27  <2e-16

Null deviance: 284.202  on 7  degrees of freedom
Residual deviance: 10.120  on 6  degrees of freedom (valor-p=0.120)
AIC: 40.318
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

Modelo *valor extremo*:

```
Call:
glm(formula = y ~ x, family = binomial("cloglog"), weights = dat$n)

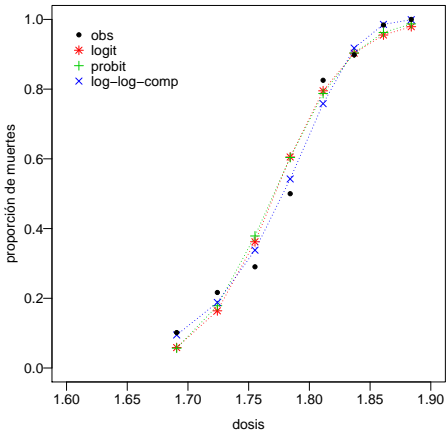
Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  -39.572      3.240  -12.21  <2e-16
x              22.041      1.799   12.25  <2e-16

Null deviance: 284.2024  on 7  degrees of freedom
Residual deviance:  3.4464  on 6  degrees of freedom (valor-p=0.752)
AIC: 33.644
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

Problema de mortalidad de insectos (cont.)

dosis x_i	número de insectos n_i	número de muertes y_i	predicciones de modelos		
			logístico	probit	valor extremo
1.6907	59	6	3.46	3.36	5.59
1.7242	60	13	9.84	10.72	11.28
1.7552	62	18	22.45	23.48	20.95
1.7842	56	28	33.90	33.82	30.37
1.8113	63	52	50.10	49.62	47.78
1.8369	59	53	53.29	53.32	54.14
1.8610	62	61	59.22	59.66	61.11
1.8839	60	60	58.74	59.23	59.95
Devianza D			11.23	10.12	3.45

Proporción de muertes modelos dosis-respuesta



Regresión logística

Considere el modelo de regresión logística múltiple, para $i = 1, \dots, n$

$$\log \left(\frac{\pi_i}{1 - \pi_i} \right) = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip}$$

o bien,

$$\eta_i = g(\pi_i) = x_i' \beta, \quad i = 1, \dots, n$$

Los estimadores (EMV) del vector de parámetros β y consecuentemente de las probabilidades π tales que $g(\hat{\pi}) = x' \hat{\beta}$ se obtienen maximizando la función log-verosimilitud

$$\ell(\beta; y) = \sum_{i=1}^n \left[y_i \log(\pi_i) + (n_i - y_i) \log(1 - \pi_i) + \log \binom{n_i}{y_i} \right]$$

que acepta aún casos con $n_i = 1$ y/o $y_i = 0$, que no los métodos de mínimos cuadrados. El correspondiente estadístico razón log-verosimilitud está dado por

$$D = 2 (\ell(\hat{\pi}_{\text{máx}}; y) - \ell(\hat{\pi}; y))$$

donde $\hat{\pi}_{\text{máx}}$ es el vector EMV del *modelo maximal* y $\hat{\pi}$ el EMV del *modelo de interés*.

Para el *modelo maximal* se tiene que

$$\frac{\partial \ell}{\partial \pi_i} = \frac{y_i}{\pi_i} - \frac{n_i - y_i}{1 - \pi_i}$$

por lo que $\partial \ell / \partial \pi_i = 0 \implies \hat{\pi}_{\max, i} = y_i / n_i$. Así,

$$\ell(\hat{\pi}_{\max}; y) = \sum_{i=1}^n \left[y_i \log \left(\frac{y_i}{n_i} \right) + (n_i - y_i) \log \left(1 - \frac{y_i}{n_i} \right) + \log \binom{n_i}{y_i} \right]$$

Luego,

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

Entonces, D tiene la forma

$$D = 2 \sum o \log \frac{o}{e}$$

donde o denota las frecuencias observadas y_i y $(n_i - y_i)$ de las celdas de una tabla de contingencia y e corresponde a las frecuencias estimadas $n_i \hat{\pi}_i$ y $(n - n_i \hat{\pi}_i)$, respectivamente. D no depende de otros parámetros (como σ^2 de la normal) por lo que se puede usar como medida de bondad de ajuste y para pruebas de hipótesis usando la aproximación

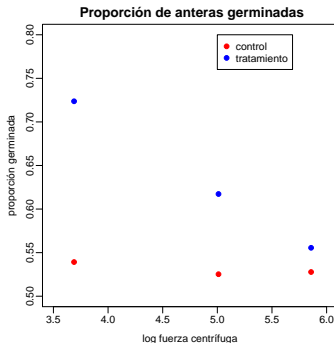
$$D \sim \chi_q^2$$

donde $q = 1 + p$, el numero de coeficientes β estimados.

Problema de anteras embriogénicas de la planta de especie *Datura innoxia*⁹

La siguiente tabla muestra el número de anteras embriogénicas y_{jk} de planta de especie *Datura innoxia* obtenidas cuando un número de anteras n_{jk} fueron preparadas bajo distintas condiciones. Hay un *factor* cualitativo: un tratamiento de almacenaje a 3°C por 48 hrs. o bien bajo almacenamiento controlado; y una *covariable* continua con 3 valores de fuerza centrífuga. Interesa comparar el efecto del tratamiento de almacenaje después de ajustar, si es necesario, por la fuerza centrífuga.

Condición almacenaje		Fuerza centrífuga (g.)		
		40	150	350
Control	y_{1k}	55	52	57
	n_{1k}	102	99	108
Tratamiento	y_{2k}	55	50	50
	n_{2k}	76	81	90

⁹Dobson (1990)

Problema de anteras (cont.)

Ajuste de modelos por máxima verosimilitud

Modelo 1:

$$\log\left(\frac{\hat{\pi}}{1 - \hat{\pi}}\right) = \begin{matrix} 0.239 \\ (0.628) \end{matrix} + \begin{matrix} 1.977h_{\text{Trit}} \\ (0.998) \end{matrix} - \begin{matrix} 0.023 \log(x) \\ (0.127) \end{matrix} - \begin{matrix} 0.319 \log(x) * h_{\text{Trit}} \\ (0.199) \end{matrix}$$

$D_1 = 0.028$
 $AIC = 37.596$

Modelo 2:

$$\log\left(\frac{\hat{\pi}}{1 - \hat{\pi}}\right) = \begin{matrix} 0.877 \\ (0.487) \end{matrix} + \begin{matrix} 0.407h_{\text{Trit}} \\ (0.175) \end{matrix} - \begin{matrix} 0.155 \log(x) \\ (0.097) \end{matrix}$$

$D_2 = 2.619$
 $AIC = 38.187$

Modelo 3:

$$\log\left(\frac{\hat{\pi}}{1 - \hat{\pi}}\right) = \begin{matrix} 1.021 \\ (0.148) \end{matrix} + \quad - \begin{matrix} 0.148 \log(x) \\ (0.097) \end{matrix}$$

$D_3 = 8.092$
 $AIC = 41.66$

Problema de anteras (cont.)

Código:

```
> logx <- log(dat$x)
> dat$prop <- dat$y/dat$n
> dat$logx <- log(dat$x)
> print(dat)

> mod1 <- glm(y~log*f,
family=binomial("logit"),data=dat,weights=n)
> print(summary(mod1))
> print(anova(mod1))
```

Datos:

f	x	n	y	logx	p
ctrl	40	102	55	3.688879	0.5392157
ctrl	150	99	52	5.010635	0.5252525
ctrl	350	108	57	5.857933	0.5277778
trt	40	76	55	3.688879	0.7236842
trt	150	81	50	5.010635	0.6172840
trt	350	90	50	5.857933	0.5555556

Problema de anteras (cont.)

Salida:

```
Coefficients:
      Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  0.23389    0.62839   0.372  0.7097
logx         -0.02274    0.12685  -0.179  0.8577
ftrt         1.97711    0.99802   1.981  0.0476
logx:ftrt    -0.31862    0.19888  -1.602  0.1091

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
Null deviance: 10.451974 on 5 degrees of freedom
Residual deviance: 0.027728 on 2 degrees of freedom
AIC: 37.596
Number of Fisher Scoring iterations: 3

Analysis of Deviance Table
Model: binomial, link: logit
Response: y
Terms added sequentially (first to last)
      Df Deviance Resid. Df Resid. Dev
NULL                                5    10.4520
logx      1     2.3604         4     8.0916
f         1     5.4727         3     2.6188
logx:f    1     2.5911         2     0.0277
```


Problema de anteras (cont.)

Considere el modelo general:

$$\log\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right) = \beta_0 + \beta_1 I_{\text{rt}} + \beta_2 \log(x) + \beta_3 \log(x) * I_{\text{rt}}$$

- Para probar la igualdad de pendientes de ambos grupos de almacenaje:

$$H_0 : \beta_3 = 0 \text{ vs. } H_1 : \beta_3 \neq 0$$

se sigue que $D_2 - D_1 \sim \chi_1^2$. En este caso,

$$D_2 - D_1 = 2.619 - 0.028 = 2.591 \quad (\text{valor-}p = 0.1074)$$

por lo que los datos no apoyan fuertemente la diferencia de pendientes del término interacción.

- Por otro lado, para probar la significancia del efecto del tratamiento de almacenaje, *después de ajustar por la covariable (log de) fuerza centrífuga*:

$$H_0 : \beta_1 = 0 \text{ vs. } H_1 : \beta_1 \neq 0$$

$$D_3 - D_2 = 8.092 - 2.619 = 5.473 \quad (\text{valor-}p = 0.0193)$$

En este caso, los datos sugieren que sí hay un efecto del tratamiento del almacenaje en la proporción de anteras germinadas.

Problema de anteras (cont.)

Condición de almacenaje	fuerza		proporciones y	Modelos		\hat{y}
	x	$\log(x)$		1	2	3
Control	40	3.689	0.539	0.537	0.576	0.617
	150	5.011	0.525	0.530	0.526	0.570
	350	5.858	0.528	0.525	0.493	0.539
Tratamiento	40	3.689	0.724	0.721	0.671	0.617
	150	5.011	0.617	0.623	0.625	0.570
	350	5.858	0.556	0.553	0.593	0.539
D				0.028	2.619	8.092

La tabla muestra las proporciones ajustadas por los 3 modelos. Note lo bien que el modelo 1 ajusta los datos. Ésto sucede porque se estiman *¡4 parámetros con base a 6 observaciones!*

Problema de recién nacidos bajos de peso ¹⁰

El problema de niños con bajo peso al nacer es una condición que preocupa a los médicos pues constituye un grupo de alto riesgo para los problemas de mortalidad infantil y tasas de defectos al nacer. El comportamiento de la madre durante el embarazo (dieta, hábitos de fumar, cuidado prenatal, etc.) puede afectar de manera importante el tiempo de gestación y en consecuencia el peso normal de un niño al nacer.

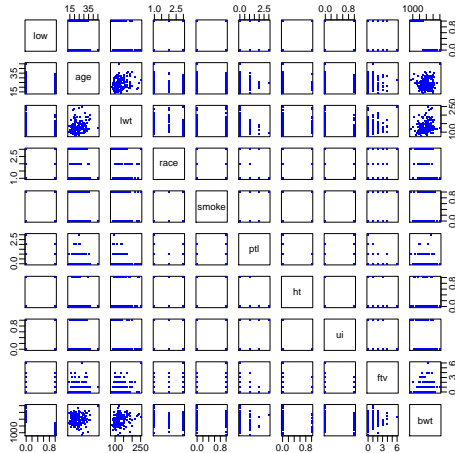
variable	código	etiqueta
Código de identificación:	...	id
Bajo peso:	0 = peso \geq 2500 gr. 1 = peso $<$ 2500 gr.	low
Edad de la madre:	años	age
Peso antes de la última menstruación:	libras	lwt
Raza:	1=blanca;2=negra;3=otra	race
Hábito del fumar durante embarazo:	1=sí;0=no	smoke
Historia de labor prematura	0=ninguna;1=una;etc.	ptl
Historia de hipertensión	1=sí;0=no	ht
Irritación uterina:	1=sí;0=no	ui
Número de visitas médicas durante el primer trimestre:	0=ninguna;1=una;etc.	ftv
Peso al nacer:	gramos	bwt

obs	id	low	age	lwt	race	smoke	ptl	ht	ui	ftv	bwt
1	85	0	19	182	2	0	0	0	1	0	2523
2	86	0	33	155	3	0	0	0	0	3	2551
3	87	0	20	105	1	1	0	0	0	1	2557
4	88	0	21	108	1	1	0	0	1	2	2594
.

¹⁰Hosmer and Lemeshow (1989); Venables and Ripley (2002).

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Despliegue de datos



Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Manipulación de datos

Se considera la variable `low` como respuesta binaria y será modelada mediante una regresión logística.

No se espera que la variable `ptl` influya linealmente sobre la respuesta. Además son pocos los casos mayores que 1, por lo que se le trata como una variable binaria. Igual es el caso de la variable `ftv` que se reduce a tres categorías.

Código:

```
> options(contrasts=c("contr.treatment", "contr.poly"))
> attach(birthwt)
> race <- factor(race, labels=c("white", "black", "others"))
> print(table(ptl))

> lwd <- factor(lwt < 110)
> ptd <- factor(ptl > 0)
> print(table(ftv))

> ftv <- factor(ftv)
> levels(ftv)[-1:2] <- "2+"
> print(table(ftv))

> bwt <- data.frame(low=factor(low), age, lwt, race,
                    smoke=(smoke>0), ptd, ht=(ht>0), ui=(ui>0), ftv)
> detach()
> rm(race, ptd, ftv)
```

Salida:

ptl	0	1	2	3
159	24	5	1	

ftv	0	1	2	3	4	6
100	47	30	7	4	1	

ftv	0	1	2+
100	47	42	

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Primer ajuste de regresión logística

```
> birthwt.glm <- glm(low ~ age+lwt+race+smoke+ptd+ht+ui+ftv,  
+ binomial, dat=bwt)  
> print(summary(birthwt.glm, cor=FALSE))
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	z value	Pr(> z)
(Intercept)	0.82302	1.24471	0.661	0.50848
age	-0.03723	0.03870	-0.962	0.33602
lwt	-0.01565	0.00708	-2.211	0.02705
raceblack	1.19241	0.53597	2.225	0.02609
raceothers	0.74069	0.46174	1.604	0.10869
smokeTRUE	0.75553	0.42502	1.778	0.07546
ptdTRUE	1.34376	0.48062	2.796	0.00518
htTRUE	1.91317	0.72074	2.654	0.00794
uiTRUE	0.68019	0.46434	1.465	0.14296
ftv1	-0.43638	0.47939	-0.910	0.36268
ftv2+	0.17901	0.45638	0.392	0.69488

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

Null deviance: 234.67 on 188 degrees of freedom

Residual deviance: 195.48 on 178 degrees of freedom

AIC: 217.48

Number of Fisher Scoring iterations: 4

Puesto que la respuesta es binaria, aunque el modelo sea correcto no se puede garantizar que la devianza siga aún aproximadamente una distribución χ^2 , pero que tenga un valor parecido a los grados de libertad no sugiere problemas de ajuste.

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Selección de modelo 1:

Para la selección del modelo se recurre a la estrategia *stepwise* pero basada en cambios del estadístico AIC, el *criterio de información de Akaike*, dado por

$$\text{AIC} = -2\ell(\hat{\theta}; y) + 2q$$

Ajuste:

```
> birthwt.step <- stepAIC(birthwt.glm, trace=FALSE)
> print(birthwt.step$anova)
```

Stepwise Model Path
Analysis of Deviance Table

Initial Model:
low ~ age + lwt + race + smoke + ptd + ht + ui + ftv

Final Model:
low ~ lwt + race + smoke + ptd + ht + ui

	Step	Df	Deviance	Resid. Df	Resid. Dev	AIC
1				178	195.4755	217.4755
2	- ftv	2	1.358185	180	196.8337	214.8337
3	- age	1	1.017866	181	197.8516	213.851

Análisis de devianzas:

```
> print(anova(birthwt.step))
```

Analysis of Deviance Table
Model: binomial, link: logit
Response: low
Terms added sequentially (first to last)

	Df	Deviance	Resid. Df	Resid. Dev
NULL			188	234.67
lwt	1	5.9813	187	228.69
race	2	5.4316	185	223.26
smoke	1	8.2444	184	215.01
ptd	1	7.9752	183	207.04
ht	1	6.5572	182	200.48
ui	1	2.6307	181	197.85

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Selección de modelo 2:

En esta segunda búsqueda se incluyen términos cuadráticos (escalados) de edad y peso de la madre.

Ajuste:

```
> birthwt.step2 <- stepAIC(birthwt.glm, ~ .^2  
+ I(scale(age)^2)+I(scale(lwt)^2), trace=FALSE)  
> print(birthwt.step2$anova)
```

Stepwise Model Path
Analysis of Deviance Table

Initial Model:

low ~ age + lwt + race + smoke + ptd + ht + ui + ftv

Final Model:

low ~ age + lwt + smoke + ptd + ht + ui + ftv
+ age:ftv + smoke:ui

	Step	Df	Deviance	Resid. Df	Resid. Dev	AIC
1				178	195.4755	217.4755
2	+ age:ftv	2	12.474896	176	183.0006	209.0006
3	+ smoke:ui	1	3.056805	175	179.9438	207.9438
4	- race	2	3.129586	177	183.0734	207.0734

Análisis de devianzas:

```
> print(anova(birthwt.step2))
```

Analysis of Deviance Table
Model: binomial, link: logit
Response: low
Terms added sequentially (first to last)

	Df	Deviance	Resid. Df	Resid. Dev
NULL			188	234.67
age	1	2.7600	187	231.91
lwt	1	4.7886	186	227.12
smoke	1	4.2440	185	222.88
ptd	1	10.6571	184	212.22
ht	1	6.8297	183	205.39
ui	1	2.1523	182	203.24
ftv	2	2.0135	180	201.23
age:ftv	2	14.2407	178	186.99
smoke:ui	1	3.9127	177	183.07

Note que aunque las variables `age` y `ftv` fueron descartadas previamente sus interacciones ahora se incluyen. Las pendientes de `age` difieren para los 3 niveles de `ftv`.

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Modelo final:

Ajuste:

```
> print(summary(birthwt.step2))
```

Call:
glm(formula = low ~ age + lwt + smoke + ptd + ht + ui + ftv +
age:ftv + smoke:ui, family = binomial, data = bwt)

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	z value	Pr(> z)
(Intercept)	-0.582374	1.421613	-0.410	0.682057
age	0.075539	0.053967	1.400	0.161599
lwt	-0.020373	0.007497	-2.717	0.006580
smokeTRUE	0.780044	0.420385	1.856	0.063518
ptdTRUE	1.560317	0.497001	3.139	0.001693
htTRUE	2.065696	0.748743	2.759	0.005800
uiTRUE	1.818530	0.667555	2.724	0.006446
ftv1	2.921088	2.285774	1.278	0.201270
ftv2+	9.244907	2.661497	3.474	0.000514
age:ftv1	-0.161824	0.096819	-1.671	0.094642
age:ftv2+	-0.411033	0.119144	-3.450	0.000561
smokeTRUE:uiTRUE	-1.916675	0.973097	-1.970	0.048877

Null deviance: 234.67 on 188 degrees of freedom
Residual deviance: 183.07 on 177 degrees of freedom
AIC: 207.07

Number of Fisher Scoring iterations: 5

```
> print(table(bwt$low, predict(birthwt.step2)>0))
```

	FALSE	TRUE
0	116	14
1	28	31

Problema de recién nacidos bajos de peso (cont.)

Comentario final:

El criterio AIC penaliza el número de términos menos severamente que como lo hace el estadístico de razón-de-verosimilitud o la prueba de Wald, por lo que aunque incluir la interacción `smoke:ui` reduce el AIC su correspondiente valor- p es apenas del 4.9 %. Se consideraron interacciones de tercer orden pero no fueron significativas.

Los residuales cuando la respuesta es una variable binaria no son informativas. De cualquier manera nos hubo grandes sorpresas en este análisis.

La capacidad de pronóstico del modelo se puede resumir con la siguiente tabla

peso observado	predicción	
	no bajo	bajo
no bajo	116	14
bajo	28	31

