Modelo de regresión logística con k regresores

Contents

1	Modelo	1
2	Estimación de los parámetros del modelo: máxima verosimilitud	2
	2.1 La función de verosimilitud	2
	2.2 El máximo de la función de verosimilitud	3
	2.3 Algoritmo de Newton-Raphson	
	2.4 Algoritmo BFGS	
	2.5 Estimacion con R	7

1 Modelo

El archivo MichelinNY.csv contiene linformación de 164 restaurantes franceses incluidos en la guía Zagat Survey 2006: New York City Restaurants.

```
d = read.csv("datos/MichelinNY.csv")
str(d)
```

```
164 obs. of 6 variables:
## 'data.frame':
                  : int 0001001110...
   $ InMichelin
   $ Restaurant.Name: chr "14 Wall Street" "212" "26 Seats" "44" ...
                   : int 19 17 23 19 23 18 24 23 27 20 ...
                    : int 20 17 17 23 12 17 21 22 27 17 ...
   $ Decor
   $ Service
                    : int 19 16 21 16 19 17 22 21 27 19 ...
                          50 43 35 52 24 36 51 61 179 42 ...
   $ Price
```

El objetivo es utilizar un modelo que relacione una serie de regresores con una variable respuesta binaria:

$$P(y_i = \{0, 1\}) = f(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{ki})$$

donde:

- $P(y_i = 1) = \pi_i$ $P(y_i = 0) = 1 \pi_i$.

$$\pi_i = \frac{exp(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_k x_{ki})}{1 + exp(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_k x_{ki})}$$

Se puede escribir que

$$\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_k x_{ki} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1i} & x_{2i} & \dots & x_{ki} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \dots \\ \beta_k \end{bmatrix} = x_i^T \beta$$

Es decir

$$\pi_i = \frac{exp(x_i^T \beta)}{1 + exp(x_i^T \beta)}$$

2 Estimación de los parámetros del modelo: máxima verosimilitud

Para estimar los parámetros del modelo (β_0 y β_1) se utiliza el método de máxima verosimilitud, que consiste en:

- Definir la función logaritmo de la verosimilitud;
- Los estimadores de los parámetros son aquellos que maximizan la funcion log-verosimilitud.

2.1 La función de verosimilitud

La función de verosimilitud es la probabilidad de obtener la muestra dada. Por tanto, dada la muestra $\{y_1, y_2, \dots, y_n\}$, la probabilidad de obtener dicha muestra es:

$$P(Y_1 = y_1, Y_2 = y_2, \dots, Y_n = y_n) = \prod_{i=1}^n P(Y_i = y_i) = \prod_{i=1}^n \pi_i^{y_i} (1 - \pi_i)^{1 - y_i}$$

Se denomina función de verosimilitud a la probabilidad de obtener la muestra:

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^{n} \pi_i^{y_i} (1 - \pi_i)^{1 - y_i}$$

El logaritmo de la función de verosimilitud es:

$$\begin{split} logL(\beta) &= log \prod_{i=1}^{n} \pi_{i}^{y_{i}} (1 - \pi_{i})^{1 - y_{i}} = \sum_{i=1}^{n} (y_{i} log \pi_{i} + (1 - y_{i}) log (1 - \pi_{i})) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i} log \left(\frac{exp(x_{i}^{T}\beta)}{1 + exp(x_{i}^{T}\beta)} \right) + (1 - y_{i}) log \left(1 - \frac{exp(x_{i}^{T}\beta)}{1 + exp(x_{i}^{T}\beta)} \right) \right) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i} log \left(\frac{exp(x_{i}^{T}\beta)}{1 + exp(x_{i}^{T}\beta)} \right) + (1 - y_{i}) log \left(\frac{1}{1 + exp(x_{i}^{T}\beta)} \right) \right) \\ &= \sum_{i=1}^{n} (y_{i} log(exp(x_{i}^{T}\beta) - y_{i} log(1 + exp(x_{i}^{T}\beta)) - (1 - y_{i}) log(1 + exp(x_{i}^{T}\beta))) \\ &= \sum_{i=1}^{n} (y_{i}(x_{i}^{T}\beta) - log(1 + exp(x_{i}^{T}\beta))) \end{split}$$

En R, la función de verosimilitud la podemos calcular así:

```
logit_logL = function(beta,y,X){
    # asumimos que beta es un vector
    # beta = [beta0 beta1 .. betak]
    # y = [y1 y2 ... yn]
    # X es la matriz de regresores

n = length(y)
suma = 0
for (i in 1:n){
    suma = suma + y[i]*sum(X[i,]*beta) -
        log(1 + exp( sum(t(X[i,])*beta) ))
}
return(suma)
}
```

Por ejemplo, para $\beta_0 = -2$ y $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta_4 = 0.5$, la función de verosimilitud vale:

```
beta = c(-2,0.05,0.05,0.05,0.05)
X = cbind(rep(1,nrow(d)), d[,3:6])
logit_logL(beta,d$InMichelin,X)
```

[1] -261.6999

2.2 El máximo de la función de verosimilitud

Derivando e igualando a cero:

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_0} \\ \frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_1} \end{bmatrix} = X^T(y - \pi) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

donde X:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & \cdots & x_{kn} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \pi = \begin{bmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \vdots \\ \pi_n \end{bmatrix}$$

Sin embargo no es posible despejar las incógnitas del vector β de las ecuaciones anteriores. El máximo de la función log-verosimilitud se tiene que hacer numéricamente.

En los siguientes apartados se va a necesitar la matriz de derivadas segundas o matriz hessiana. Su valor es:

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0^2} & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0 \partial \beta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0 \partial \beta_k} \\ \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_1 \partial \beta_0} & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_1 \partial \beta_k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_k \partial \beta_0} & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_k \partial \beta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_k^2} \end{bmatrix} = -X^T W X$$

donde W es una matriz diagonal con

$$W_{ii} = \pi_i (1 - \pi_i)$$

```
En R:
```

```
logit_grad = function(beta,y,X){
  X = as.matrix(X)
  n = length(y)
  y = matrix(y, nrow = n, ncol = 1)
  pi = matrix(0, nrow = n, ncol = 1)
  for (i in 1:n){
    pi[i,1] = exp(sum(X[i,]*beta))/(1 + exp(sum(X[i,]*beta)))
  grad = t(X) %*% (y - pi)
  return(grad)
}
Comprobacion:
beta = c(-2,0.05,0.05,0.05,0.05)
X = cbind(rep(1,nrow(d)), d[,3:6])
logit_grad(beta, d$InMichelin, X)
##
                          [,1]
## rep(1, nrow(d))
                   -82.17658
## Food
                   -1638.18822
## Decor
                   -1425.64297
                   -1512.89102
## Service
## Price
                   -3366.03967
logit_hess = function(beta,X){
 X = as.matrix(X)
  n = nrow(X)
  W = matrix(0, nrow = n, ncol = n)
  for (i in 1:n){
    pi = \exp(sum(X[i,]*beta))/(1 + \exp(sum(X[i,]*beta)))
    W[i,i] = pi*(1-pi)
  }
 hess = - t(X) %*% W %*% X
  return(hess)
}
beta = c(-2,0.05,0.05,0.05,0.05)
X = cbind(rep(1,nrow(d)), d[,3:6])
logit_hess(beta, X)
##
                   rep(1, nrow(d))
                                         Food
                                                   Decor
                                                           Service
                                                                        Price
## rep(1, nrow(d))
                         -7.216586 -144.6739 -122.702 -128.918
                                                                     -279.872
                       -144.673934 -2935.8604 -2466.220 -2601.383 -5614.096
## Food
                       -122.702048 -2466.2196 -2144.581 -2206.913 -4883.881
## Decor
## Service
                       -128.917957 -2601.3826 -2206.913 -2345.857 -5104.190
## Price
                       -279.872024 -5614.0957 -4883.881 -5104.190 -11574.359
nlme::fdHess(beta,logit_logL, y = d$InMichelin, X)
## $mean
## [1] -261.6999
##
## $gradient
        -82.17658 -1638.18822 -1425.64297 -1512.89102 -3366.03967
```

```
##
## $Hessian
##
               [,1]
                          [,2]
                                    [,3]
                                                [,4]
          -7.214614 -144.6798 -122.729
                                         -129.0228
                                                       -279.9345
## [1,]
## [2,] -144.679824 -2932.3514 -2466.672 -2601.8495
                                                     -5615.4312
## [3,] -122.729044 -2466.6724 -2142.991 -2210.5800
## [4,] -129.022841 -2601.8495 -2210.580 -2342.6567 -5108.8271
## [5,] -279.934455 -5615.4312 -4887.459 -5108.8271 -11571.9056
```

2.3 Algoritmo de Newton-Raphson

El algoritmo de Newton-Raphson para la función log-verosimilitud es:

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \alpha H_k^{-1} G_k$$

donde $\beta = [\beta_0 \ \beta_1 \ \cdots \beta_k]^T$. Este algoritmo para la función log-verosimilitud se puede implementar en R de manera sencilla:

```
logit_Newton = function(beta_i, y, X, max_iter = 100, tol = 10^(-6), alfa = 0.1){
  # punto de partida
  beta = beta i
  iter = 1
  tol1 = Inf
  while ((iter <= max_iter) & (tol1 > tol)){
   f = logit_logL(beta,y,X)
   grad = logit grad(beta, y, X)
   hess = logit_hess(beta,X)
   beta = beta - alfa*solve(hess) %*% grad
   f1 = logit_logL(beta,y,X)
   tol1 = abs((f1-f)/f)
   print(paste("Iteracion ",iter," log-verosimilitud ",f1))
    iter = iter + 1
  }
  return(beta)
```

Como punto de partida podemos utilizar por ejemplo la solución de mínimos cuadrados:

```
m = lm(InMichelin ~ Food + Decor + Service + Price, data = d)
beta_i = coef(m)
X = cbind(rep(1,nrow(d)), d[,3:6])
logit_Newton(beta_i,d$InMichelin,X)
## [1] "Iteracion 1 log-verosimilitud -103.697764191695"
```

```
## [1] "Iteracion 1 log-verosimilitud -103.697764191695"
## [1] "Iteracion 2 log-verosimilitud -99.4843006321041"
## [1] "Iteracion 3 log-verosimilitud -95.9467514594378"
## [1] "Iteracion 4 log-verosimilitud -92.9381705910831"
## [1] "Iteracion 5 log-verosimilitud -90.3511527629657"
## [1] "Iteracion 6 log-verosimilitud -88.1070168072994"
## [1] "Iteracion 7 log-verosimilitud -86.1493000858726"
## [1] "Iteracion 8 log-verosimilitud -84.4384134102019"
## [1] "Iteracion 9 log-verosimilitud -82.945869738486"
## [1] "Iteracion 10 log-verosimilitud -81.6488396319209"
```

```
[1] "Iteracion
                    11
                        log-verosimilitud
                                            -80.5266972236002"
                    12
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -79.5598372440519"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -78.7297318616064"
   [1] "Iteracion
                                            -78.0192580762245"
##
                        log-verosimilitud
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -77.4129016978384"
##
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -76.8967965069963"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -76.4586572635604"
                   18
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -76.087662365363"
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -75.7743198740009"
   [1]
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -75.5103336404772"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -75.2884766341898"
       "Iteracion
##
   [1]
                        log-verosimilitud
                                            -75.1024738677407"
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.9468952611842"
##
   [1]
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.8170580259202"
       "Iteracion
                                            -74.7089379461753"
##
   [1]
                        log-verosimilitud
##
   [1]
       "Iteracion
                    26
                        log-verosimilitud
                                            -74.6190889452876"
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.5445703893246"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.4828816408913"
   [1]
##
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.4319034137963"
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.3898454952845"
##
   Γ11
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.3552004038294"
      "Iteracion
                                            -74.326702544819"
   [1]
                        log-verosimilitud
       "Iteracion
                                            -74.3032924202697"
##
   [1]
                        log-verosimilitud
   Г17
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2840854462995"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2683449358644"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2554588149883"
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2449196580623"
##
   [1]
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2363076507231"
                                            -74.2292761159564"
##
   [1]
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
   [1]
       "Iteracion
                                            -74.2235392689608"
                        log-verosimilitud
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.218861897558"
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2150506963734"
   [1]
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2119470136567"
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2094207987802"
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2073655656118"
   [1]
##
   [1]
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2056942118484"
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2043355568448"
   Г1]
       "Iteracion
                    48
                                            -74.2032314804836"
##
                        log-verosimilitud
                    49
                        log-verosimilitud
                                            -74.2023345632666"
   [1]
       "Iteracion
                                            -74.2016061432063"
##
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2010147184303"
   [1] "Iteracion
                   52
                                            -74.2005346358697"
                        log-verosimilitud
##
   Г17
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.2001450161937"
##
      "Iteracion
                                            -74.1998288734636"
   [1]
                        log-verosimilitud
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.1995723950056"
       "Iteracion
                    56
                                            -74.1993643529103"
##
   [1]
                        log-verosimilitud
##
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.1991956235178"
   [1]
      "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.1990587953824"
      "Iteracion
   [1]
                        log-verosimilitud
                                            -74.1989478496529"
   [1]
       "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                            -74.1988578996574"
##
   [1] "Iteracion
                        log-verosimilitud
                                           -74.1987849788507"
## rep(1, nrow(d)) -11.15839984
```

```
## Food 0.40328290

## Decor 0.10005790

## Service -0.19161023

## Price 0.09123707
```

2.4 Algoritmo BFGS

La función que vamos a minimizar es:

```
logit_logL_optim = function(beta,y,X){
  logL = logit_logL(beta,y,X)
  return(-logL)
}
```

Utilizando el mismo punto de partida que para el algoritmo Newton:

```
mle = optim(par = beta_i, fn = logit_logL_optim, y = d$InMichelin, X = X, gr = NULL, method = "BFGS", h
## initial value 108.793234
        2 value 108.179208
## iter
## iter
       3 value 95.583943
       4 value 94.546080
## iter
## iter
       5 value 93.925129
## iter
         6 value 76.862843
## iter
       7 value 74.881601
       8 value 74.297605
## iter
## iter
        9 value 74.231461
## iter 10 value 74.210848
## iter 11 value 74.202494
## iter 12 value 74.199408
## iter 13 value 74.199353
## iter 14 value 74.199254
## iter 15 value 74.199238
## iter 16 value 74.199235
## iter 17 value 74.198614
## iter 18 value 74.198479
## iter 19 value 74.198474
## iter 19 value 74.198474
## iter 19 value 74.198474
## final value 74.198474
## converged
mle$par
## (Intercept)
                       Food
                                   Decor
                                              Service
                                                             Price
## -11.19660070
                 0.40483799
                              0.09992470 -0.19249028
                                                        0.09175322
```

2.5 Estimacion con R

data = d

##

```
m2 = glm(InMichelin ~ Food + Decor + Service + Price, data = d, family = binomial)
summary(m2)

##
## Call:
## glm(formula = InMichelin ~ Food + Decor + Service + Price, family = binomial,
```

```
##
## Coefficients:
               Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
##
## (Intercept) -11.19745
                        2.30896 -4.850 1.24e-06 ***
## Food
                0.40485
                          0.13146
                                   3.080 0.00207 **
## Decor
                0.09997
                          0.08919
                                   1.121 0.26235
## Service
              -0.19242
                          0.12357 -1.557 0.11942
                0.09172
                          0.03175
                                   2.889 0.00387 **
## Price
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
## (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
##
      Null deviance: 225.79 on 163 degrees of freedom
## Residual deviance: 148.40 on 159 degrees of freedom
## AIC: 158.4
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 6
```

El modelo que estamos estimando es:

$$P(Y_i = 1) = \frac{exp(x_i^T \beta)}{1 + exp(x_i^T \beta)}$$