Modelo de regresión logística con 1 regresor

Contents

1 Introduccion

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)
```

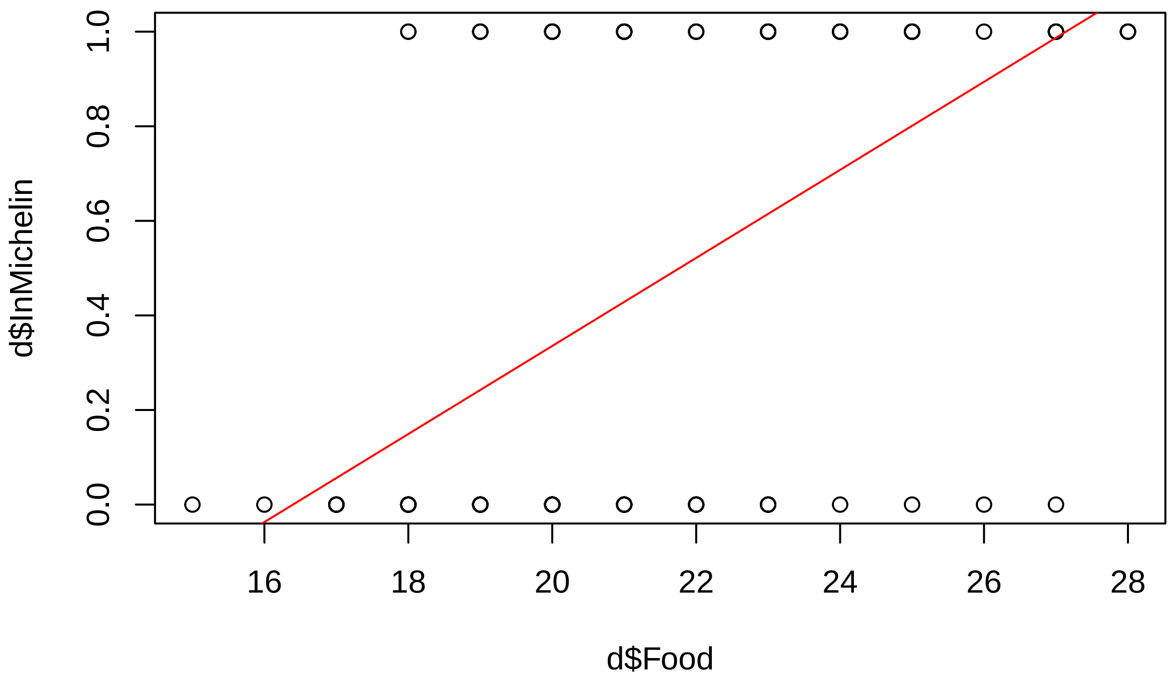
```
## 'data.frame':    164 obs. of  6 variables:
##  $ InMichelin     : int  0 0 0 1 0 0 1 1 1 0 ...
##  $ Restaurant.Name: chr  "14 Wall Street" "212" "26 Seats" "44" ...
##  $ Food           : int  19 17 23 19 23 18 24 23 27 20 ...
##  $ Decor          : int  20 17 17 23 12 17 21 22 27 17 ...
##  $ Service        : int  19 16 21 16 19 17 22 21 27 19 ...
##  $ Price          : int  50 43 35 52 24 36 51 61 179 42 ...
```

- Restaurant.Name: nombre del restaurante.
- Food: puntuación media de la comida otorgada por los clientes (sobre 30).
- Decor: puntuación media de la decoración otorgada por los clientes (sobre 30).
- Service: puntuación media del servicio otorgada por los clientes (sobre 30).
- Price: precio medio de la cena en dólares.
- InMichelin: vale 1 si el restaurante está en la Guía Michel y 0 si no está en dicha guía.

En este caso queremos analizar qué variables influyen en que un restaurante sea incluido en la Guía Michelín. Por tanto, la variable respuesta es *InMichelin*, es decir, una variable $y_i = \{0, 1\}$. Podríamos pensar en un modelo de regresión lineal:

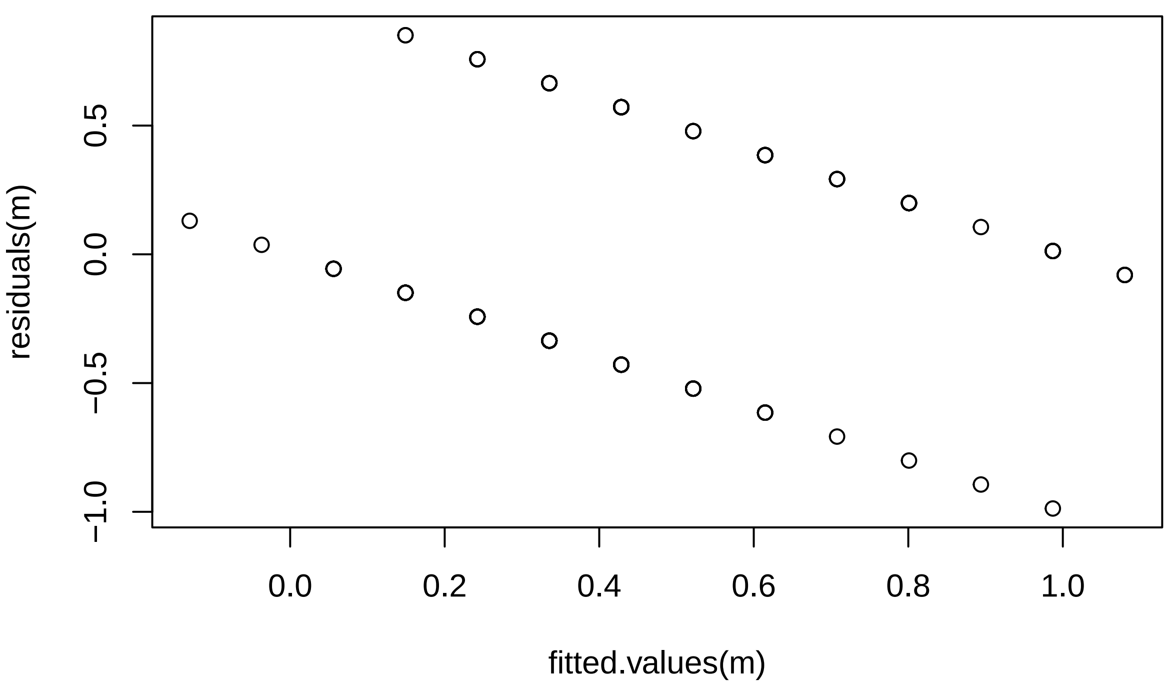
$$InMichelin_i = \beta_0 + \beta_1 Food_i + u_i, \quad u_i \sim N(0, \sigma^2)$$

```
m = lm(InMichelin ~ Food, data = d)
plot(d$Food, d$InMichelin)
abline(m, col = "red")
```



Pero este modelo no es válido porque, entre otras razones, los residuos no tienen distribución normal ya que la respuesta es binaria, 0 y 1:

```
plot(fitted.values(m), residuals(m))
```



2 Modelo con un regresor

La alternativa es utilizar el **modelo de regresión logística**, que nos permite trabajar con variables respuesta binarias, $y_i = \{1, 0\}$ (si la variable es un factor con dos niveles, se toma uno de los niveles como valor 1 y el otro como valor 0). La idea es seguir utilizando un modelo que relacione la variable respuesta y los regresores:

$$y_i = f(x_i)$$

pero en el modelo de regresión logística se trabaja con probabilidades:

$$P(y_i = \{1, 0\}) = f(x_i)$$

En concreto se definen las siguientes probabilidades:

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

donde:

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

Como π_i es una probabilidad debe tomar valores entre 0 y 1, y esa función lo cumple. Efectivamente:

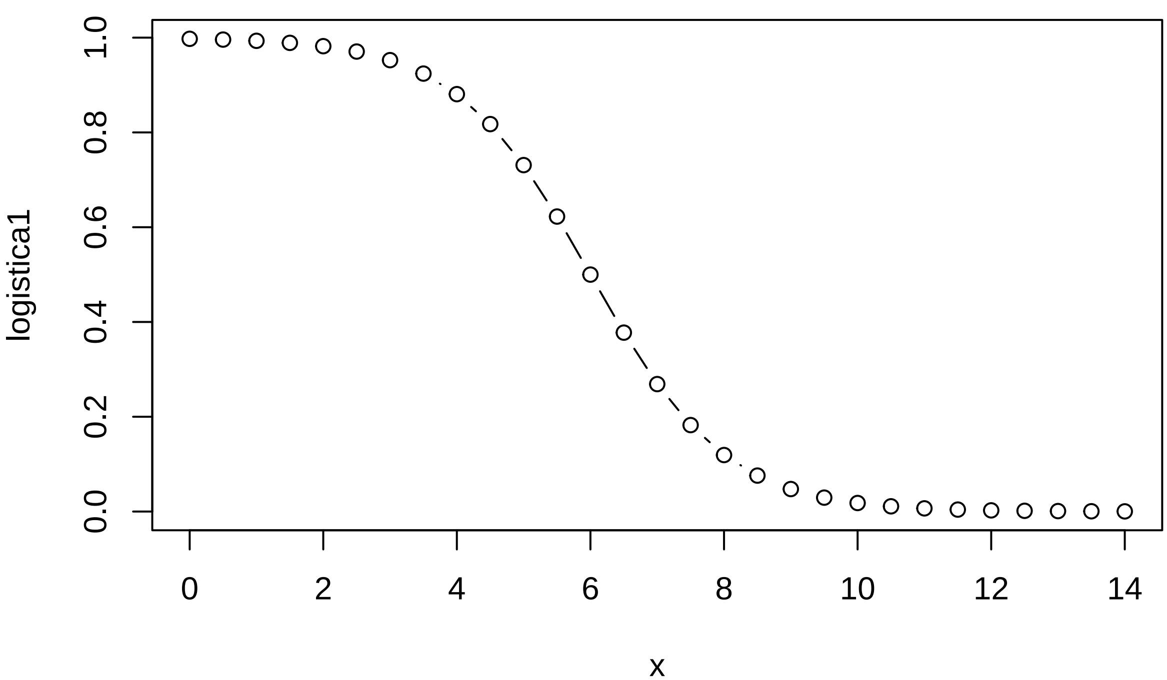
$$exp(-\beta_0 - \beta_1 x_i) > 0 \Rightarrow$$

$$1 + exp(-\beta_0 - \beta_1 x_i) > 1 \Rightarrow$$

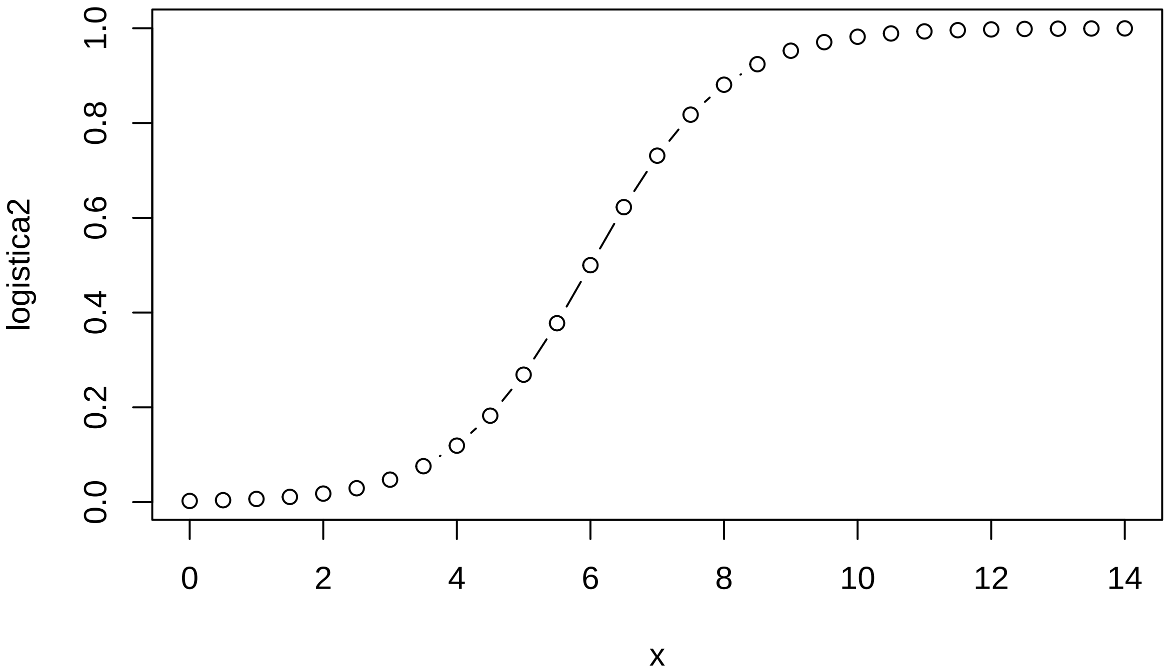
$$\frac{1}{1 + exp(-\beta_0 - \beta_1 x_i)} < 1$$

A esta función se le conoce como **función logística**. Algunos ejemplos de esta función son:

```
# ejemplo de función logística: beta0 = -6, beta1 = 1
x = seq(0,14,0.5)
logistica1 = 1/(1+exp(-6 + 1*x))
plot(x,logistica1, type = "b")
```



```r
# ejemplo de función logística: beta0 = 6, beta1 = -1
logistica2 = 1/(1+exp(6 - 1*x))
plot(x,logistica2, type = "b")
```



Este modelo también se conoce como **modelo logit**, ya que la función logit se define como:

$$logit(x) = log\left(\frac{x}{1-x}\right)$$

Por tanto:

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

3 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;
- La estimación de los parámetros son aquellos que maximizan la funcion log-verosimilitud.

3.1 La función de verosimilitud

La función de verosimilitud es la probabilidad de obtener la muestra dada. En primer lugar reescribimos el modelo como:

$$P(Y_i = y_i) = \pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i}, \quad y_i = 0, 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

Efectivamente

$$P(Y_i = 1) = \pi_i, \quad P(Y_i = 0) = 1 - \pi_i$$

Por tanto, dada la muestra $\{Y_1 = y_1, Y_2 = y_2, \cdots, Y_n = y_n\}$, la probabilidad de obtener dicha muestra es:

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

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

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

donde $\beta = [\beta_0 \quad \beta_1]^T$. Efectivamente, la función de verosimilitud es función de β ya que π_i depende de β.

Se suele trabajar con logaritmos ya que: 1) transforma los productos en sumas y es más fácil trabajar con sumas; 2) el máximo de $logL(\beta)$ y de $L(\beta)$ se alcanzan en el mismo punto ya que el logaritmo es una función monótona creciente (recordad que el método de máxima verosimilitud consiste en encontrar el máximo de la verosimilitud).

$$logL(\beta) = log \prod_{i=1}^{n} \pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i} = \sum_{i=1}^{n}(y_i log(\pi_i) + (1-y_i)log(1-\pi_i))$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left(y_i log\left(\frac{exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}{1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}\right) + (1-y_i)log\left(1 - \frac{exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}{1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}\right)\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left(y_i log\left(\frac{exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}{1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}\right) + (1-y_i)log\left(\frac{1}{1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}\right)\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n}(y_i log(exp(\beta_0+\beta_1 x_i) - y_i log(1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)) - (1-y_i)log(1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)))$$

$$= \sum_{i=1}^{n}(y_i(\beta_0+\beta_1 x_i) - log(1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)))$$

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

```r
logit1_logL = function(beta,y,x){
  # beta = [beta0 beta1]
  n = length(y)
  suma = 0
  for (i in 1:n){
    suma = suma + y[i]*(beta[1] + beta[2]*x[i]) -
      log(1 + exp(beta[1] + beta[2]*x[i]))
  }
  return(suma)
}
```

Por ejemplo, para $\beta_0 = -12$ y $\beta_1 = 1$, la función de verosimilitud vale:

```r
beta = c(-12,1)
logit1_logL(beta,d$InMichelin,d$Food)
```

```
## [1] -715.1892
```

3.2 El máximo de la función de verosimilitud

Tenemos que derivar e igualar a cero:

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \frac{exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}{1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}\right) = \sum_{i=1}^{n}(y_i-\pi_i)$$

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_1} = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - \frac{x_i exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}{1+exp(\beta_0+\beta_1 x_i)}\right) = \sum_{i=1}^{n}x_i(y_i-\pi_i)$$

En forma matricial tenemos el vector gradiente:

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_0} \\ \frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_1} \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n}\begin{bmatrix} 1 \\ x_i \end{bmatrix}(y_i-\pi_i) = X^T(y-\pi)$$

donde X es la matriz de regresores:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \cdots & \cdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \pi = \begin{bmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \cdots \\ \pi_n \end{bmatrix}$$

Verifiquemos la expresión anterior con un ejemplo. Supongamos que tenemos tres datos: $(y_1,x_1),(y_2,x_2),(y_3,x_3)$:

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^{n}(y_i-\pi_i) = (y_1-\pi_1)+(y_2-\pi_2)+(y_3-\pi_3)$$

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta_1} = \sum_{i=1}^{n}x_i(y_i-\pi_i) = x_1(y_1-\pi_1)+x_2(y_2-\pi_2)+x_3(y_3-\pi_3)$$

En forma matricial:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}, \quad \pi = \begin{bmatrix} \pi_1 \\ \pi_2 \\ \pi_3 \end{bmatrix}$$

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

$$= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1-\pi_1 \\ y_2-\pi_2 \\ y_3-\pi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (y_1-\pi_1)+(y_2-\pi_2)+(y_3-\pi_3) \\ x_1(y_1-\pi_1)+x_2(y_2-\pi_2)+x_3(y_3-\pi_3) \end{bmatrix}$$

Luego ambas expresiones son equivalentes.

El máximo se haya igualando a cero:

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

Sin embargo no es posible despejar β_0 y β_1 de las ecuaciones anteriores. El máximo de la función log-verosimilitud se tiene que encontrar numéricamente.

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

$$\frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0^2} = \sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{exp(w)(1+exp(w)) - exp(w)^2}{(1+exp(w))^2} \right) = \sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{exp(w)}{(1+exp(w))} + \frac{exp(w)^2}{(1+exp(w))^2} \right) = -\sum_{i=1}^{n} \pi_i(1-\pi_i)$$

$$\frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0 \partial \beta_1} = \sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{x_i exp(w)(1+exp(w)) - x_i exp(w)^2}{(1+exp(w))^2} \right) = -\sum_{i=1}^{n} \pi_i(1-\pi_i)x_i$$

$$\frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_1^2} = \sum_{i=1}^{n} x_i \left(-\frac{x_i exp(w)(1+exp(w)) - x_i exp(w)^2}{(1+exp(w))^2} \right) = -\sum_{i=1}^{n} \pi_i(1-\pi_i)x_i^2$$

donde se ha utilizado que $w = \beta_0 + \beta_1 x_i$. En forma matricial

$$\frac{\partial logL(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0^2} & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0 \partial \beta_1} \\ \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_0 \partial \beta_1} & \frac{\partial^2 logL(\beta)}{\partial \beta_1^2} \end{bmatrix} = -\sum_{i=1}^{n} \begin{bmatrix} 1 \\ x_i \end{bmatrix} \pi_i(1-\pi_i) \begin{bmatrix} 1 & x_i \end{bmatrix} = -X^T W X$$

donde W es una matriz diagonal con

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

En R:

```
logit1_grad = function(beta,y,x){
  n = length(y)
  X = cbind(rep(1,n),x)
  y = matrix(y, nrow = n, ncol = 1)
  pi = matrix(0, nrow = n, ncol = 1)
  for (i in 1:n){
    pi[i,1] = exp(beta[1] + beta[2]*x[i])/(1 + exp(beta[1] + beta[2]*x[i]))
  }
  grad = t(X) %*% (y - pi)
  return(grad)
}
```

Comprobacion:

```
beta = c(-12,1)
logit1_grad(beta, d$InMichelin, d$Food)
```

```
##           [,1]
##     -89.81236
## x -1791.80199
```

```
logit1_hess = function(beta,x){
  n = length(x)
  X = cbind(rep(1,n),x)
  W = matrix(0, nrow = n, ncol = n)
  for (i in 1:n){
```

```
    pi = exp(beta[1] + beta[2]*x[i])/(1 + exp(beta[1] + beta[2]*x[i]))
    W[i,i] = pi*(1-pi)
  }
  hess = -t(X) %*% W %*% X
  return(hess)
}
```

```
beta = c(-12,1)
logit1_hess(beta, d$Food)
```

```
##                         x
##   -0.1845959  -3.150987
## x -3.1509868 -54.265816
```

```
# fdHess es una función del paquete nlme que
# calcula el gradiente y el hessiano numéricamente
# mediante diferencias finitas
# (se utiliza aquí para comprobar los resultados)
nlme::fdHess(beta,logit1_logL, y = d$InMichelin, x = d$Food)
```

```
## $mean
## [1] -715.1892
##
## $gradient
## [1]   -89.81236 -1791.80199
##
## $Hessian
##            [,1]       [,2]
## [1,] -0.1847533  -3.152841
## [2,] -3.1528410 -54.318880
```

3.3 Algoritmo de Newton-Raphson

Queremos encontrar el máximo de la función f(x). Para ello aproximamos la función en el entorno de un punto dado x_1 por un polinomio de segundo grado (polinomio de Taylor de segundo grado):

$$f(x) = p_2(x) + e(x)$$

donde

$$p_2(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{1}{2} f''(x_1)(x - x_1)^2$$

y $e(x)$ es el error cometido en dicha aproximación. Derivamos para encontrar el máximo del polinomio:

$$\frac{\partial p_2(x)}{\partial x} = f'(x_1) + f''(x_1)(x - x_1) = 0$$

El máximo de $p_2(x)$ se encuentra en

$$x_2 = x_1 - \frac{f'(x_1)}{f''(x_1)}$$

El máximo de $f(x)$ estará más próximo a x_2 que a x_1. Pero podemos mejorar el resultado repitiendo el proceso: se vuelve a aproximar $f(x)$ por un polinomio de orden 2 en el entorno de x_2 y el nuevo máximo obtenido, x_3, estará más próximo al máximo de $f(x)$:

$$p_2(x) = f(x_2) + f'(x_2)(x - x_2) + \frac{1}{2} f''(x_2)(x - x_2)^2$$

$$\frac{\partial p_2(x)}{\partial x} = f'(x_2) + f''(x_2)(x - x_2) = 0$$

$$x_3 = x_2 - \frac{f'(x_2)}{f''(x_2)}$$

Y así sucesivamente, obteniendo el algoritmo:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad k = 1, 2, \cdots$$

Se puede demostrar que este algoritmo converge al máximo de $f(x)$. Este procedimiento se conoce como el **algoritmo de Newton**.

Si la función es multivariante, el polinomio de Taylor de segundo orden es:

$$p_2(x) = f(x_k) + (x - x_k)^T G_k + \frac{1}{2}(x - x_k)^T H_k (x - x_k)$$

donde $x = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n]^T$, $x_k = [x_{1,k} \ x_{2,k} \ \cdots \ x_{n,k}]^T$, G_k es el vector gradiente de f calculado en x_k, y H_k es la matriz hessiana de f calculada en x_k. Por tanto, el algoritmo de Newton en caso de funciones multivariantes es:

$$x_{k+1} = x_k - H_k^{-1} G_k$$

El algoritmo de Newton funciona muy bien en las proximidades del máximo. Sin embargo, lejos del máximo la convergencia es muy lenta y puede incluso que el algoritmo no converja. Es habitual introducir un coeficiente α en el algoritmo:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha H_k^{-1} G_k$$

El valor de α se tiene que calcular en cada caso particular, para lo que se utilizan algoritmos de búsqueda lineal. El cálculo de valor óptimo de α queda fuera del alcance y de los objetivos de la asignatura. Nosotros vamos a utilizar $\alpha = 0.1$, que da resultados aceptables para las datos analizados.

Por último, como las variables de la función log-verosimilitud son $\beta = [\beta_0 \ \beta_1]^T$, el algoritmo de Newton se escribe en nuestro caso como:

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

El algoritmo de Newton para la función log-verosimilitud se puede implementar en R de manera sencilla:

```r
logit1_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)){
    fun = logit1_logL(beta,y,x)
    grad = logit1_grad(beta,y,x)
    hess = logit1_hess(beta,x)
    beta = beta - alfa*solve(hess) %*% grad
    fun1 = logit1_logL(beta,y,x)
    tol1 = abs((fun1-fun)/fun)
    print(paste("Iteracion ",iter," log-verosimilitud ",fun1))
    iter = iter + 1
  }
  return(beta)
}
```

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

```r
m = lm(InMichelin ~ Food, data = d)
beta_i = coef(m)
logit1_Newton(beta_i,d$InMichelin,d$Food)
```

```
## [1] "Iteracion  1  log-verosimilitud  -107.656015911258"
## [1] "Iteracion  2  log-verosimilitud  -104.287355012541"
## [1] "Iteracion  3  log-verosimilitud  -101.526363604862"
## [1] "Iteracion  4  log-verosimilitud  -99.2463877834868"
## [1] "Iteracion  5  log-verosimilitud  -97.3536832363028"
## [1] "Iteracion  6  log-verosimilitud  -95.7768175152045"
## [1] "Iteracion  7  log-verosimilitud  -94.4600424595339"
## [1] "Iteracion  8  log-verosimilitud  -93.3589914316065"
## [1] "Iteracion  9  log-verosimilitud  -92.4377929328025"
## [1] "Iteracion  10  log-verosimilitud  -91.6670764915551"
## [1] "Iteracion  11  log-verosimilitud  -91.0225570593353"
## [1] "Iteracion  12  log-verosimilitud  -90.484004083196"
## [1] "Iteracion  13  log-verosimilitud  -90.0344722640228"
## [1] "Iteracion  14  log-verosimilitud  -89.6597141606584"
## [1] "Iteracion  15  log-verosimilitud  -89.3477217968218"
## [1] "Iteracion  16  log-verosimilitud  -89.0883617087495"
## [1] "Iteracion  17  log-verosimilitud  -88.8730791459283"
## [1] "Iteracion  18  log-verosimilitud  -88.6946546058619"
## [1] "Iteracion  19  log-verosimilitud  -88.5470008892312"
## [1] "Iteracion  20  log-verosimilitud  -88.4249922453037"
## [1] "Iteracion  21  log-verosimilitud  -88.3243194791475"
## [1] "Iteracion  22  log-verosimilitud  -88.2413664664321"
## [1] "Iteracion  23  log-verosimilitud  -88.1731046049016"
## [1] "Iteracion  24  log-verosimilitud  -88.1170024837147"
## [1] "Iteracion  25  log-verosimilitud  -88.0709485813594"
## [1] "Iteracion  26  log-verosimilitud  -88.0331851835732"
## [1] "Iteracion  27  log-verosimilitud  -88.0022519944925"
## [1] "Iteracion  28  log-verosimilitud  -87.9769381304365"
```

```
## [1] "Iteracion  29  log-verosimilitud  -87.9562413582492"
## [1] "Iteracion  30  log-verosimilitud  -87.9393335830701"
## [1] "Iteracion  31  log-verosimilitud  -87.9255317127127"
## [1] "Iteracion  32  log-verosimilitud  -87.9142731329427"
## [1] "Iteracion  33  log-verosimilitud  -87.9050951231782"
## [1] "Iteracion  34  log-verosimilitud  -87.8976176273983"
## [1] "Iteracion  35  log-verosimilitud  -87.8915288715559"
## [1] "Iteracion  36  log-verosimilitud  -87.8865733873089"
## [1] "Iteracion  37  log-verosimilitud  -87.8825420629438"
## [1] "Iteracion  38  log-verosimilitud  -87.8792638965297"
## [1] "Iteracion  39  log-verosimilitud  -87.8765991740146"
## [1] "Iteracion  40  log-verosimilitud  -87.8744338367144"
## [1] "Iteracion  41  log-verosimilitud  -87.8726748389212"
## [1] "Iteracion  42  log-verosimilitud  -87.8712463277095"
## [1] "Iteracion  43  log-verosimilitud  -87.8700865039272"
## [1] "Iteracion  44  log-verosimilitud  -87.869145046376"
## [1] "Iteracion  45  log-verosimilitud  -87.8683810007229"
## [1] "Iteracion  46  log-verosimilitud  -87.8677610512254"
## [1] "Iteracion  47  log-verosimilitud  -87.8672581072929"
## [1] "Iteracion  48  log-verosimilitud  -87.866850148599"
## [1] "Iteracion  49  log-verosimilitud  -87.8665192822394"
## [1] "Iteracion  50  log-verosimilitud  -87.8662509735903"
## [1] "Iteracion  51  log-verosimilitud  -87.8660334192954"
## [1] "Iteracion  52  log-verosimilitud  -87.8658570364406"
## [1] "Iteracion  53  log-verosimilitud  -87.8657140466199"
## [1] "Iteracion  54  log-verosimilitud  -87.8655981374381"
## [1] "Iteracion  55  log-verosimilitud  -87.8655041871616"
## [1] "Iteracion  56  log-verosimilitud  -87.8654280408296"
```

```
##          [,1]
##   -10.7987693
## x   0.4993289
```

3.4 Algoritmo BFGS

El algoritmo de Newton tiene el inconveniente de que necesita calcular la inversa de la matriz hessiana. Esto a veces causa problemas numéricos si la matriz hessiana está mal condicionada. Otra alternativa es utilizar el algoritmo BFGS para maximizar la función log-versosimilitud. Este algoritmo, en lugar de calcular la inversa del hessiano, utiliza una aproximación a esta matriz que es numéricamente más estable. El algoritmo consiste en:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha B_k G_k$$

donde B_k es una aproximación de H_k^{-1} (ver más sobre esta matriz). Por eso a este algoritmo se le encuadra dentro de los algoritmos cuasi-Newton.

En R, el algoritmo BFGS está implementado en la función *optim()*. La función *optim(f)* siempre minimiza la función *f*, pero nosotros queremos calcular el máximo (por eso hablamos de máxima verosimilitud). Para resolver este inconveniente tenemos en cuenta que *max(f) = min(-f)*. Por tanto, definimos una nueva función de verosimilitud que es la que vamos a minimizar

```
logit1_logL_optim = function(beta,y,x){
  logL = logit1_logL(beta,y,x)
  return(-logL)
}
```

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

```
mle = optim(par = beta_i, fn = logit1_logL_optim, y = d$InMichelin, x = d$Food, gr = NULL, method = "BF
```

```
## initial  value 111.809621
## iter   2 value 106.088875
## iter   3 value 91.894547
## iter   4 value 88.308224
## iter   5 value 87.891152
## iter   6 value 87.865443
## iter   7 value 87.865332
## iter   8 value 87.865217
## iter   9 value 87.865103
## iter   9 value 87.865103
## iter   9 value 87.865103
## final  value 87.865103
## converged
```

```
mle$par
```

```
## (Intercept)        Food
## -10.8416672   0.5012424
```

3.5 Estimacion con R

3.5.1 Con variable respuesta 0-1

```
m2 = glm(InMichelin ~ Food, data = d, family = binomial)
summary(m2)
```

```
##
## Call:
## glm(formula = InMichelin ~ Food, family = binomial, data = d)
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## (Intercept) -10.84154    1.86234  -5.821 5.83e-09 ***
## Food          0.50124    0.08767   5.717 1.08e-08 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 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: 175.73  on 162  degrees of freedom
## AIC: 179.73
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

Internamente la función glm() utiliza el algoritmo de Newton.

3.5.2 Con variable respuesta como factor

Pero la manera natural de trabajar con variables cualitativas en R es definirlas como factores.

```
d$InMichelin = factor(d$InMichelin, labels = c("No","Yes"))
str(d)
```

```
## 'data.frame':    164 obs. of  6 variables:
##  $ InMichelin     : Factor w/ 2 levels "No","Yes": 1 1 1 2 1 1 2 2 2 1 ...
##  $ Restaurant.Name: chr  "14 Wall Street" "212" "26 Seats" "44" ...
##  $ Food           : int  19 17 23 19 23 18 24 23 27 20 ...
##  $ Decor          : int  20 17 17 23 12 17 21 22 27 17 ...
##  $ Service        : int  19 16 21 16 19 17 22 21 27 19 ...
##  $ Price          : int  50 43 35 52 24 36 51 61 179 42 ...
```

```
m3 = glm(InMichelin ~ Food, data = d, family = binomial)
summary(m3)
```

```
##
## Call:
## glm(formula = InMichelin ~ Food, family = binomial, data = d)
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## (Intercept) -10.84154    1.86234  -5.821 5.83e-09 ***
## Food          0.50124    0.08767   5.717 1.08e-08 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 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: 175.73  on 162  degrees of freedom
## AIC: 179.73
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

El modelo que estamos estimando es:

$$P(Y_i = Yes) = \frac{exp(\beta_0 + \beta_1 x_i)}{1 + exp(\beta_0 + \beta_1 x_i)}$$

Podemos cambiar el nivel de referencia de la variable respuesta:

```
d$InMichelin = relevel(d$InMichelin, ref = "Yes")
m4 = glm(InMichelin ~ Food, data = d, family = binomial)
summary(m4)
```

```
##
## Call:
## glm(formula = InMichelin ~ Food, family = binomial, data = d)
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## (Intercept) 10.84154    1.86234   5.821 5.83e-09 ***
## Food        -0.50124    0.08767  -5.717 1.08e-08 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 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: 175.73  on 162  degrees of freedom
```

```
## AIC: 179.73
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

El modelo que estamos estimando ahora es:

$$P(Y_i = No) = \frac{exp(\beta_0^* + \beta_1^* x_i)}{1 + exp(\beta_0^* + \beta_1^* x_i)}$$

De la salida de R hemos visto que en este caso $\beta_0 = -\beta_0^*$ y $\beta_1 = -\beta_1^*$. Veamos que esto siempre es así. Se tiene que

$$P(Y_i = Yes) = 1 - P(Y_i = No)$$

$$\frac{exp(\beta_0 + \beta_1 x_i)}{1 + exp(\beta_0 + \beta_1 x_i)} = 1 - \frac{exp(\beta_0^* + \beta_1^* x_i)}{1 + exp(\beta_0^* + \beta_1^* x_i)}$$

Operando se tiene que:

$$exp(\beta_0 + \beta_0^* + (\beta_1 + \beta_1^*)x_i) = 1$$

Por tanto, $\beta_0 + \beta_0^* = 0$ y $\beta_1 + \beta_1^* = 0$.