BIOMETRÍA II CLASE 6 REGRESIÓN CON VARIABLES CATEGÓRICAS

Adriana Pérez Depto de Ecología, Genética y Evolución FECN, UBA

Valores de referencia para pruebas de función pulmonar



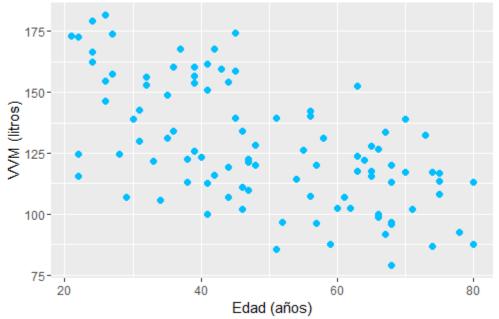
- La ventilación voluntaria máxima (VVM) es el máximo volumen que puede ser ventilado dentro y fuera de los pulmones en un intervalo de 10 a 15 seg mediante esfuerzo voluntario (en litros)
- Se desea establecer valores de referencia de VVM en función de la edad para la población sana brasileña
- Participaron 100 individuos sanos, no fumadores (50 hombres y 50 mujeres), de entre 20 y 80 años de edad

Datos

	sexo 🗘	edad 🗘	vvm [‡]	
1	varón	55	126.2	
2	varón	24	162.5	
3	varón	65	117.4	
4	varón	36	160.5	
5	varón	43	159.6	
6	varón	63	117.5	
7	varón	37	167.6	
8	varón	74	117.3	
9	varón	70	138.8	
Showing 1 to 0 of 100 entries				

edad sexo vvm mujer:50 :21.00 Min. Min. : 78.8 varón:50 1st Qu.:36.75 1st Qu.:107.9 Median :46.50 Median :122.5 :127.1 :49.27 Mean Mean 3rd Qu.:65.00 3rd Qu.:147.0 :80.00 Max. Max. :181.7

Variación del VVM en función de la edad



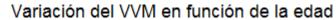
Modelo nulo

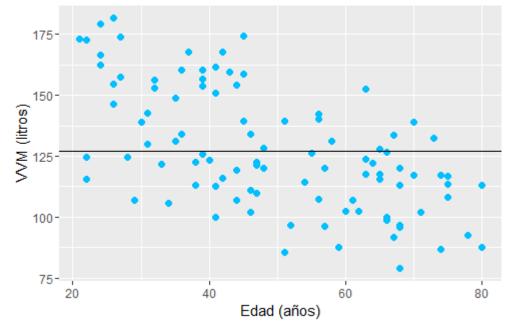
$$Y_i = \beta_0 + \varepsilon_i$$

```
4
```

```
Coefficients:
```

Residual standard error: 24.95 on 99 degrees of freedom

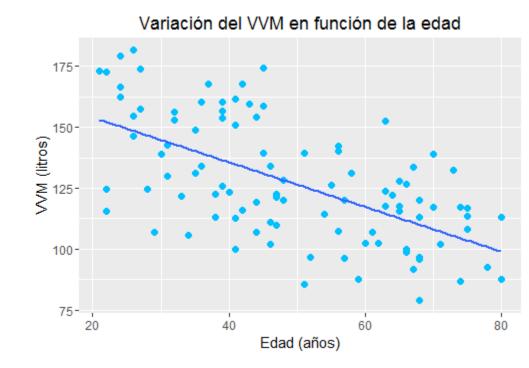




Modelo con una VE

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 edad + \varepsilon_i$$

5



- Las v. cualitativas deben ser codificadas para poder ser incluidas en la regresión (v. auxiliares, indicadoras o dummy)
- Si la variable cualitativa tiene sólo dos categorías se la puede codificar utilizando una única variable cuantitativa que tome valores o o 1 – presencia/ausencia (aunque puede ser cualquier valor numérico). La categoría que toma el valor o es la de referencia
- En nuestro ejemplo, creamos la variable auxiliar varón: o: mujer 1:varón

$$E(VVM) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$$

$$E(VVM) = \beta_0 + \beta_1 E dad + \beta_2 Var\acute{o}n$$

Para Mujeres(Varón = 0):
$$E(VVM) = \beta_0 + \beta_1 E dad$$

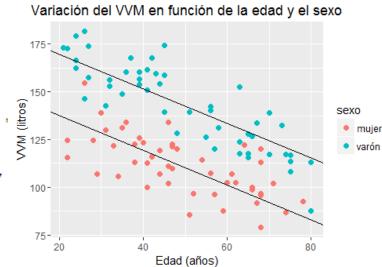
Para Varones(Varón = 1): $E(VVM) = (\beta_0 + \beta_2) + \beta_1 E dad$

- \square β_0 es el valor esperado de Y cuando $X_1 y X_2$ valen o
- β_2 es el cambio esperado en β_0 cuando $X_2=1$

Modelo con 2 VE sin interacción

7

```
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                                 39.81
(Intercept) 155.8252
                        3.9143
edad
            -0.9095
                        0.0718 -12.67 <2e-16
                        2.3421 13.75
sexovarón
            32.2115
                                         <2e-16 ***
                 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '
Signif. codes:
Residual standard error: 11.71 on 97 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7842, Adjusted R-squared: 0.7797
F-statistic: 176.2 on 2 and 97 DF, p-value: < 2.2e-16
> summary(modelo2)$r.squared
[1] 0.7841738
> AIC(modelo2)
```



□ Ho1: β_o = o

[1] 780.8329

- $\Box \quad \text{Ho2: } \beta_1 = o$
- □ Ho3: β_2 = o Prueba de igualdad de ordenada al origen

Ecuaciones para hombres y mujeres?

Interacción entre variables explicatorias

- □ El efecto de una VE sobre la VR cambia según los valores que tome otra VE
- Es decir que el efecto de una VE depende de / se asocia con el valor que tome otra VE (y viceversa) (modificación de efectos)
- Si hay interacción entre VE, pierde relevancia estimar los efectos de una dada VE independientemente de los valores que tome la otra VE con la que interactúa (principio de marginalidad)
- Las interacciones pueden ser entre cualquier tipo de variables (categóricas con categóricas, cuantitativas con categóricas, cuanti con cuanti...)

Modelo de regresión múltiple con dos VE, una continua y otra categórica con dos categorías e interacción

$$E(VVM) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1 X_2$$

$$E(VVM) = \beta_0 + \beta_1 E dad + \beta_2 Var\'on + \beta_3 E dad \cdot Var\'on$$

$$Para\ Mujeres(Var\'on = 0): E(VVM) = \beta_0 + \beta_1 Edad$$

$$Para\ Varones(Var\'on = 1): E(VVM) = (\beta_0 + \beta_2) + (\beta_1 + \beta_3) Edad$$

- β_0 es el valor esperado de Y cuando X_1 y X_2 valen o
- β_1 es el cambio esperado en Y por cada aumento unitario en X_1
- β_2 es el cambio esperado en β_0 cuando $X_2=1$
- β_3 es el cambio esperado en β_1 cuando $X_2=1$

Modelo con 2 VE e interacción (máximo)

10

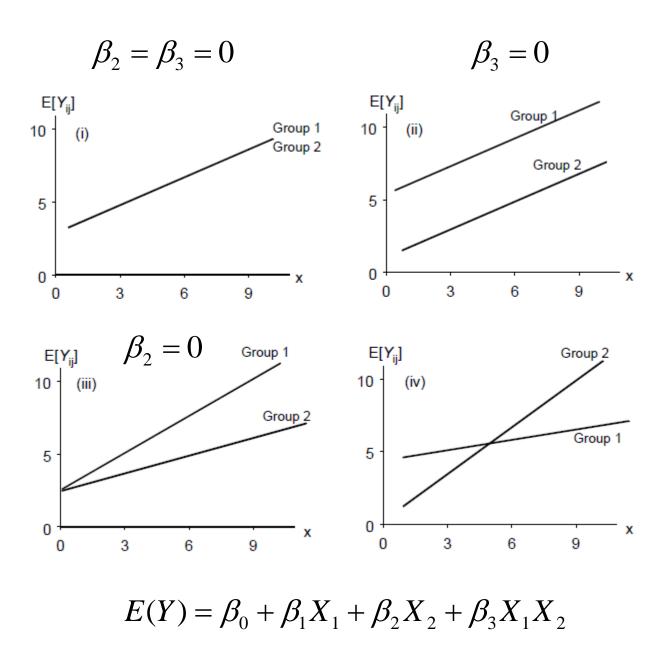
```
Variación del VVM en función de la edad y el sexo
Coefficients:
               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                            5.6124 25.826 < 2e-16
(Intercept)
               144.9467
edad
                -0.6893
                            0.1089 -6.333 7.73e-09
                50.6090
                            7.3459
                                     6.889 5.84e-10
sexovarón
edad:sexovarón -0.3732
                            0.1417 -2.634 0.00984 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '
Residual standard error: 11.37 on 96 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7987,
                                Adjusted R-squared: 0.7924
                                                                100-
               127 on 3 and 96 DF, p-value: < 2.2e-16
F-statistic:
> summary(modelo3)$r.squared
                                                                75-
[1] 0.7987179
> AIC(modelo3)
                                                                               Edad (años)
[1] 775.8563
```

- \Box Ho1: β_o = o
- \Box Ho2: $\beta_1 = o$
- □ Ho3: β_2 = o Prueba de igualdad de ordenada al origen
- □ Ho3: β_3 = o Prueba de igualdad de pendientes (paralelismo)

Ecuaciones para hombres y mujeres?

sexo

mujer 🗕

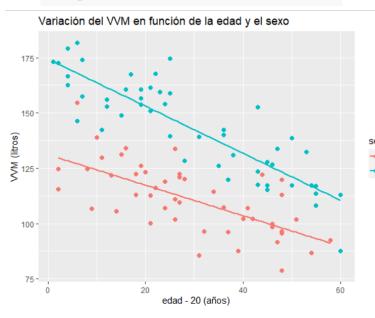


Schabenberger, 2002

¿Y si a cada valor de edad le restamos 20 años (la edad mínima para la que se desean efectuar predicciones)?

	sexo ‡	edad 🗘	vvm [‡]	edad_c‡
1	varón	55	126.2	35
2	varón	24	162.5	4
3	varón	65	117.4	45
4	varón	36	160.5	16
5	varón	43	159.6	23
6	varón	63	117.5	43
7	varón	37	167.6	17
8	varón	74	117.3	54
9	varón	70	138.8	50
10	varón	57	119.9	37

showing 1 to 11 of 100 entries



modelo4<-lm(vvm ~ edad_c*sexo, VVM)

Coefficients:

	L3 C I III a CC	Jea. Ello	c varue	11(/ -		
(Intercept)	131.1602	3.5813	36.624	< 2e-16	***	
edad_c	-0.6893	0.1089	-6.333	7.73e-09	***	
sexovarón	43.1445	4.7329	9.116	1.18e-14	***	
edad_c:sexovarón	-0.3732	0.1417	-2.634	0.00984	**	

Estimate Std Error t value Pr(S|t|)

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

Residual standard error: 11.37 on 96 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.7987, Adjusted R-squared: 0.7924 F-statistic: 127 on 3 and 96 DF, p-value: < 2.2e-16

¿Qué cambia?

modelo3<-lm(vvm ~ edad*sexo, VVM)

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	144.9467	5.6124	25.826	< 2e-16	***
edad	-0.6893	0.1089	-6.333	7.73e-09	***
sexovarón	50.6090	7.3459	6.889	5.84e-10	***
edad:sexovarón	-0.3732	0.1417	-2.634	0.00984	**
-1 16 1	6 f d d d d d d d	0.004 (10.11	0 04 64		

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

Residual standard error: 11.37 on 96 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.7987, Adjusted R-squared: 0.7924 F-statistic: 127 on 3 and 96 DF, p-value: < 2.2e-16

Centrado de X

- Cuando cero está fuera del rango de X, la ordenada al origen no tiene interpretación en contexto
- El centrado de X consiste en restar a los valores de X una constante (promedio, mínimo o cualquier otro valor con sentido para X)
- La ordenada al origen β_0 se interpreta después del centrado como el valor esperado de Y cuando X es igual a la constante
- Si hay interacción significativa, β_2 se interpreta como la diferencia en el valor esperado de Y con respecto a la categoría de referencia cuando X es igual a la constante
- Además evita problemas de colinealidad cuando se incluyen interacciones (lo veremos en la próxima clase)
- Para leer más: Afshartous, D., & Preston, R. A. (2011). Key results of interaction models with centering. *Journal of Statistics Education*, 19(3), 1-24.

Selección de modelos

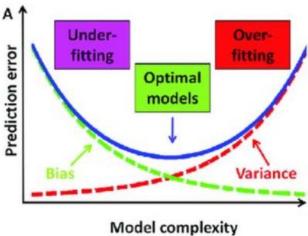
Para p v. explicatorias, existen 2^p -1 modelos posibles. Por ejemplo, si hay 4 v. explicatorias, existen 15 modelos posibles:

1	X1	11	X1 X2 X3
2	X2	12	X1 X2 X4
3	X3	13	X1 X3 X4
4	X4	14	X2 X3 X4
5	X1 X2	15	X1 X2 X3 X
6	X1 X3		
7	X1 X4		
8	X2 X3		
9	X2 X4		
10	X3 X4		

Si hay 10 v.explicatorias, 1023 modelos posibles!

Selección de modelos

Compromiso entre parsimonia (la menor cantidad posible de parámetros) y ajuste (el menor error)



Principio de parsimonia: dado un conjunto de explicaciones igualmente buenas para un fenómeno, la explicación más simple es la correcta. Este principio aplicado a selección de modelos implica:

- Los modelos deben tener la menor cantidad posible de parámetros
- Los modelos con relaciones más simples (por ej lineales) son preferibles a los más complejos (por ej no lineales)
- Los modelos deben ser reducidos hasta encontrar el mínimo adecuado

Criterios para seleccionar el mejor modelo

16

- Mínima varianza residual (S²_e, CM error)
- Máximo R² ajustado
- Mínimo Criterio de información de Akaike (AIC)/Bayesiano
- Retener variables con coeficientes significativos
- Retener variables que provoquen una reducción significativa de la SC residual
- Mínimo Error cuadrático medio de predicción ECMP

Varianza residual

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}{n - p} = \frac{\sum_{i=1}^n e_i^2}{n - p}$$

- En la tabla de anova es el CMerror o residual
- Es el cuadrado del error estándar residual
- Mide la variabilidad en la VR no explicada por las predictoras
- Cuanto más elevada, peor el ajuste del modelo

```
modelo CMe
0 622.525
1 400.401
2 137.128
3 129.219
4 129.219
```

Coeficiente de determinación ajustado

Cuantas más VE se agreguen al modelo, mayor será R² (se explica más variabilidad de Y) => no sirve para comparar modelos con distinta cantidad de VE => R² ajustado

$$R^{2}_{aj} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2} / (n-p)}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \bar{y})^{2} / (n-1)} = 1 - \frac{\hat{\sigma}_{modelo}^{2}}{\hat{\sigma}_{nulo}^{2}}$$

- □ El R²_{ajust} penaliza la incorporación de VE
- Se utiliza para comparar modelos con distinta cantidad de VE

Criterio de información de Akaike

 Resumen la información de un modelo, teniendo en cuenta la falta de ajuste (verosimilitud) y la cantidad de parámetros (parsimonia)

$$AIC = -2\log L(\theta) + 2p$$

- Como la verosimilitud \mathcal{L} es un producto de probabilidades, depende de la cantidad de datos. Por lo tanto AIC puede utilizarse para comparar cualquier par de modelos siempre y cuando se estimen sobre los mismos datos
- Cuanto menor, mejor el modelo
- Idem BIC

df	AIC
2	930.1611
3	887.0140
4	780.8329
5	775.8563
5	775.8563
	2 3 4 5

Error cuadrático medio de predicción (ECMP)

- se estiman los coeficientes del modelo excluyendo a un subconjunto de observaciones
- $_{\square}$ Se calcula el valor esperado de dichas observaciones \hat{y}_{i-1}
- Se definen los residuos de validación cruzada como

$$e_{i-1} = y_i - \hat{y}_{i-1}$$

Se define ECMP como

$$ECMP = \frac{\sum e_{i-1}^{2}}{n}$$

Pruebas de hipótesis

- \Box Ho: $\beta_i = 0$
- Equivale a comparar modelos anidados:

Modelo 2
$$y_i = \beta_o + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon_{ijk}$$
 a parámetros
Modelo 1 $y_i = \beta_o + \beta_1 x_1 + \varepsilon_{iik}$ b parámetros

El modelo 1 está anidado en el modelo 2 si todas las VE que se encuentran en el modelo 1 se incluyen en el modelo 2 , es decir, el conjunto de VE en el modelo 1 es un subconjunto del conjunto de VE en el modelo 2

b<a, el modelo 1 (más simple, reducido) está anidado en el modelo 2

El criterio para establecer si una o un conjunto de VE deben ser retenida en un modelo con k VE es determinar la significación de la reducción en la SC residual

$$F = \frac{(SCres_1 - SCres_2)/(GL_1 - GL_2)}{SCres_2/GL_2}$$

Selección de modelos

Table I. Commonly used model selection methods

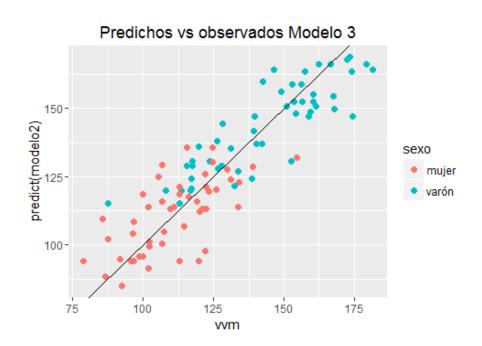
Model selection method	Calculation ^a	Elements	Refs
Adjusted R ²	$R_{adj}^2 = 1 - \frac{RSS/n - p - 1}{\sum (y_i - \bar{y})^2/n - 1}$	Fit	[7]
Likelihood ratio test	$LRT = -2\{ln[\mathit{L}(\hat{\theta}_p y] - ln[\mathit{L}(\hat{\theta}_{p+q} y)]\} \sim \chi_q^2$	Fit and complexity	[7]
Akaike information criterion (AIC)	$AIC = -2ln[L(\hat{\theta}_p y] + 2p$	Fit and complexity	[3]
Small sample unbiased AIC (AIC _c)	$AIC_c = -2ln[L(\hat{\theta_p} y] + 2p\left(\frac{n}{n-p-1}\right)$	Fit and complexity (with bias correction term for small sample size)	[3]
Schwarz criterion	$SC = -2\ln[L(\hat{\theta}_p y] + p \cdot \ln(n)$	Fit, complexity, and sample size	[10]

aRSS, residual sum of squares for a linear model; n, sample size; p, count offree parameters (σ^2 must be included if it is estimated from the data); q, additional parameters of a fuller model; y: data; $L(\hat{\theta}|y)$: likelihood of the model parameters (more precisely, their maximum likelihood estimates, $\hat{\theta}_p$) given the data, y; for a model fitted by least squares with the usual assumptions, $\ln[L(\hat{\theta}_p|y)] = -n/2\ln(RSS/n)$, enabling computation of LRTs, AIC, AIC, and SC from standard regression output.

Johnson, J. B., & Omland, K. S. (2004). Model selection in ecology and evolution. *Trends in ecology & evolution*, 19(2), 101-108.

Validación del modelo

Predichos vs observados



Coeficiente de correlación: r =0.8937

Coeficiente de determinación: R2 =0.8937^2= 0.799

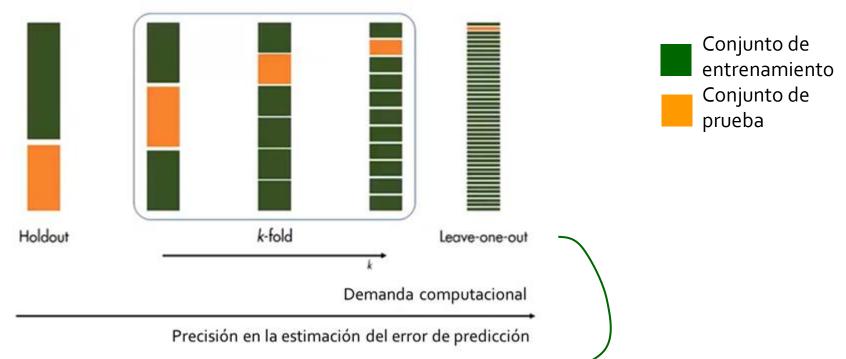
Validación cruzada

- Conjunto de métodos para medir el desempeño de un modelo evaluando su capacidad para predecir un nuevo conjunto de datos independientes
- La idea básica consiste en dividir los datos en dos conjuntos:
 - el conjunto de entrenamiento (training set) utilizado para entrenar (es decir, construir) el modelo
 - el conjunto de prueba (validation set) utilizado para probar (es decir, validar) el modelo mediante la estimación del error de predicción
- Se compara el desempeño predictivo de los modelos usando distintos estadísticos:
 - Raíz del error cuadrático medio (RMSE)
 - Error absoluto medio (MAE)
 - R2 entre predichos y observados

Según modelo estimado con conjunto de prueba $RMSE = \sqrt{ECM} = \sqrt{\frac{\Sigma(y_i - \hat{y})^2}{n}} = \sqrt{\frac{\Sigma e_i^2}{n}}$ $MAE = \sqrt{\frac{\Sigma|y_i - \hat{y}|}{n}} = \sqrt{\frac{\Sigma|e_i|}{n}}$

Métodos de validación cruzada

- Método de retención (holdout): Consiste simplemente en dividir la base de datos aleatoriamente en dos partes (por ej 70:30). Con una se estima el modelo y con la otra se estima el error de predicción. Requiere n grande. Puede presentar sesgos
- Validación cruzada de K-iteraciones (K-fold cross-validation): se divide la muestra en K submuestras, de forma que se utilizan K-1 para estimar el modelo y la restante como conjunto de prueba, este proceso se repite K veces, de forma que cada submuestra es utilizada una vez para evaluar el modelo y K-1 veces para estimarlo. Una vez finalizadas las iteraciones, se calcula el error de predicción para cada uno de los modelos producidos, y para obtener el error final se calcula el promedio de los K modelos entrenados
- Leave-one-out: Idem anterior, salvo que la muestra de validación está formada por un único caso. Computacionalmente demandante, pero máxima precisión
- Se estima el error de predicción de todos los modelos que se están evaluando y se selecciona aquel que produzca el menor error promedio de estimación



```
# Indicamos la función para el entrenamiento
trainControl(method = "LOOCV")
# Entrenamos (estimamos) el modelo 1 (n modelos con n-1 observaciones)
m1loo <- train(VVM~ edad*sexo, data=bd, method ="lm",trControl= train.control
(method = "LOOCV"))</pre>
```

Indicadores de desempeño
RMSE(pred = predict(m1loo,bd),obs = bd\$vvm)

$$error \ relativo = \frac{RMSE}{\overline{Y}}$$

Mejorando la precisión en la estimación

- □ Si n >> p, poco error en las estimaciones
- Si n no es mucho mayor que p, el error es mayor, generalmente hay sobreajuste (el modelo describa a la muestra particular) y las predicciones de futuros casos serán pobres
- Si n < p, no puede aplicarse cuadrados mínimos, ya que no existe una única estimación de los coeficientes del modelo y la varianza es infinita

Reducción de la cantidad de VE (y por lo tanto los coeficientes a estimar)

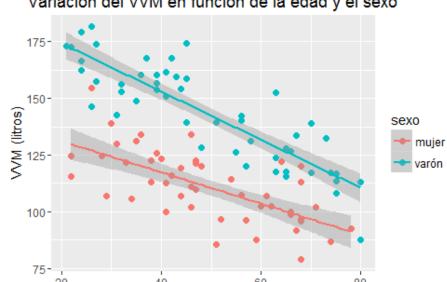
- Se busca mejora la precisión en las estimaciones, con poco aumento del sesgo
- Métodos:
 - Subconjunto de VE (criterios de selección de modelos ya vistos)
 - Shrinkage o encogimiento (regresión penalizada) LASSO
 - Reducción de la dimensionalidad (análisis de componentes principales, técnica multivariada)

28

Predicciones de VVM



Variación del VVM en función de la edad y el sexo



 $Para\ Mujeres(Var\'on=0)$:

VVM = 144,95 - 0,69Edad

Para Varones(Var'on = 1):

$$VVM = (144,95 + 50,61) + (-0,69 - 0,37)Edad =$$

$$=195,56-1,06Edad$$

¿Cuál es el VVM esperado para un hombre de 50 años?

nuevo = data.frame(sexo="varón", edad=50) predict(modelo3, nuevo, interval="predict")

Edad (años)

Ojo, si usamos el modelo centrado, edad_c= 50-20

¿Por qué no efectuar dos regresiones simples en vez de una múltiple?

Tanto para RLS como para RLM las estimaciones de los parámetros son las mismas! $Para\ Mujeres: VVM = 144,95 - 0,69Edad$

Para Varones : VVM = 195,56 - 1,06Edad

- Pero la RLM:
 - Permite comparar estadísticamente los parámetros de ambas regresiones
 - Mejor estimación de la varianza del modelo σ^2 , más GL
 - Si no hay interacción, mejor estimación de β1
 - Menor error global

	RLS	RLS	
	Mujeres	Varones	RLM
n	50	50	100
R^2	0,45	0,75	0,80
CMerror	133,83	124,61	129,22
GLerror	48	48	96
-	-	-	-

Reference values for lung function tests. II. Maximal respiratory pressures and voluntary ventilation

Brazilian Journal of Medical and Biological Research (1999) 32: 719-727

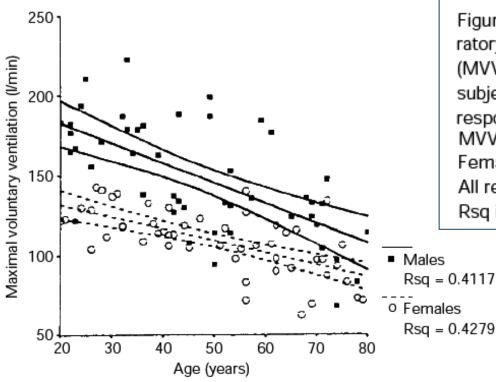


Figure 1 - Maximal inspiratory pressure (MIP) (A), expiratory pressure (MEP) (B) and voluntary ventilation (MVV) (C) as a function of age in 100 healthy sedentary subjects. Regression lines are presented with the corresponding 95% confidence limits (CL). MVV: Males: y = -1.12 (age) + 199.1, SEE = 27.5;

Females: y = -0.76 (age) + 147.4, SEE = 15.3.

All regressions were statistically significant at P<0.01.

Rsq is the coefficient of determination.

Algunos comentarios

- Si existen más de dos categorías se deben generar tantas v. dummy como categorías menos 1 (todas las dummy tomarán el valor o para la categoría de referencia)
- Por ejemplo, si hubiese tres categorías de nivel de actividad física:
 - Baja (referencia)
 - Moderada
 - Alta

	D1	D2
	moderada	alta
baja	0	0
moderada	1	0
alta	0	1

- No es correcto asignar valores crecientes (por ejemplo 1, 2 y 3) ya que la escala de la variable es ordinal y se la convierte en cuantitativa, asignándole una métrica que no posee
- Como ya se vio, los coeficientes miden diferencias con respecto a la categoría de referencia. Pero las comparaciones no están corregidas por múltiples test. Deben aplicarse métodos de comparaciones