Modelos Lineales para Clasificación

Modelo logístico para datos binarios

Juan Zamora O.

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

Junio de 2022

Regresión categórica

Regresión con datos categóricos persigue el mismo objetivo la regresión sobre variable continua

Representar el enlace entre covariables o variables independientes y una respuesta o variable dependiente

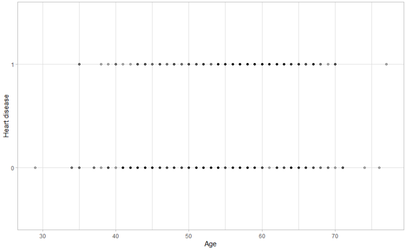
La diferencia más crucial radica en la distribución de la variable dependiente y en la función que vincula las covariables con el valor medio de la respuesta

El caso binario

La distribución de la variable dependiente es distinta al caso clásico, debido a que ya no será posible poder observar cualquier valor

En particular, la variable dependiente podrá tomar valores en $\{0, 1\}$

Sea la variable dependiente codificada por $y = 1$ e $y = 0$ para indicar la ocurrencia o ausencia de un evento



La distribución de la variable aleatoria binaria $y \in \{0, 1\}$ es caracterizada por la probabilidad $\pi = P(y = 1)$

Siendo $P(y = 0) = 1 - \pi$, el valor medio de y se calcula mediante $E[y] = 1 \times \pi + 0 \times (1 - \pi) = \pi$

La varianza es calculada siguiendo el mismo esquema, es decir

$$Var[y] = E[y - E[y]]^2 = (1 - \pi)^2\pi + (0 - \pi)^2(1 - \pi)^2 = \pi(1 - \pi)$$

Odds, Logits y Odds Ratios

A menudo se consideran algunas transformaciones de π como indicadores del comportamiento aleatorio de la respuesta

Una medida que compara las probabilidades de ocurrencia y no ocurrencia del evento es los **Odds** y se define como

$$\gamma(\pi) = \frac{P(y=1)}{P(y=0)} = \frac{\pi}{1-\pi}$$

Alternativamente, también se usa el log de Odds y se denomina función **logit**,

$$logit\,(\pi) = log(\gamma(\pi))$$

Estas medidas cobran importancia si queremos comparar dos grupos, por ejemplo uno experimental y otro de control

Luego, tenemos probabilidades $P(y = 1|G = 1)$ y $P(y = 1|G = 2)$, las cuales podemos contrastar mediante diferencias $\pi_1 - \pi_2$, proporciones $\frac{\pi_1}{\pi_2}$ entre otras

Una medida muy útil son los **Odds Ratio**, ya que comparan Odds en lugar de probablidades mediante $\frac{\pi_1/(1-\pi_1)}{\pi_2/(1-\pi_2)}$

Alternativamente, también se usa la transformación logaritmica, ya que permite fijar con valor 0 cuando ambos grupos son equivalentes

El modelo Logit

Cuando existen 2 grupos se usa solo un predictor binario del tipo

$$logit(\pi(\mathrm{x})) = \mathrm{x}^T\beta$$

Equivalentemente

$$\pi(\mathrm{x}) = \frac{\exp(\mathrm{x}^T\beta)}{1+\exp(\mathrm{x}^T\beta)}$$

o en término de Odds

$$\frac{\pi(x)}{1-\pi(x)} = \exp(\beta_0 + \mathrm{x}^T\beta) = \exp(\beta_0)\exp(\mathrm{x}^T\beta)$$

El modelo Logit

Entendiendo los parámetros

Cuando consideramos un modelo lineal $y = \mathrm{x}^T\beta$, el parámetro β denota el cambio del valor medio de la respuesta cuando x aumenta en una unidad

Para el modelo logit, se aplica la misma idea, pero en terminos de logits.

$$\beta = logit(\pi(x+1)) - logit(\pi(x))$$

El modelo Logit

Entendiendo los parámetros

Desde las perspectiva de las Odds, $\exp(\beta_0)$ representa las Odds cuando $x = 0$. Además, estas *cambian* con un factor $\exp(\beta)$ cuando x aumenta en una unidad.

Entonces esta razón de cambio se puede definir en términos de Odds Ratios

$$\exp(\beta) = \frac{\pi(x+1)/(1-\pi(x+1))}{\pi(x)/(1-\pi(x))} = \frac{\gamma(\pi(x+1))}{\gamma(\pi(x))}$$

La interpretación de β o $\exp(\beta)$ es simple, debido a que modelo logit **supone** que estos Odds Ratios no dependen de x

El modelo Logit
Caso multivariado

Anteriormente, se ha usado x como un valor escalar. Al existir *m* covariables continuas, el predictor tendrá la forma

$$logit(\pi(x)) = \beta_0 + x_1\beta_1 + x_2\beta_2 + \ldots + x_m\beta_m$$

o bien en términos de Odds

$$\gamma(\pi(x)) = \exp(\beta_0)\exp(x_1\beta_1)\exp(x_2\beta_2)\ldots\exp(x_m\beta_m)$$

El análisis del cambio de logits o de Odds es idéntico. Es decir, $\exp(\beta_j)$ corresponde al *cambio multiplicativo* en Odds cuando x_j aumenta en una unidad y todos los demás valores **permanecen fijos**

Modelo Logit con predictores binarios

Consideremos el caso en que la variable dependiente depende de una sola covariable x que puede tener solo dos valores posibles. Codifiquemos esta covaraible en $\{0, 1\}$

La representación habitual será mediante una tabla de contingencia de 2×2

Considerando $\pi(x) = P(y = 1|x)$, el modelo logit será entonces

$$log\left(\frac{\pi(x)}{1 - \pi(x)}\right) = \beta_0 + x\beta$$

Los Log-Odds en la categoría de referencia ($x = 0$)

$$\beta_0 = log\left(\frac{\pi(x=0)}{1-\pi(x=0)}\right)$$

Por lo tanto, a partir del modelo logit especificado en la lámina anterior,

$$\beta = log\left(\frac{\pi(x)}{1-\pi(x)}\right) - log\left(\frac{\pi(x=0)}{1-\pi(x=0)}\right)$$

que corresponde al factor en que cambian los logits cuando $x = 0$ es reemplazado por $x = 1$.

Modelo Logit con predictores categóricos

Como caso más general, también podemos usara covariables que tengan más de 2 valores posibles.

Consideremos una covariable o factor con categorías $\{1, 2, \ldots, K\}$. La forma general del modelo logit estará dada por

$$log\left(\frac{\pi(x=i)}{1-\pi(x=i)}\right) = \beta_0 + \beta_i$$

Si definimos la categoría K como referencia, entonces $\beta_0 = log\left(\frac{\pi(x=K)}{1-\pi(x=K)}\right)$

Luego, cambio aditivo en logit si la categoría de referencia K es reemplazada por la i, estará dado por

$$\beta_i = log\left(\frac{\pi(x=i)}{1-\pi(x=i)}\right) - log\left(\frac{\pi(x=K)}{1-\pi(x=K)}\right)$$

Alternativamente (también para el caso binario), siempre podemos considerar las versiones exponencial

$$\exp(\beta_0) = \frac{\pi(x=K)}{1-\pi(x=K)}$$

$$exp(\beta_i) = \exp\left[log\left(\frac{\pi(x=i)}{1-\pi(x=i)}\right) - log\left(\frac{\pi(x=K)}{1-\pi(x=K)}\right)\right]$$

Estimación de los parámetros

Considerando n observaciones independientes $(x_i, y_i)_{i=1}^n$ con $y_i \in \{0, 1\}$, para el modelo lineal logit

$$P(y_i = 1|x_i) = \frac{\exp(\mathrm{x}^T\beta)}{1 + \exp(\mathrm{x}^T\beta)}$$

los parámetros a estimar son los coeficientes de regresión ¿

Para esto el método más usado es **Máxima Verosimilitud**.

Estimación de los parámetros

Máxima Verosimilitud

Primero se construye la Verosimilitud de los parámetros desconocidos para los datos observados.

Esta Verosimilitud representa la probabilidad de observar la muestra de los datos en función de los parámetros desconocidos

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

Notar que $\pi(x_i)^{y_i}(1 - \pi(x_i))^{1-y_i}$ simplifica a $\pi(x_i)$ cuando $y_i = 1$ y a $(1 - \pi(x_i))$ cuando $y_i = 0$. Además se usa el producto, debido a que $y_, \ldots, y_n$ dado $x_1, \ldots, x_n$ son considerados como independientes

El objetivo de MV es encontrar el vector de parámetros $\widehat{\beta}$ que maximiza la Verosimilitud o la Log-Verosimilitud $l(\widehat{\beta})$

Para esto, se resuelve el sistema de ecuaciones generado mediante

$$\delta l(\beta)/\delta\beta = (\delta l(\beta)/\delta\beta_1, \delta l(\beta)/\delta\beta_2, \ldots, \delta l(\beta)/\delta\beta_p)^T = 0$$

Al calcular las derivadas parciales expresadas anteriormente, este sistema queda expresado como

$$\delta l(\beta)/\delta\beta = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{x}_i \frac{\delta h(\mathrm{x}_i^T\beta)}{\delta\beta} \frac{(y_i - \pi(\mathrm{x}_i))}{\pi(\mathrm{x}_i)(1-\pi(\mathrm{x}_i))}$$

con $h(x) = \frac{\exp(x)}{1+\exp(x)}$ y $\pi(\mathrm{x}_i) = h(\mathrm{x}_i^T\beta)$

Para el modelo logit se obtiene

$$\frac{\delta l(\beta)}{\delta \beta_j} = \sum_{i=1}^{n} x_{ij}(y_i - \pi(x_i))$$

El sistema resultante se resuelve posteriormente de manera iterativa.

Medición de la calidad del ajuste

Previo al uso de un modelo ajustado para inferencia es importante verificar la calidad del ajuste. Es decir, medir el grado de discrepancia entre el modelo ajustado y las observaciones.

La suma de residuos al cuadrado usada para la regresión es inapropiada cuando la respuesta es binaria.

La *Deviance* permite comparar entre el ajuste obtenido y un ajuste ideal.

$$2\{l(\text{Modelo saturado}) - l(\text{Modelo ajustado})\}$$