Regressão Beta para modelagem de taxas e proporções

MAE0006- Modelos de Regressão

Beatriz Ariadna da Silva Ciríaco
Wesley Almeida Cruz

15 de Fevereiro de 2022

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Estatística (PPgMAE)

Sumário

Motivação

Motivação

- Desejamos aplicar uma análise de regressão para uma variável resposta que está contida no intervalo $(0, 1)$;
- Podemos utilizar uma transformação na variável original para que ela esteja contida nos $\mathbb{R}$;
- Porém, esse método tem três defeitos:
  - Perdemos a interpretação da regressão para a variável original;
  - Geralmente regressões desse tipo possuem erros heterocedásticos;
  - As distribuições geralmente são assimétricas e violam condições de normalidade de Gauss-Markov.

Motivação

- Uma alternativa mais natural para esse problema foi proposta por Ferrari e Cribari-Neto (2004), o modelo de regressão Beta;
- É usado para modelagem de variáveis aleatórias contínuas que assumem valores no intervalo (a, b) de tal forma que $a < b; a, b \in \mathbb{R}$;
- Muito útil para proporções (contínuas no intervalo $(0, 1)$);

Motivação

- Na regressão Beta assumimos que a variável resposta segue uma distribuição Beta;
- A interpretação dos parâmetros no modelo proposto é em termos da média da variável resposta e o modelo é naturalmente heterocedástico e é robusto a dados assimétricos;
- Devido à flexibilidade natural da distribuição beta, a sua densidade pode assumir diversos formatos;
- Nesse trabalho, será apresentado a distribuição de probabilidade Beta, o Modelo de Regressão Beta, suas propriedades, análise de diagnóstico e uma aplicação utilizando o pacote *betareg* do *Software RStudio*.

Modelo de probabilidade Beta

Modelo de probabilidade Beta

Seja X uma variável aleatória contínua que pertença a família de distribuição Beta com parâmetros de forma α e β ($X \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$), então a sua função densidade de probabilidade é dada por:

$$f(x; \alpha, \beta) = \frac{1}{\text{B}(\alpha, \beta)} x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1} \, I_{(0,1)}(x), \quad \alpha, \beta > 0,$$

em que $\text{B}(\alpha, \beta) = \dfrac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$ e $\Gamma(\cdot)$ é a função gama.

Modelo de probabilidade Beta

A esperança e variância da distribuição Beta é dada pelas seguintes equações:

$$\mathbb{E}(X) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$$

e

$$\text{Var}(X) = \frac{\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + 1)}$$

A família de distribuição Beta é bastante versátil e uma gama de situações podem ser modeladas por essa distribuição com sucesso.

Entretanto, as aplicações dessa distribuição não incluem situações em que o objetivo é conduzir uma análise de regressão para modelar uma variável resposta em relação a covariáveis exógenas.

Modelo de Regressão Beta

Modelo de Regressão Beta

- A modelagem e os procedimentos inferenciais propostos por Ferrari e Cribari-Neto (2004) são semelhantes aos modelos lineares generalizados (McCullagh Nelder, 1989);
- Uma alternativa ao modelo de regressão Beta é o modelo Simplex proposto por Jørgensen (1997) que possui quatro parâmetros;
- Normalmente, em um contexto de regressão, é normal modelar a média da variável resposta Y. Também é típico que o modelo possua algum parâmetro de dispersão (precisão);
- Para obter essa estrutura na modelagem, deve-se reparametrizar a distribuição Beta de forma que os seus parâmetros se tornem parâmetros de média e dispersão.

Considerando $Y \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$, $\mu = \frac{\alpha}{\alpha+\beta}$ e $\phi = \alpha + \beta$, a reparametrização resulta na nova distribuição $\text{Beta}(\mu\phi, (1-\mu)\phi)$, em que μ é o parâmetro de média e ϕ o parâmetro de dispersão que serão utilizados para a modelagem de regressão.

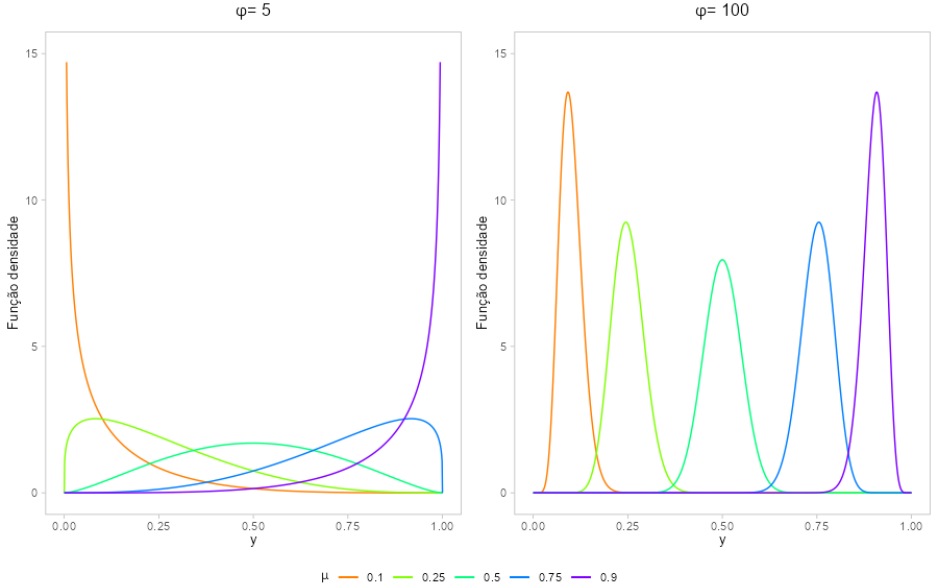
De acordo com a nova reparametrização, a densidade da variável aleatória Y é dada por:

$$f(y; \mu, \phi) = \frac{\Gamma(\phi)}{\Gamma(\mu\phi)\Gamma((1-\mu)\phi)} y^{\mu\phi-1}(1-y)^{(1-\mu)\phi-1} I_{(0,1)}(y),$$

em que $0 < \mu < 1$ e $\phi > 0$.

$$\mathbb{E}(Y) = \mu \quad \text{e} \quad \text{Var}(Y) = \frac{V(\mu)}{1+\phi},$$

em que $V(\mu) = \mu(1-\mu)$.


φ= 5
φ= 100
Função densidade
y
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
0
5
10
15
μ 0.1 0.25 0.5 0.75 0.9

Seja $Y_1, \ldots, Y_n$ variáveis aleatórias independentes, em que Y_i, $i = 1, \ldots, n$, que seguem a distribuição Beta com média μ_i e parâmetro de precisão ϕ desconhecido. A estrutura do modelo de regressão é dado por:

$$g(\mu_i) = \sum_{t=1}^{k} x_{it}\beta_t = \eta_i,$$

em que $\beta = (\beta_1, \ldots, \beta_k)^T$ é o vetor dos parâmetros da regressão e $x_{i1}, \ldots, x_{ik}$ são as observações das k covariáveis ($k < n$), que assumimos ser fixos e conhecidos.

A função de ligação $g(\cdot)$ que mapeia $(0,1) \longrightarrow \mathbb{R}$ é estritamente monótona e diferenciável até a segunda ordem.

Existem outras possíveis funções de ligação, como por exemplo:

- $g(\mu) = -\log[-\log(\mu)]$ (log-log);
- $g(\mu) = \log[-\log(1-\mu)]$ (complemento log-log);
- $g(\mu) = \Phi^{-1}(\mu)$ (probito).

Uma função de ligação particularmente útil é a função logito $g(\mu) = \log[\mu(1-\mu)]$, em que é possível escrever μ_i da seguinte forma:

$$\mu_k = \frac{e^{x_k^T \beta_k}}{1 + e^{x_k^T \beta_k}}.$$

Dessa forma, a interpretação dos parâmetros da regressão pode ser entendida como, ao aumentar c unidades na k-ésima covariável sem que haja alterações nas demais covariáveis, e seja μ_τ a média de Y restrito as novas covariáveis, denote μ a média de Y com as covariáveis originais. É trival, notar que a razão de chances nessa situação é dada por:

$$e^{c\beta_k} = \frac{\mu_\tau(1-\mu_\tau)}{\mu(1-\mu)}.$$

A função de log-verossimilhança é dada pela seguinte expressão:

$$\ell(\beta, \phi) = \sum_{i=1}^{n} \ell_i(\mu_i, \phi)$$

em que,

$$\begin{aligned} \ell_i(\mu_i, \phi) &= \log\Gamma(\phi) - \log\Gamma(\mu_i\phi) - \log\Gamma[(1-\mu_i)\phi] + (\mu_i\phi - 1)\log(y_i) \\ &+ [(1-\mu_i)\phi - 1]\log(1-y_i). \end{aligned}$$

Seja $y_i^* = log[y_i/(1-y_i)]$ e $\mu_i^* = \psi(\mu_i\phi) - \psi[(1-\mu_i)\phi]$. Então a função escore pode ser obtida pela derivação da função de log-verossimilhança com respeito à parâmetros desconhecidos e são dadas por, respectivamente:

$$U_\beta(\beta, \phi) = \phi X^T T(y^* - \mu^*),$$

$$U_\phi(\beta, \phi) = \sum_{i=1}^{n} \{\mu_i(y_i^* - \mu_i^*) + \log(1-y_i) - \psi[(1-\mu_i)\phi] + \psi(\phi)\}.$$

Sendo X uma matriz $n \times k$, em que a i-ésima linha é x_i^T, $T = \text{diag}\{1/g'(\mu_1), \ldots, 1/g'(\mu_n)\}$ e y^* e μ^* são vetores de y_i^* e μ_i^*, definidos anteriormente

Para obter a expressão da informação de Fisher, vamos considerar $W = \text{diag}(w_1, \ldots, w_n)$, com

$$w_i = \frac{c_i}{(g'\mu_i)^2}.$$

em que $c_i = \phi\{\psi'(\mu_i\phi_i) + \psi'[(1-\mu_i)\phi]\}$ e $c = (c_1, \ldots, c_n)^T$, $\psi'(\cdot)$ é a função trigama. Seja $D = \text{diag}(d_1, \ldots, d_n)$, com $d_i = \psi'(\mu_i\phi)\mu_i^2 + \psi'[(1-\mu_i)\phi](1-\mu_i^2) - \psi'(\phi)$. Então, a matriz de informação de Fisher é dada por:

$$\mathbb{K} = \mathbb{K}(\beta, \phi) = \begin{pmatrix} \mathbb{K}_{\beta\beta} & \mathbb{K}_{\beta\phi} \\ \mathbb{K}_{\phi\beta} & \mathbb{K}_{\phi\phi} \end{pmatrix}$$

Sendo $\mathbb{K}_{\beta\beta} = \phi X^T W X$, $\mathbb{K}_{\beta\phi} = \mathbb{K}_{\phi\beta}^T = X^T T c$ e $\mathbb{K}_{\phi\phi} = \text{Tr}(D)$.

Os estimadores de máxima verossimilhança $\hat{\beta}$ e $\hat{\phi}$ para β e ϕ são obtidos quando $U_\beta(\beta, \phi) = 0$ e $U_\phi(\beta, \phi) = 0$, respectivamente. Esses estimadores não possuem forma fechada e devem ser encontrados por meio de algorítmos númericos iterativos, como por exemplo o Newton–Raphson ou Quasi-Newton.

No processo de otimização destes algorítmos é necessário um valor inicial para a estrutura iterativa, a literatura sugere o uso da estimava por mínimos quadrados ordinários para β obtido por uma regressão linear de variáveis transformadas $g(Y_1), \ldots, g(Y_n)$ como ponto inicial.

O valor inicial de ϕ sugerido no artigo é dado por:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\mu_i^{**}(1-\mu_i^{**})}{\sigma_i^{**2}}-1,$$

em que μ_i^{**} é obtido aplicando $g^{-1}(\cdot)$ na i-ésima predição da regressão linear das variáveis transformadas $g(Y_1),\ldots,g(Y_n)$ em X, $\mu_i^{**} = g^{-1}(x_i^T(X^TX)^{-1}X^Tz)$ e $\sigma_i^{**} = e^{**T}e^{**}/[(n-k)g'(\mu^{**})^2]$, em que $e^{**} = z - X(X^TX)^{-1}X^Tz$ é o vetor dos resíduos da regressão por mínimos quadrados ordinários das variáveis resposta transformadas.

Análise de diagnóstico

Após ajustar o modelo de regressão Beta, é importante realizar uma análise de diagnóstico para checar o ajuste. Uma medida de explicação da variabilidade pode ser obtido calculando o pseudo$-R^2(R_p^2)$ definido como $\text{Cor}(\hat{\eta}, g(y))^2$. A medida (R_p^2) varia entre 0 e 1 e a concordância perfeita ocorre quando $(R_p^2) = 1$. A discrepância do ajuste $(\text{D}(y, \mu, \phi))$ pode ser medida utilizando a seguinte expressão:

$$\text{D}(y, \mu, \phi) = \sum_{i=1}^{n} (r_i^d)^2,$$

em que $r_i^d = \text{sign}(y_i - \hat{\mu}_i)[2\ell_i(\tilde{\mu}_i, \hat{\phi}_i)\ell_i(\hat{\mu}_i, \hat{\phi}_i)]^{1/2}$. Note que a i-ésima observação contribui para $(r_i^d)^2$ no desvio e assim observações com valores nominais altos podem ser vistos como discrepantes.

Os resíduos padrão são definidos da seguinte forma:

$$r_i = \frac{y_i - \hat{\mu}_i}{\sqrt{\hat{\text{Var}}(y_i)}}$$

sendo $\hat{\mu}_i = g^{-1}(x_i^T\hat{\beta})$ e $\hat{\text{Var}}(y_i) = [\hat{\mu}_i(1-\hat{\mu}_i)]/(1+\hat{\phi})$. Um gráfico desses resíduos em relação ao indexador das observações não deve mostrar padrões, caso isso ocorra, deve-se verificar se a função de ligação utiliza é a mais adequada.

Como a distribuição dos resíduos é assumida desconhecida, um gráfico de envelope semi-normais simulados é uma ferramenta de diagnóstico bastante útil.

O gráfico de envelope pode ser produzido utilizando o seguinte algorítmo:

i) Ajuste o modelo e gere uma amostra de observações pseudo-aleatória simulada de tamanho n independente usando os valores preditos como o modelo real;

ii) Ajuste o modelo para os dados gerados e compute os valores absolutos dos resíduos ordenados;

iii) Repita i) e ii) k vezes;

iv) Compute a média, mínimo e máximo nos n conjuntos de k estatísticas de ordem;

v) Faço o gráfico desses valores e dos resíduos ordenados da amostra original em relação aos escores semi-normais $\Phi^{-1}[(i+n-1/8)/(2n+1/2)]$.

Os valores mínimos e máximos das k estatísticas de ordem criam os envelopes.

Para verificar observações influentes podemos usar o método de *generalized leverage* proposto por Wei *et. al* (1998), pode ser generalizado pela seguinte expressão evaluada no estimador de máxima verossimilhança de um parâmetro desconhecido θ:

$$\mathrm{GL}(\theta) = \mathrm{D}_\theta \left(-\frac{\partial^2 \ell}{\partial\theta\partial\theta^T} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \ell}{\partial\theta\partial^T}$$

em que ℓ é a função da log-verossimilhança de um prâmetro desconhecido θ e $\mathrm{D}_\theta = \partial\mu/\partial\theta^T$.

Para o caso da regressão Beta, $\mathrm{GL}(\beta, \phi)$ é dado por:

$$\mathrm{GL}(\beta) = TX(X^TQX)^{-1}X^TTM$$

sendo $M = \mathrm{diag}\{m_1, \ldots, m_n\}$ com $m_i = 1/[y_i(1-y_i)]$ e $Q = \mathrm{diag}\{q_1, \ldots, q_n\}$ com

$$q_i = \left\{ \phi[\psi'(\mu_i\phi) + \psi'((1-\mu_i)\phi)] + (y_i^* - \mu_i^*)\frac{g''(\mu_i)}{g'(\mu_i)} \right\} \frac{1}{g'(\mu_i)^2}.$$

Assim, podemos obter a seguinte expressão:

$$\mathrm{GL}(\beta, \phi) = \mathrm{GL}(\beta) + \frac{1}{\gamma\phi} TX(X^TQX)^{-1}X^TTf(f^TTX(X^TQX)^{-1}X^TTM - b^T)$$

em que $b = (b_1, \ldots, b_n)^T$ com $b_i = -(y_i - \mu_i)/[y_i(1-y_i)]$. Quando ϕ é suficientemente grande, $\mathrm{GL}(\beta, \phi) \approx \mathrm{GL}(\beta)$.

Uma medida de influência de cada observação nas estimativas dos parâmetros da regressão é a distância de Cook dada por $k^{-1}(\hat{\beta} - \hat{\beta}_{(i)})^T X^T W X (\hat{\beta} - \hat{\beta}_{(i)})$ em que $\hat{\beta}_{(i)}$ é a estimativa do parâmetro sem a i-ésima observação. Para evitar ter que ajustar o modelo $n + 1$ vezes, é recomendado utilizar uma aproximação da distância de Cook, dada por

$$C_i = \frac{h_{ii} r_i^2}{k(1 - h_{ii})^2}$$

em que h_{ii} é um elemento da matriz $H = W^{1/2} X (X^T W X)^{-1} X^T W^{1/2}$.

Aplicação

Aplicação

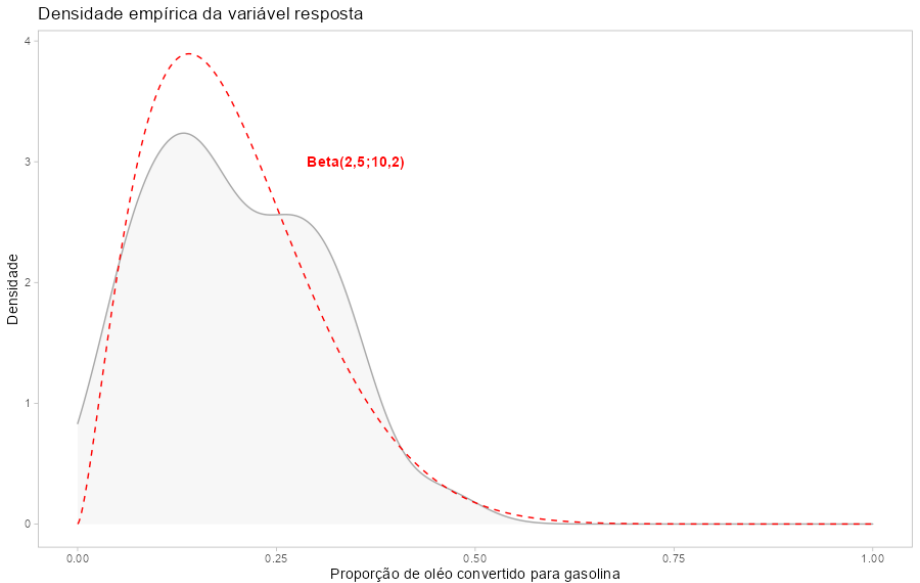
O conjunto de dados possui 32 observações (sem dados faltantes) e foi coletado por Prater (1956), contém as seguintes variáveis:

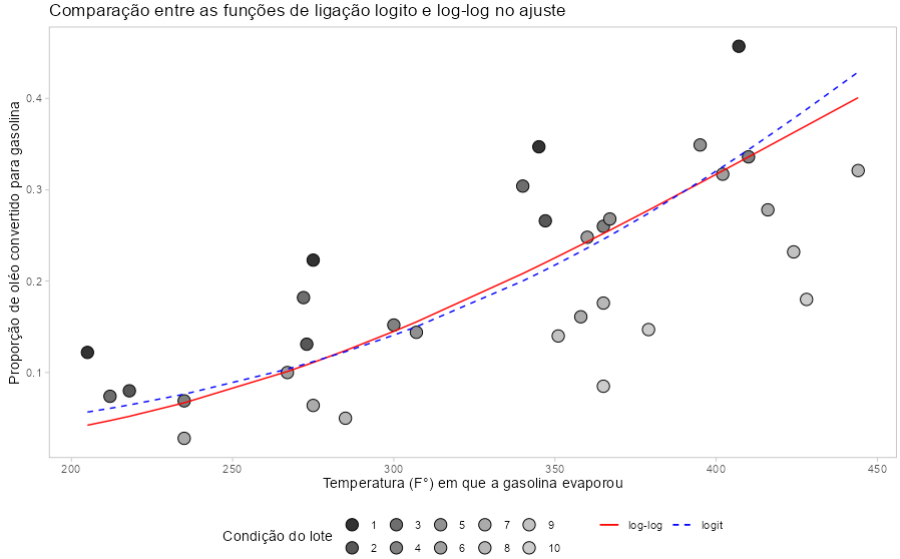
- **yield**: Proporção de óleo não-refinado convertido para gasolina depois de distilação e fracionamento;
- **gravity**: Quão pesado é óleo não-refinado em comparação com àgua (Gravidade API);
- **pressure**: Pressão de vapor do óleo não-refinado (lbs/in^2);
- **temp10**: Temperatura em que 10% do óleo foi vaporizado (F°);
- **temp**: Temperatura em que todo o óleo foi vaporizado (F°);
- **batch**: Fator indicando a condição dos lotes.

Aplicação

A variável resposta na análise será **yield** (numérica entre 0 e 1) e as covariáveis serão **temp** (numérica 0 à infinito) e **batch** (categórica com 10 níveis). O conjunto de dados foi analisado por Atkinson (1985), no trabalho foi utilizado um modelo de regressão linear e foi percebido que a distribuição do erro não era simétrica, gerando resíduos discrepantes.

Assim, ele aplicou uma transformação na variável resposta de forma que **yield*** pertença a reta Real e, então, aplicou o modelo de regressão linear na variável transformada. Para o conjunto de dados proposto, Ferrari e Cribari-Neto (2004), desenvolveram a regressão Beta e a utilizaram para modelar os dados.


Densidade empírica da variável resposta
Beta(2,5;10,2)
Densidade
Proporção de oléo convertido para gasolina
0
1
2
3
4
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00


Comparação entre as funções de ligação logito e log-log no ajuste
Proporção de oléo convertido para gasolina
0.1
0.2
0.3
0.4
200
250
300
350
400
450
Temperatura (F°) em que a gasolina evaporou
Condição do lote
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
log-log
logit

O valor do pseudo-R^2 foi igual à 0.9617 em 51 iterações (BFGS com algorítmo quasi-Newton).

	Estimativa	Erro Padrão	z value	Pr(>|z|)	Signif.
(Intercepto)	-6.16	0.18	-33.78	<2e-16	***
temp	0.01	0	26.58	<2e-16	***
batch1	1.73	0.1	17.07	<2e-16	***
batch2	1.32	0.12	11.22	<2e-16	***
batch3	1.57	0.12	13.54	<2e-16	***
batch4	1.06	0.1	10.35	<2e-16	***
batch5	1.13	0.1	10.95	<2e-16	***
batch6	1.04	0.11	9.81	<2e-16	***
batch7	0.54	0.11	4.98	6.29e-07	***
batch8	0.5	0.11	4.55	5.3e-06	***
batch9	0.39	0.12	3.25	0.00114	**

Aplicação

É notável que existe ao menos um ponto que aparenta ser discrepante, a observação 4, nos gráficos da distância de Cook, Resíduos por Índice, Alavanca generalizada, Valores Preditos por Observáveis e Envelope é o que possui maior destaque. A observação 29 também possui destaque no gráfico de alavanca, mas ao investigar esse ponto não apresenta uma diferença muito larga em relação aos demais pontos, com exceção do 4. (Ver R)

Portanto, foi aplicado uma segunda modelagem *post-hoc* sem a quarta observação, dada que ela foi julgada como influente nos dados.

As estimativas pontuais entre os dois modelos não foram muito divergentes, mas o parâmetro de precisão ϕ aumentou de 440.3 para 577.8. Porém, a diferença entre os erros padrão assintóticos dos dois modelos foram negligenciáveis.

Aplicação

	Estimativa	Erro Padrão	z value	Pr(>|z|)	Signif.
(Intercepto)	-6.36	0.17	-37.04	<2e-16	***
temp	0.01	0	29.05	<2e-16	***
batch1	1.89	0.1	18.83	<2e-16	***
batch2	1.37	0.1	13.15	<2e-16	***
batch3	1.63	0.1	15.8	<2e-16	***
batch4	1.08	0.09	12.04	<2e-16	***
batch5	1.15	0.09	12.7	<2e-16	***
batch6	1.06	0.09	11.38	<2e-16	***
batch7	0.57	0.1	5.91	3.39e-09	***
batch8	0.5	0.1	5.25	5.25e-07	***
batch9	0.39	0.1	3.71	0.0002	***

Considerações Finais

Considerações Finais

As análises foram replicadas utilizando o *Software RStudio* (Versão 4.1.1) com auxílio do pacote *tidyverse* para fins de transformação de variáveis e gráficos e o pacote *betareg* para realizar a regressão Beta. Para visualizar os códigos realizados acesse o seguinte repositório do GitHub:

https://github.com/wesleyacruzzz/trabalho_regressao_mestrado.

Referências

- Bury, K. (1999) Statistical Distributions in Engineering (New York: Cambridge University Press).
- Cribari-Neto F, Zeileis A (2010). “Beta Regression in R.” Journal of Statistical Software, 34(2), 1–24. URL http://www.jstatsoft.org/v34/i02/.
- Ferrari SLP, Cribari-Neto F (2004). “Beta Regression for Modelling Rates and Proportions.” Journal of Applied Statistics, 31(7), 799–815.
- Johnson, N. L., Kotz, S. Balakrishnan, N. (1995) Continuous Univariate Distributions, vol. 2, 2nd edn (New York: Wiley).
- Jørgesen, B. (1997) Proper dispersion models (with discussion), Brazilian Journal of Probability and Statistics, 11, pp. 89–140.

Referências

- McCullagh, P. Nelder, J. A. (1989) Generalized Linear Models, 2nd edn (London: Chapman and Hall).
- Nocedal, J. Wright, S. J. (1999) Numerical Optimization (New York: Springer-Verlag).
- RStudio Team. RStudio: Integrated Development for R. RStudio, Inc., *Boston*, MA URL. Disponível em: *http://www.rstudio.com/*.
- Wei, B.-C., Hu, Y.-Q. Fung, W.-K. (1998) Generalized leverage and its applications, Scandinavian Journal of Statistics, 25, pp. 25–37.