Modelos de regressão para dados discretos (parte 1): dados binários

Prof. Caio Azevedo

Exemplo 2: Estudo sobre vasoconstrição

- Dados sobre um estudo de vasoconstrição (veja Paula, 2013, Finney, 1978 e Pregibon, 1981).
- Nesse estudo, foram medidos de 3 pacientes o volume e a razão de ar inspirado, como também a ocorrência ou não de vasoconstrição (contração de vasos sanguíneos) na pele dos dedos da mão. O primeiro paciente contribuiu com 9 observações, o segundo com 8 e o terceiro com 22.
- Em princípio, não seria razoável assumir independência entre as observações. Contudo, por enquanto, assumiremos (metodologias mais apropriadas: modelos mistos, modelos hierárquicos).

Banco de dados

Medida	Ocorrência	Volume	Razão
1	1	3,70	0,82
2	1	3,50	1,09
⋮	⋮	⋮	⋮
7	0	0,60	0,75
8	0	1,10	1,70
⋮	⋮	⋮	⋮
39	1	1,30	1,62

Exemplo 8: mortalidade de besouros

- Dados relativos ao percentual de besouros mortos quando expostos à diferentes doses de disulfeto de carbono gasoso (CS_2).

Dose: $log_{10} CS_2$	n^o Besouros expostos	n^o Besouros mortos
1,6907	59	6
1,7242	60	13
1,7552	62	18
1,7842	56	28
1,8113	63	52
1,8369	59	53
1,8610	62	61
1,8839	60	60

Distribuições Bernoulli e Binomial

- Bernoulli

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

- binomial

  Seja Y^* a proporção de sucessos em m ensaios de Bernoulli independentes. Logo, temos que $mY^* \sim$ binomial(m, μ). Nesse caso $\mathcal{E}(Y^*) = \mu, \mu \in (0,1)$. Além disso,

$$f_{Y^*}(y^*) = \binom{n}{ny^*} \mu^{ny^*} (1-\mu)^{n-ny^*} \mathbb{1}_{\{0,1/m,2/m,\ldots,1\}}(y^*)$$

Distribuições Bernoulli e Binomial

No Exemplo 2 temos $y_i = 1$ (Bernoulli) se ocorreu vaso constrição na i-ésima medida e 0 caso contrário. No Exemplo 8 temos que m_i é a quantidade de besouros expostos a i-ésima dose de de CS_2 enquanto que $y_i = m_i y_i^*$ é a quantidade observada de besouros, expostos a i-ésima dose de CS_2 que morreram.

Modelo de regressão (geral) para dados binários

$$Y_i \overset{ind.}{\sim} \text{Bernoulli}(\mu_i)$$

$$F^{-1}(\mu_i) = \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ji} \quad \rightarrow \quad \mu_i = F\left(\sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ji} \right), i = 1, 2, ..., n$$

- Y_i : ocorrência (1) ou não (0) de algum evento.
- x_{ji} : valor da variável explicativa j associada ao indivíduo i; β_j : parâmetro associado ao impacto de cada covariável na probabilidade de ocorrência do supracitado evento.
- $F(.)$: função de distribuição acumulada de alguma variável aleatória (contínua) com suporte em $\mathcal{R}$. $F^{-1}(.)$ é conhecida como função de ligação.
- Modelo com intercepto: $x_{1i} = 1, \forall i$.

Modelo de regressão (geral) para dados binários (agrupados)

Análogo ao caso anterior, mas considerando que

$$Y_i = m_i Y_i^* \overset{ind.}{\sim} \text{binomial}(m_i, \mu_i)$$

- Y_i : quantidade de ocorrências de algum evento.
- As outras quantidades são como antes definidas.

Comentários

- Se, por exemplo, $F(.)$ corresponder à fda de uma v.a. logística padrão, teremos $\ln\left(\frac{\mu_i}{1-\mu_i}\right) = \eta_i$ (regressão logística).
- Note que em ambos os modelos podemos usar uma função de ligação que não corresponda ao inverso de uma fda. Contudo, corre-se o risco de se ter valores preditos para a média fora do intervalo (0,1).

Estimação por MV: modelo Bernoulli

- Nesse caso, $\phi = 1$.
- Lembremos que, para esse modelo, a função de ligação logito, $\ln\left(\frac{\mu_i}{1-\mu_i}\right)$ é a função de ligação canônica.
- Ligação canônica: $\boldsymbol{S}(\beta) = \frac{\partial l(\boldsymbol{\beta}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}'(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})$, em que $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, ..., \mu_n)'$ e $\mu_i = \frac{e^{\eta_i}}{1 + e^{\eta_i}}, i = 1, 2, ..., n$.

Estimação por MV: modelo Bernoulli

- Ligação não-canônica: $\boldsymbol{S}(\beta) = \dfrac{\partial l(\beta, \phi)}{\partial \beta} = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{W}^{1/2}\boldsymbol{V}^{-1/2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})$,

  em que $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, ..., \mu_n)'$, $\mu_i = F(\eta_i), i = 1, 2, ..., n$,

  $\boldsymbol{V} = (V_1, ..., V_n)$, $V_i = \mu_i(1 - \mu_i), i = 1, 2, ..., n$, $\boldsymbol{W} = (\omega_1, ..., \omega_n)$ e

  $\omega_i = \left(\dfrac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i}\right)^2 V_i^{-1} = \dfrac{(f(\eta_i))^2}{\mu_i(1 - \mu_i)}$, em que $f(\eta_i) = \dfrac{\partial F(\eta_i)}{\partial \eta_i}$.
- Ligação canônica: $\boldsymbol{I}(\beta) = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{V}\boldsymbol{X}$.
- Ligação não-canônica: $\boldsymbol{I}(\beta) = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{W}\boldsymbol{X}$.

Estimação por MV: modelo binomial

- Lembremos que se $m_i Y_i^* \sim$ binomial(m_i, μ_i) então $\phi_i = m_i$.
- Ligação geral: (veja slides `http://www.ime.unicamp.br/~cnaber/aula_Intro_MLG_MLG_1S_2016.pdf`). Nesse caso, temos que

$$\begin{aligned} l(\boldsymbol{\beta}) &= \sum_{i=1}^{n} \phi_i y_i^* \theta_i - \sum_{i=1}^{n} \phi_i b(\theta_i) + \sum_{i=1}^{n} c(y_i^*, \phi_i) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \phi_i y_i^* \theta_i - \sum_{i=1}^{n} \phi_i b(\theta_i) + \text{const.} \end{aligned}$$

Estimação por MV: modelo binomial

- Além disso

$$S(\beta_j) = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \sqrt{\frac{\omega_i}{V_i}} \left(\phi_i y_i^* - \mu_i \phi_i\right) X_{ji} \right\}$$

Assim, os resultados obtidos anteriormente podem ser usados considerando-se $y_i = \phi_i y_i^*$, $\mu_i^* = \mu_i \phi_i$ e $\phi = 1$.

- Logo, temos que sob a ligação canônica: $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{X}'(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}^*)$ em que $\boldsymbol{\mu}^* = (\mu_1^*, ..., \mu_n^*)$ e $\mu_i = F(\eta_i), i = 1, 2, ..., n$.

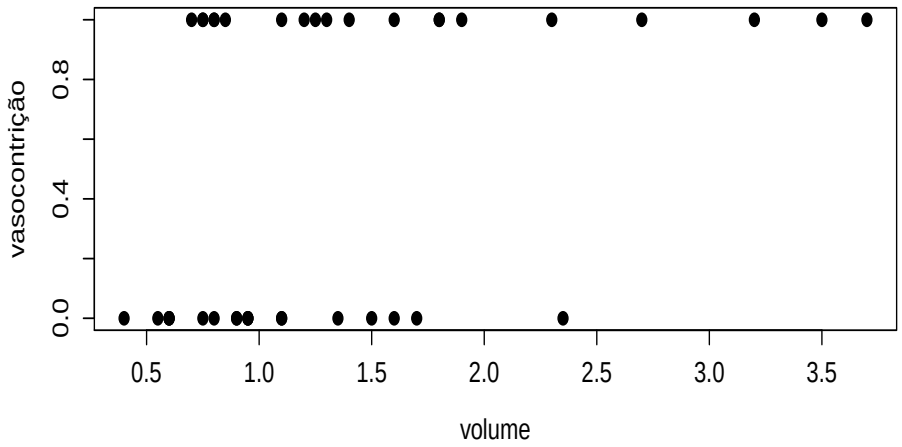
Estimação por MV: modelo binomial

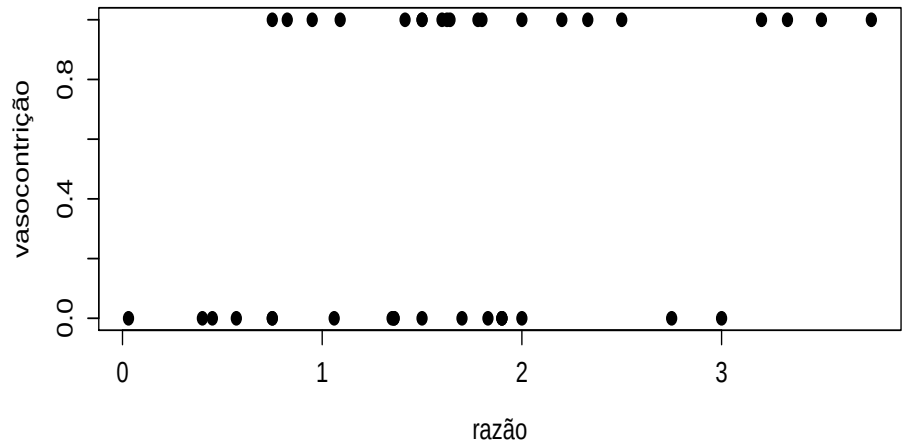
- Ligação não-canônica: $\boldsymbol{S}(\beta) = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{W}^{1/2}\boldsymbol{V}^{-1/2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}^*)$, em que $\boldsymbol{V} = (V_1, ..., V_n)$, $V_i = \dfrac{\partial \mu_i^*}{\partial \theta_i} = m_i \dfrac{\partial \mu_i}{\partial \theta_i} = m_i \mu_i (1 - \mu_i)$, $i = 1, 2, ..., n$, $\boldsymbol{W} = (\omega_1, ..., \omega_n)$ e $\omega_i = \left(\dfrac{\partial \mu_i^*}{\partial \eta_i}\right)^2 V_i^{-1} = \left(m_i \dfrac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i}\right)^2 V_i^{-1} = m_i^2 \dfrac{(f(\eta_i))^2}{m_i \mu_i (1 - \mu_i)} = m_i \dfrac{(f(\eta_i))^2}{\mu_i (1 - \mu_i)}$.
- Ligação canônica: $\boldsymbol{I}(\beta) = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{V}\boldsymbol{X}$.
- Ligação não-canônica: $\boldsymbol{I}(\beta) = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{W}\boldsymbol{X}$.

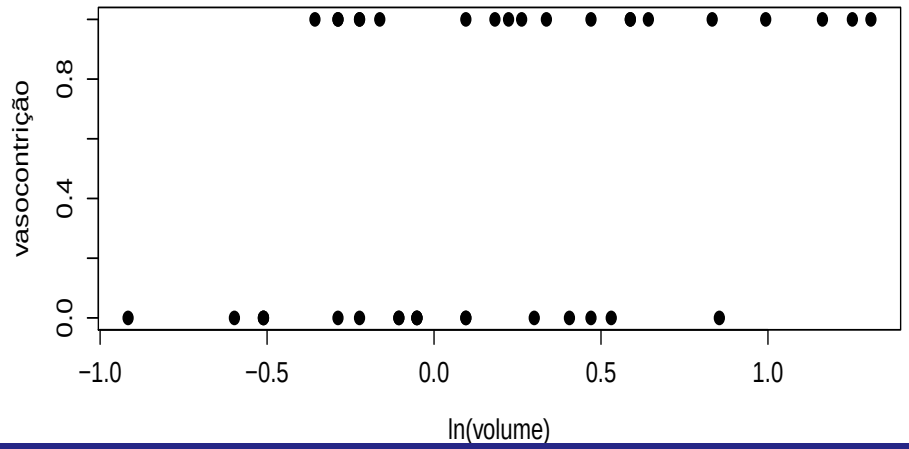
Estimação por MV sob a função de ligação log

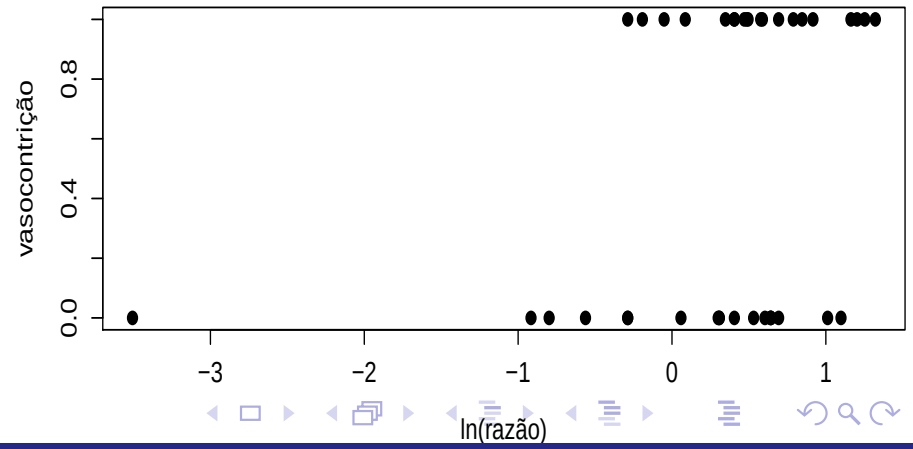
- Dessa forma, devemos utilizar o processo iterativo (algoritmo Escore de Fisher), apresentado anteriormente (slide 16) de `http://www.ime.unicamp.br/~cnaber/aula_Intro_MLG_Parte2_MLG_1S_2016.pdf`), para obtermos estimativas para $\boldsymbol{\beta}$.
- As formas do desvio e do RCD para o modelo binomial/Bernoulli já foram vistas anteriormente, respectivamente: slides 24 e 26 (`http://www.ime.unicamp.br/~cnaber/aula_Intro_MLG_Parte2_MLG_1S_2016.pdf`) e slides 6 e 7 (`http://www.ime.unicamp.br/~cnaber/aula_Ana_Res_MLG_MLG_1S_2016.pdf`).

Gráficos de dispersão individuais

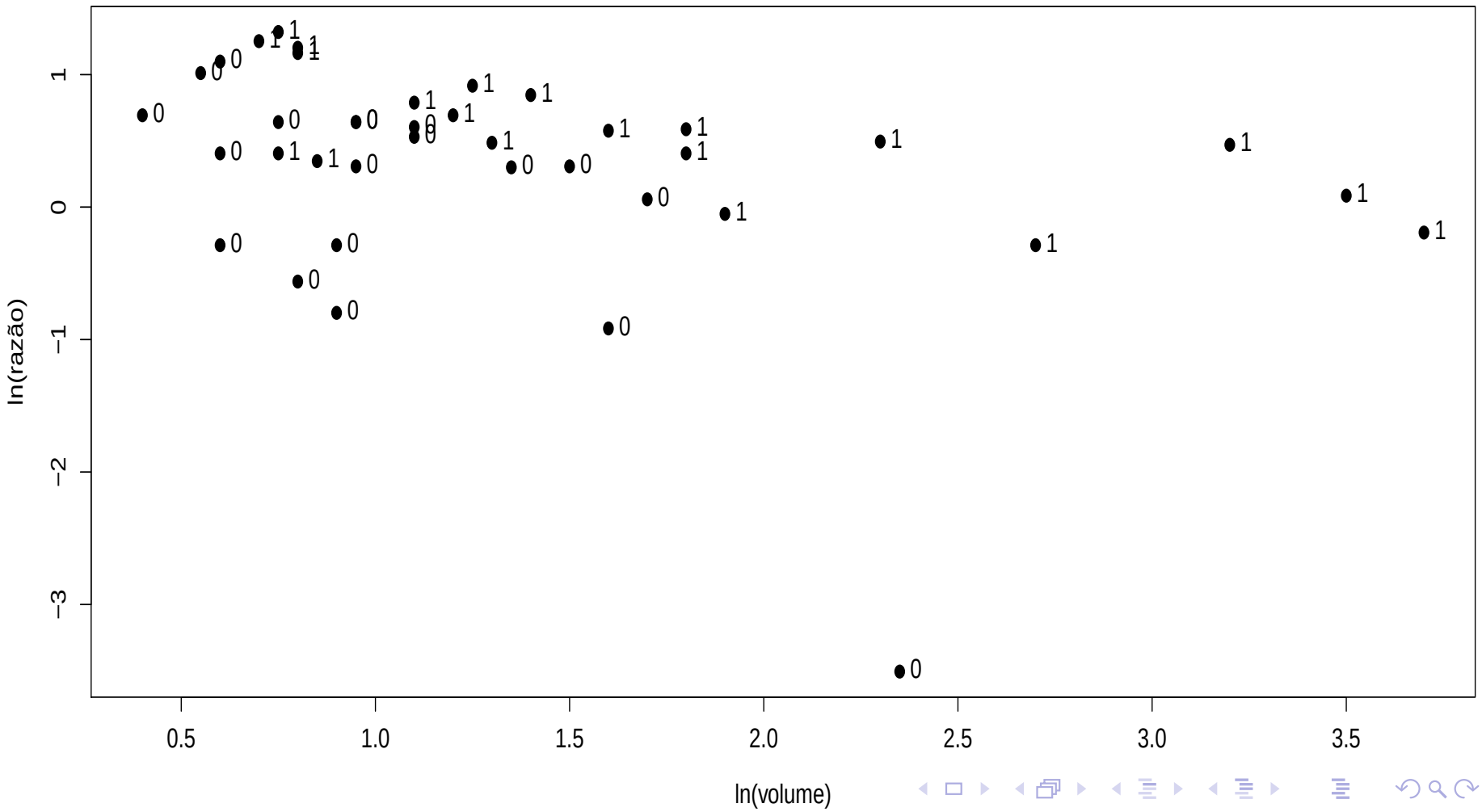








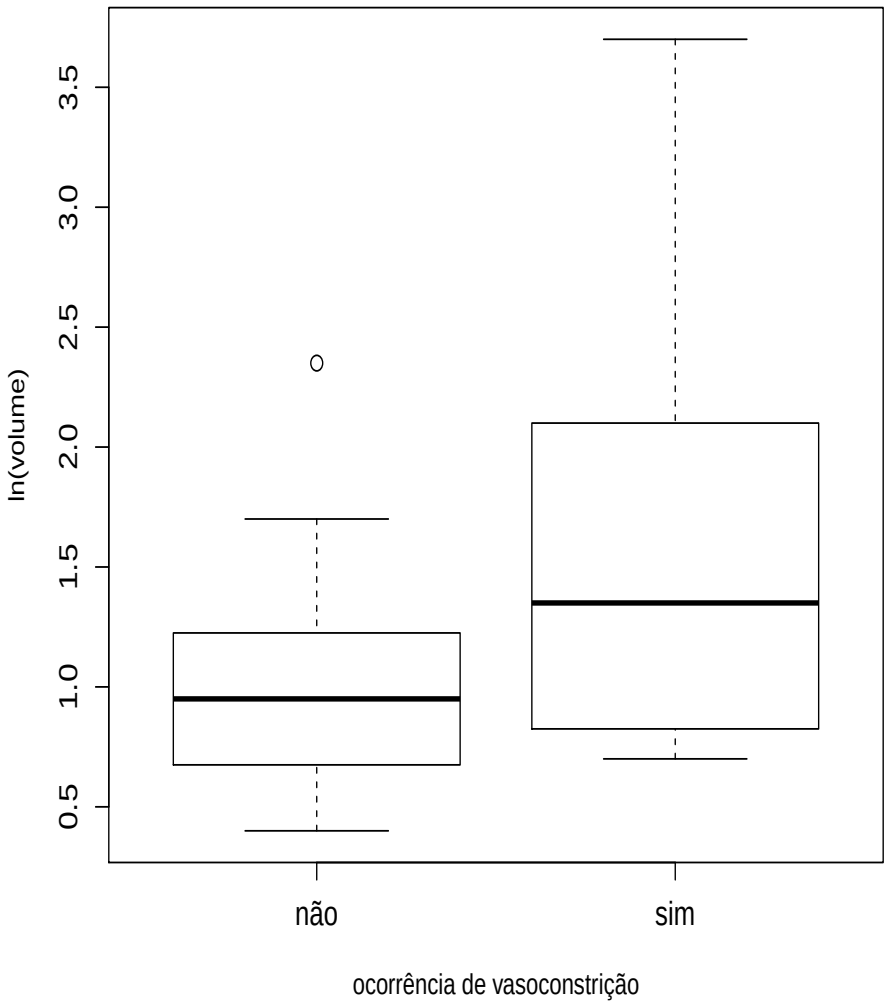
Gráficos de dispersão: ln (razão) $\times$ ln(volume)

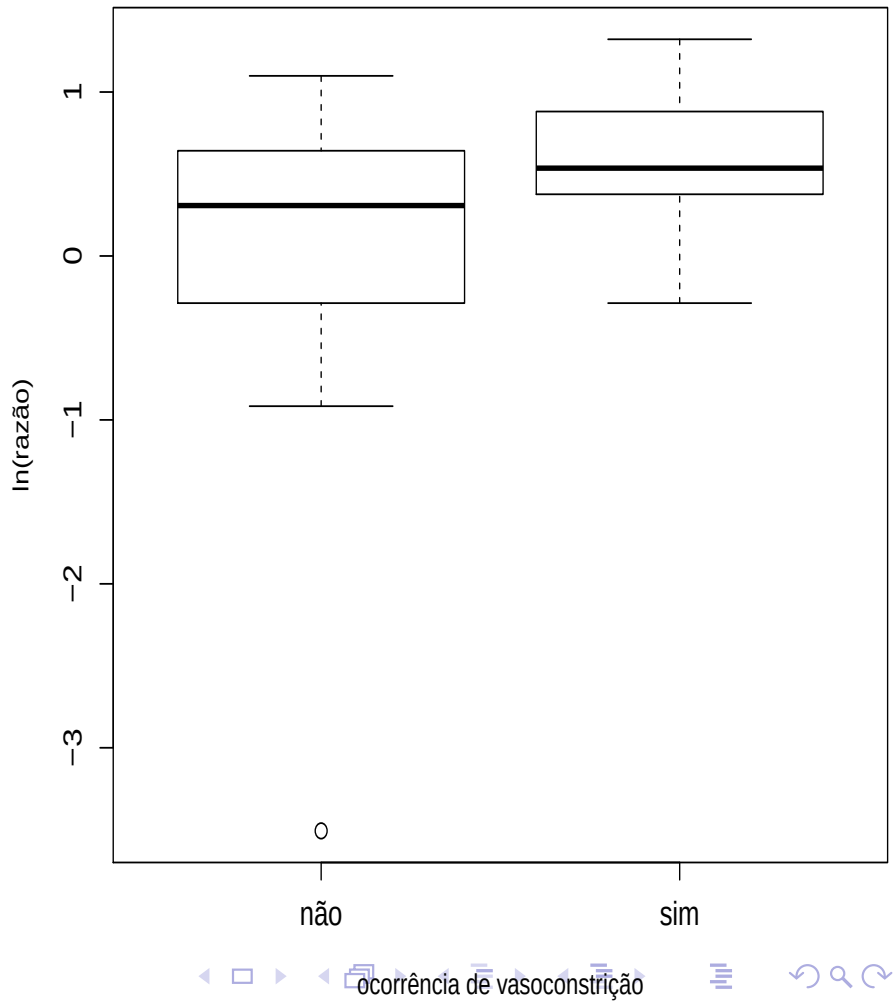


Medidas resumo ln (razão) e ln(volume)

	ln(volume)		ln(razão)	
	Resposta			
Medida resumo	0	1	0	1
Média	-0,06	0,37	0,05	0,58
Mediana	-0,05	0,30	0,31	0,54
DP	0,45	0,54	1,03	0,46
Var.	0,20	0,29	1,07	0,22
|CV(%)|	723,00	147,00	2223,00	81,00
Min.	-0,92	-0,36	-3,51	-0,29
Max.	0,85	1,31	1,10	1,30

Box-plots das variáveis ln (razão) $\times$ ln(volume)





Modelo de regressão para os dados de vasoconstrição

$$
\begin{aligned}
Y_i &\overset{ind.}{\sim} \text{Bernoulli}(\mu_i) \\
\text{logito}(\mu_i) = \ln\left(\frac{\mu_i}{1-\mu_i}\right) &= \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} \\
&\rightarrow \quad p_i = \frac{e^{\beta_0+\beta_1 x_{1i}+\beta_2 x_{2i}}}{1+e^{\beta_0+\beta_1 x_{1i}+\beta_2 x_{2i}}}, i = 1, 2, ..., n
\end{aligned}
$$

- Y_i : ocorrência (1) ou não (0) de vaso constrição.
- x_{1i} : logaritmo natural do volume de ar inspirado da i-ésima observação; x_{2i} : logaritmo natural da razão de ar inspirado da i-ésima observação.
- $F(.)$: corresponde à fda de uma distribuição logística padrão (portanto o nome regressão logística). Nesse caso, o logito(.) é a função de ligação.

Modelo de regressão para os dados de vasoconstrição

- Interpretação dos parâmetros. Defina $l(\mu_i) = \text{logito}(\mu_i)$.
- Se $x_{1j} = x_{2j} = 0$, então $\mu_i = \dfrac{e^{\beta_0}}{1 + e^{\beta_0}}$.
- Defina $l_1(\mu_{i+1}) = \beta_0 + \beta_1(x_{1i} + 1) + \beta_2 x_{2i}$ e

  $l_1(\mu_i) = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i}$. Então

  $l_1(\mu_{i+1}) - l_1(\mu_i) = \beta_1 \rightarrow \dfrac{\mu_{i+1}/(1-\mu_{i+1})}{\mu_i/(1-\mu_i)} = e^{\beta_1}$ (**razão de chances em relação à primeira covariável**).
- Analogamente, defina $l_2(\mu_{i+1}) = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2(x_{2i} + 1)$ e

  $l_2(\mu_i) = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i}$. Então

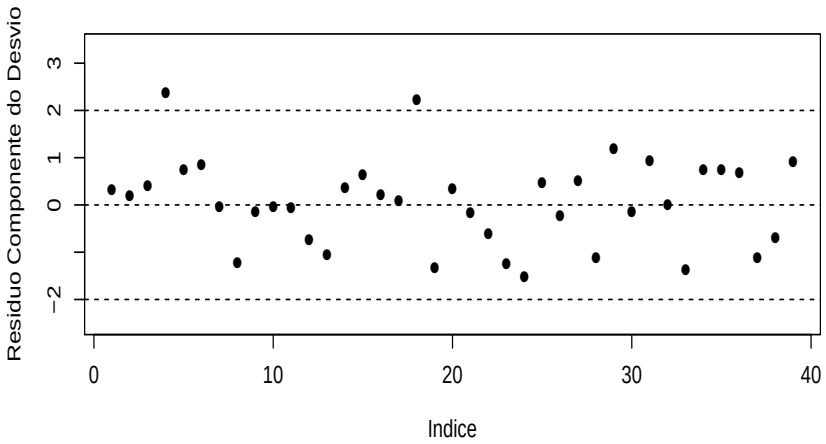
  $l_2(\mu_{i+1}) - l_2(\mu_i) = \beta_2 \rightarrow \dfrac{\mu_{i+1}/(1-\mu_{i+1})}{\mu_i/(1-\mu_i)} = e^{\beta_2}$ (**razão de chances em relação à segunda covariável**).

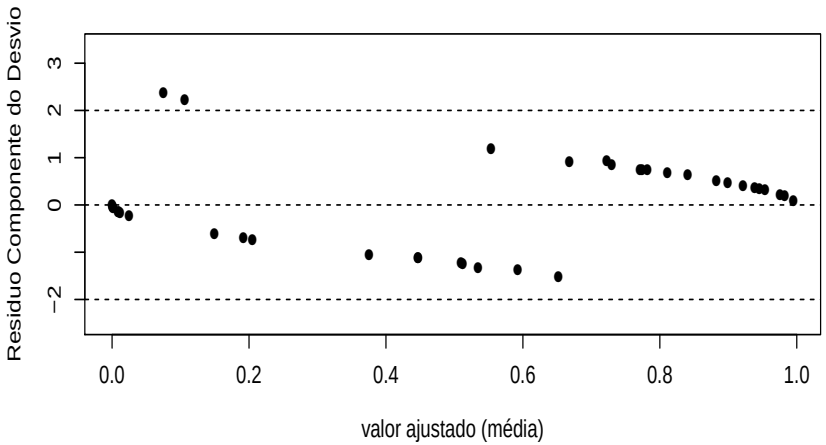
Estimativas relativas ao modelo de regressão logística

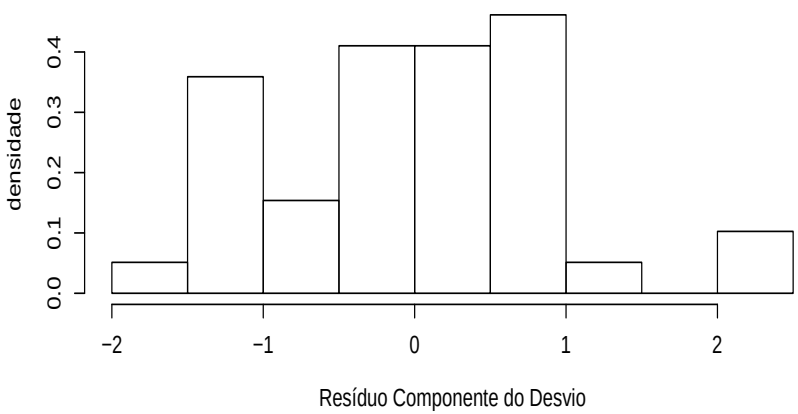
Parâmetro	Estimativa	EP	IC(95%)	Estat. Z_t	p-valor
β_0	-2,87	1,32	[-5,46 ; -0,29]	-2,18	0,0295
β_1	5,17	1,86	[1,52 ; 8,83]	2,78	0,0055
β_2	4,56	1,83	[0,96 : 8,16]	2,48	0,0131

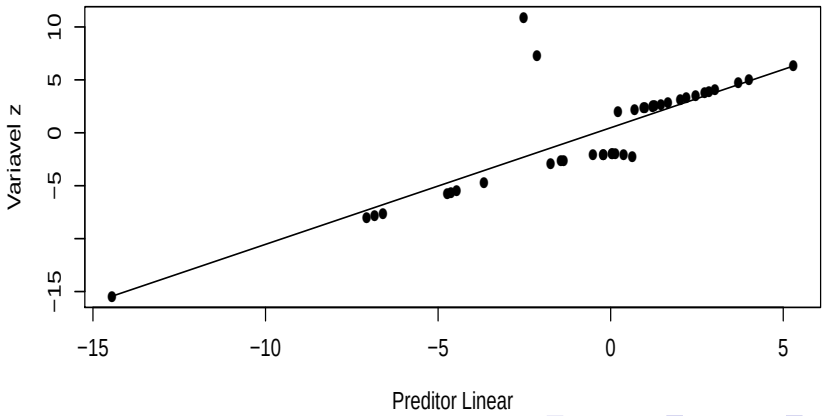
Todos os parâmetros são significativos.

Gráficos de diagnóstico: ligação logito

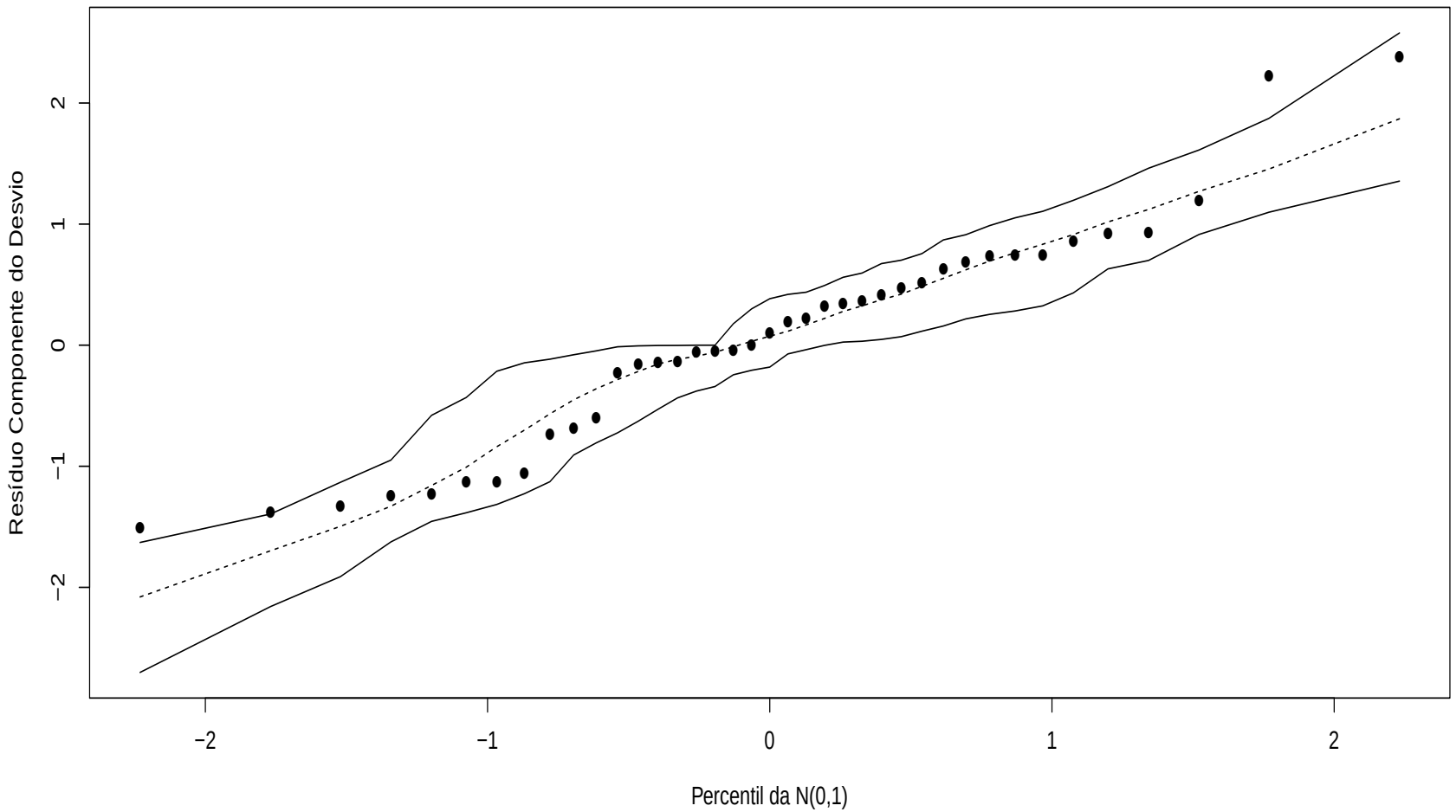








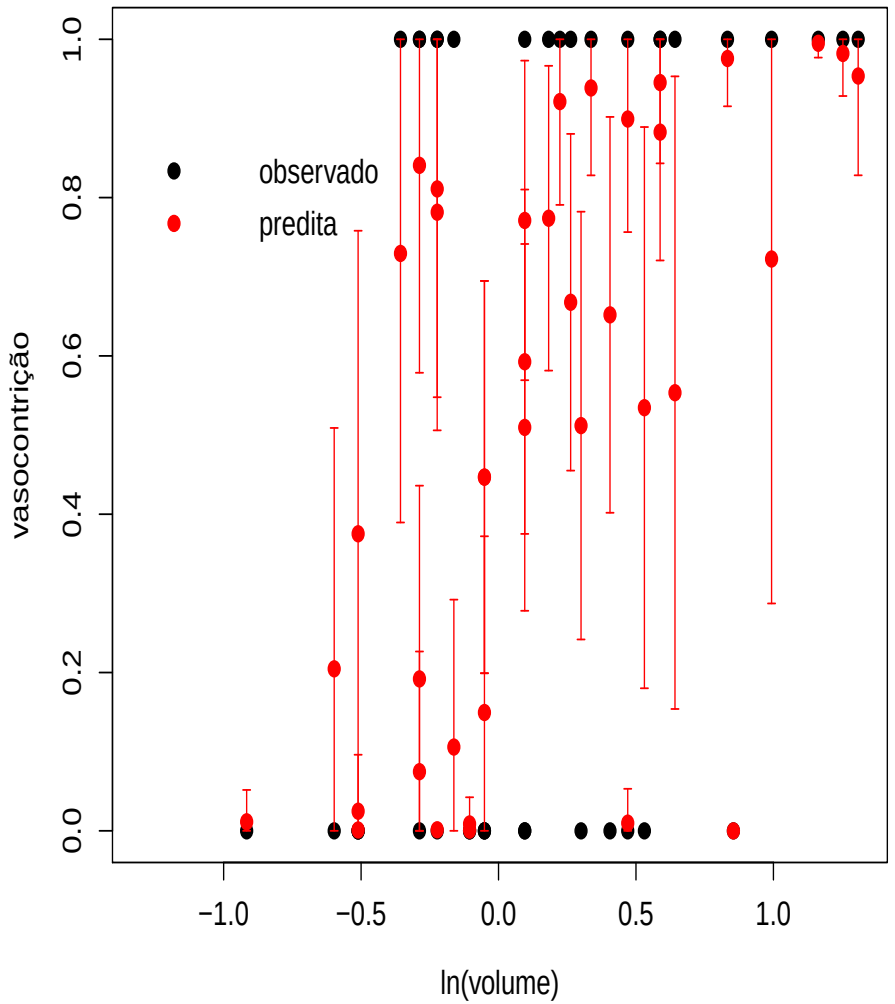
Envelope para os resíduos: ligação logito

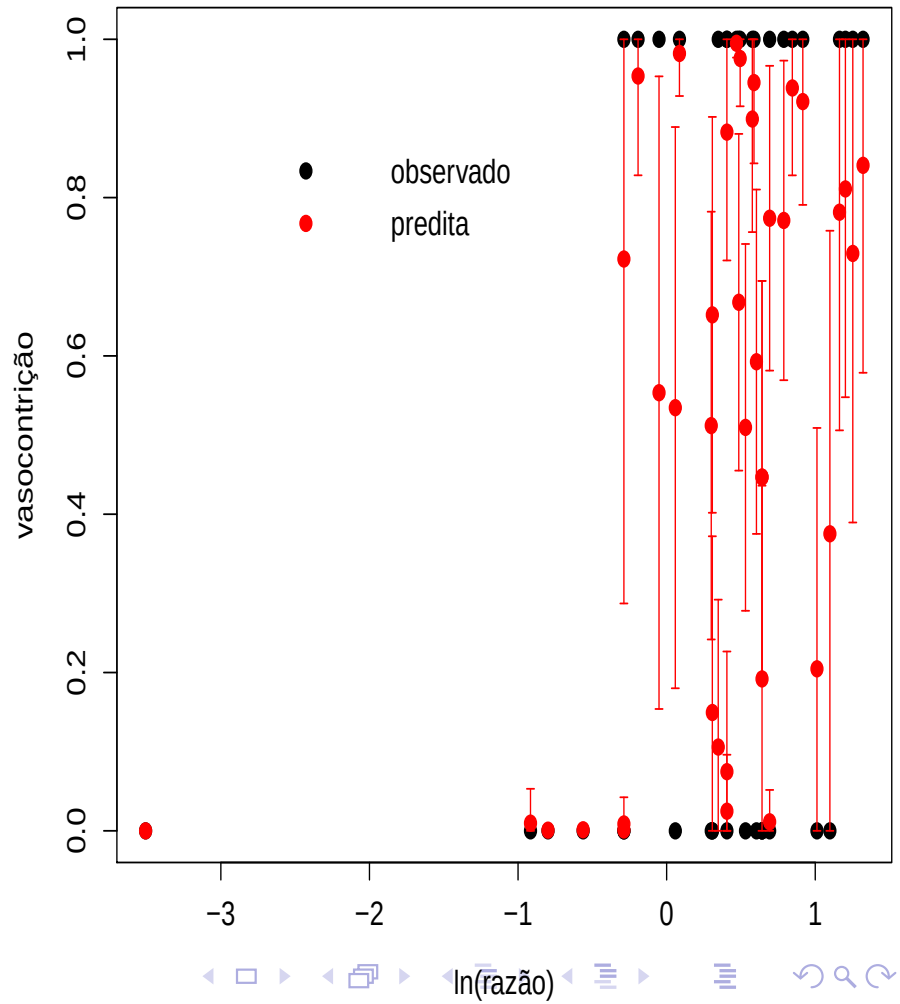


Probabilidades e valores preditos

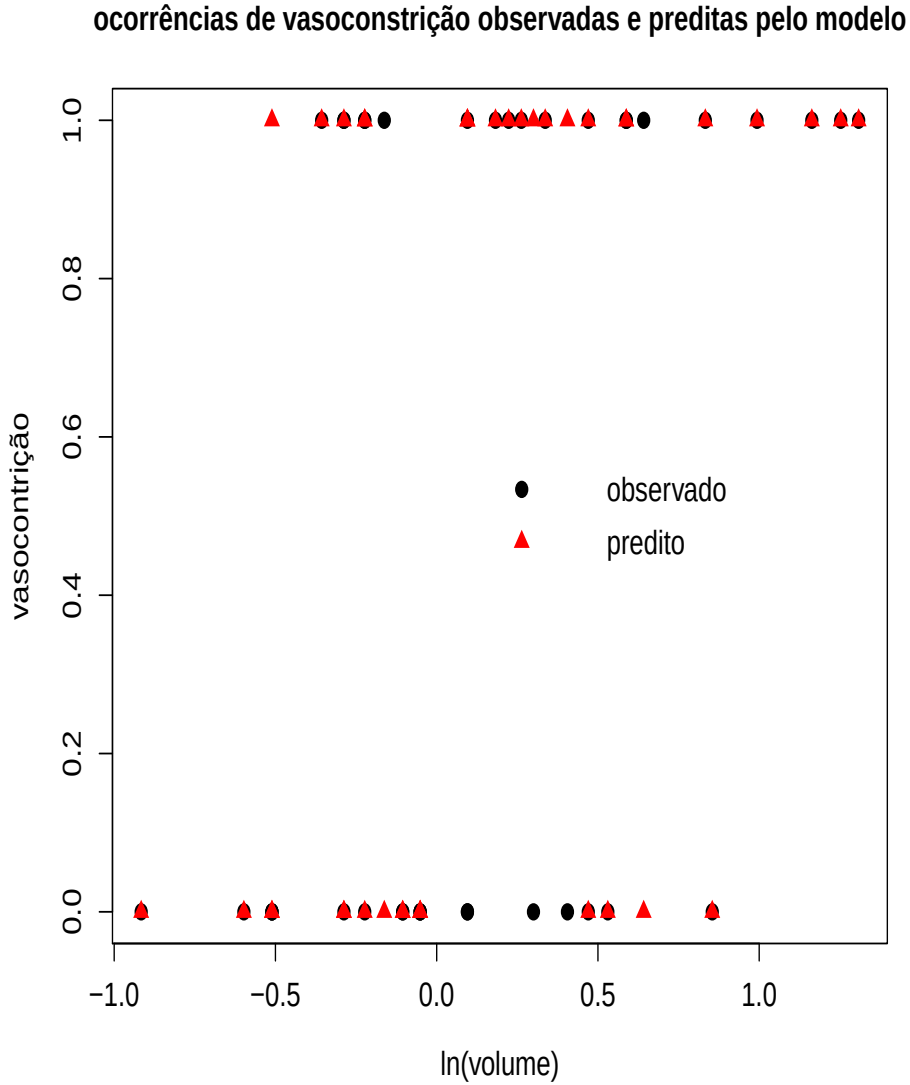
- Probabilidades de ocorrência de vasoconstrição preditas:
$$\widetilde{\mu}_i = \frac{e^{\widetilde{\beta}_0+\widetilde{\beta}_1 x_{1i}+\widetilde{\beta}_2 x_{2i}}}{1+e^{\widetilde{\beta}_0+\widetilde{\beta}_1 x_{1i}+\widetilde{\beta}_2 x_{2i}}}$$
- Ocorrências de vasoconstrição preditas: simula-se $u, U \sim U(0,1)$, se $\widetilde{\mu}_i \geq u$, então $\widetilde{Y}_i = 1$, caso contrário, $\widetilde{Y}_i = 0$.
- Podemos comparar tanto as probabilidades quanto os valores preditos com os valores observados. Atenção: no caso dos valores preditos note que, como estamos gerando somente uma réplica, tal análise deve ser considerada com cautela.

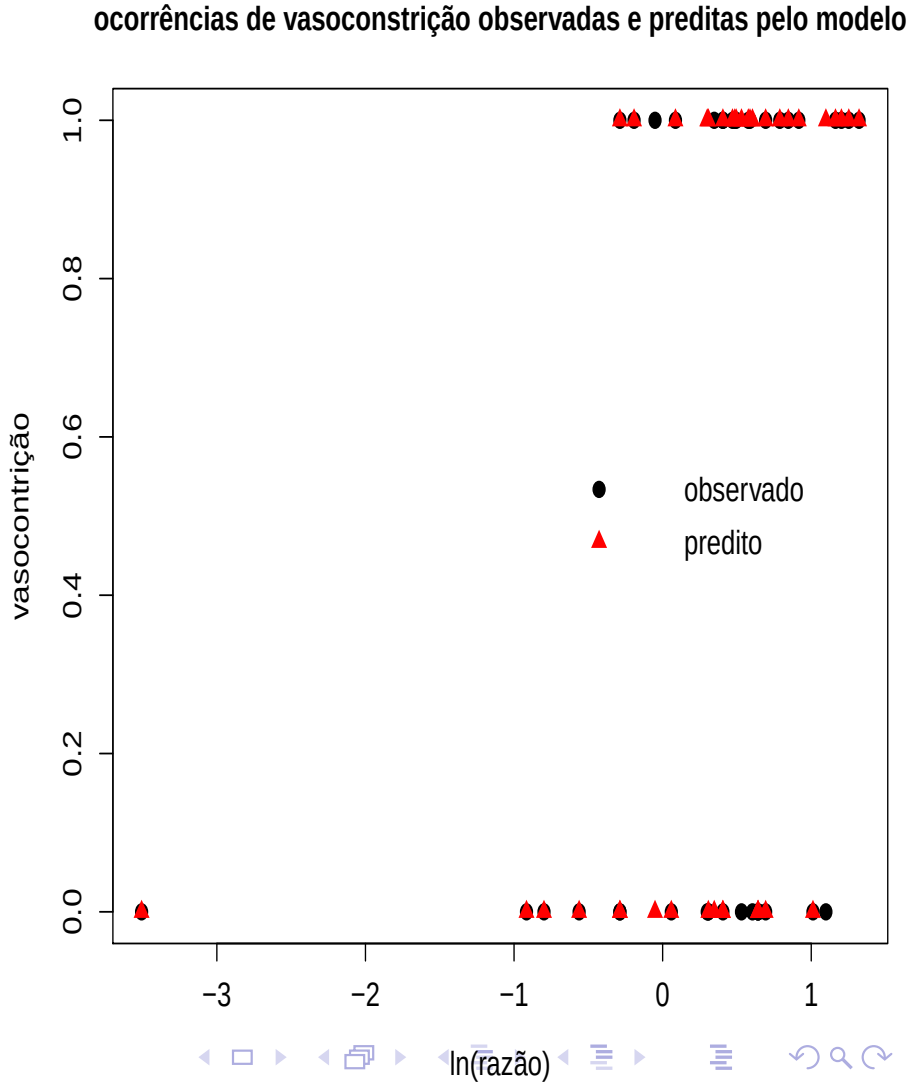
Probabilidades preditas e valores observados pelo modelo





Valores observados e preditos pelo modelo





Perguntas

- Como gerar intervalos de confiança para $\frac{e^{\beta_0}}{1+e^{\beta_0}}$, e^{β_1} e e^{β_2}?
  - Método delta.
  - Fazer um IC para o parâmetro original e depois calcular o IC para a transformação.
  - Simulação/Reamostragem.

Intervalos de confiança para funções de interesse

- Sejam $g_1(\boldsymbol{\beta}) \equiv \tau_1 = \dfrac{e^{\beta_0}}{1+e^{\beta_0}}$, $g_2(\boldsymbol{\beta}) \equiv \tau_2 = e^{\beta_1}$ e $g_3(\boldsymbol{\beta}) \equiv \tau_3 = e^{\beta_2}$.
- Seja $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ o estimador de MV de $\boldsymbol{\beta}$. Já vimos que, para n suficientemente grande, $\widehat{\boldsymbol{\beta}} \approx N(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\beta}})$, em que $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{I}^{-1}(\boldsymbol{\beta})$.
- O método delta nos diz que, para n suficientemente grande, $\widehat{\tau}_i \approx N(\tau_i, \boldsymbol{\Psi}_i \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\beta}} \boldsymbol{\Psi}_i')$, em que

$$\boldsymbol{\Psi}_i = \left[\begin{array}{ccc} \dfrac{\partial}{\partial \beta_0} g_i(\boldsymbol{\beta}) & \dfrac{\partial}{\partial \beta_1} g_i(\boldsymbol{\beta}) & \dfrac{\partial}{\partial \beta_2} g_i(\boldsymbol{\beta}) \end{array} \right]$$

Intervalos de confiança para funções de interesse

- Nesse caso,

  $\boldsymbol{\Psi}_1 = \begin{bmatrix} \frac{e^{\beta_0}}{(1+e^{\beta_0})^2} & 0 & 0 \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{\Psi}_2 = \begin{bmatrix} 0 & e^{\beta_1} & 0 \end{bmatrix}$,

  $\boldsymbol{\Psi}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e^{\beta_2} \end{bmatrix}$

- Assim $IC(\tau_i, \gamma) = \left[\widehat{\tau}_i - z_{(1+\gamma)/2}\sqrt{\widehat{\psi}_i}; \widehat{\tau}_i + z_{(1+\gamma)/2}\sqrt{\widehat{\psi}_i}\right]$, em que $P(Z \geq z_{(1+\gamma)/2}) = \frac{1+\gamma}{2}$ e $\widehat{\psi}_i = \widehat{\boldsymbol{\Psi}}_i \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_\beta \widehat{\boldsymbol{\Psi}}_i'$, $Z \sim N(0,1)$ (lembrando que este é um IC assintótico).

Intervalos de confiança para funções de interesse

Parâm.	Est.	IC (transf.)	IC (mét. delta)	IC (simul.)
τ_1	0.05	[< 0,01 ; 0,43]	[-0,08 ; 0,18]	[<0,01 ; 0,22]
τ_2	177,56	[4,59 ; 6862,99]	[-471,35 ; 826,48]	[19,85 ; 58917656,63]
τ_3	95,74	[2,61 ; 3511,02]	[-249,12 ; 440,61]	[12,29 ; 7914178,99]

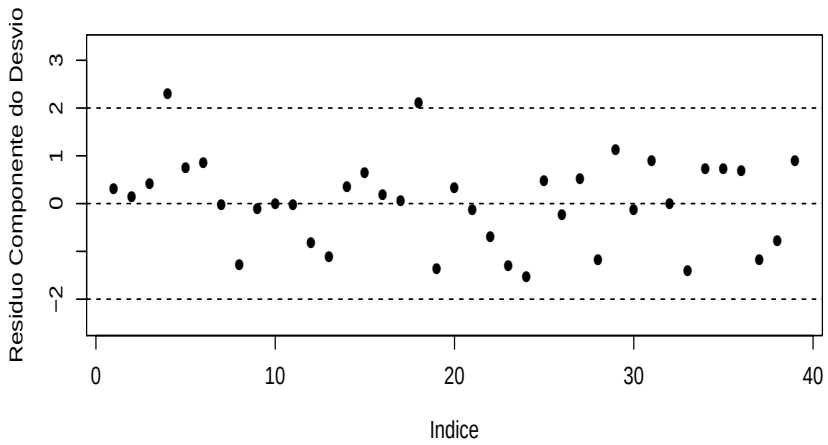
Neste caso, os IC's obtidos através do método delta, devem ser truncados à esquerda do zero.

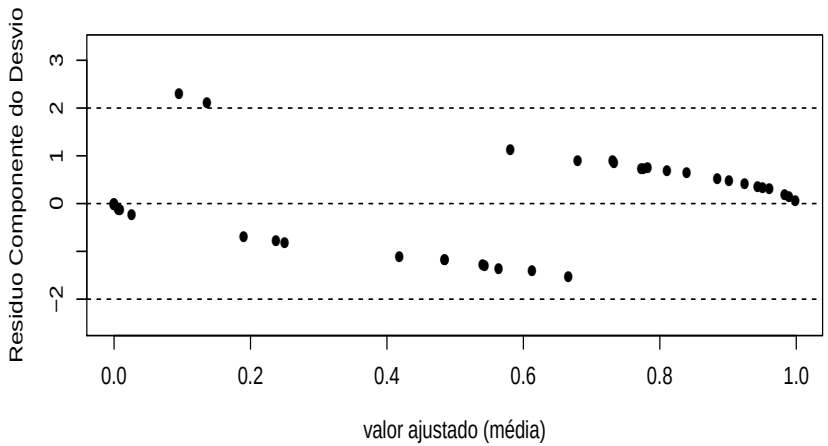
Comparação com outros modelos (funções de ligação)

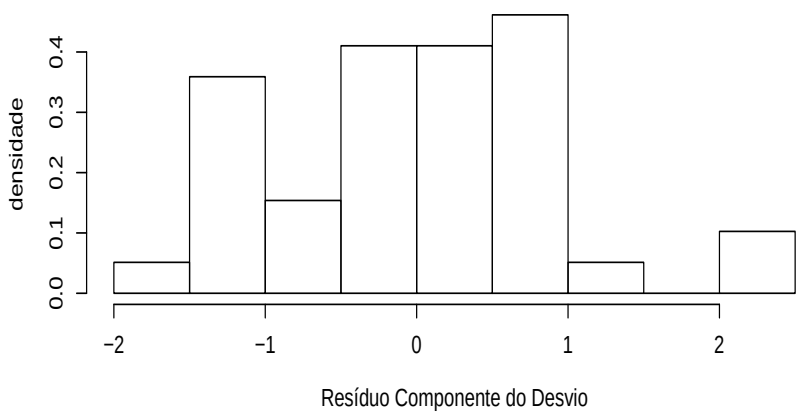
Função de ligação	AIC	BIC	DABM
logito	35,23	40,22	0,24
probito	35,29	40,28	0,25
cauchito	31,08	36,07	0,16
cloglog	32,62	37,61	0,21

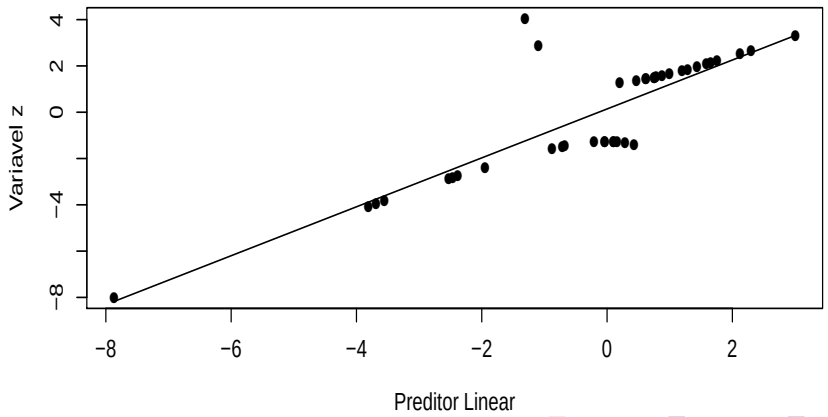
$DABM = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - \widetilde{\mu}_i|$. Lembrando que: $\mu_i = \Phi(\eta_i)$ (probito), $\mu_i = \frac{1}{\pi}\arctan(\eta_i) + \frac{1}{2}$ (cauchito) e $\mu_i = 1 - e^{e^{-\eta_i}}$ (cloglog) e $\Phi(.)$ é a fda da norma padrão.

Gráficos de diagnóstico: ligação probito

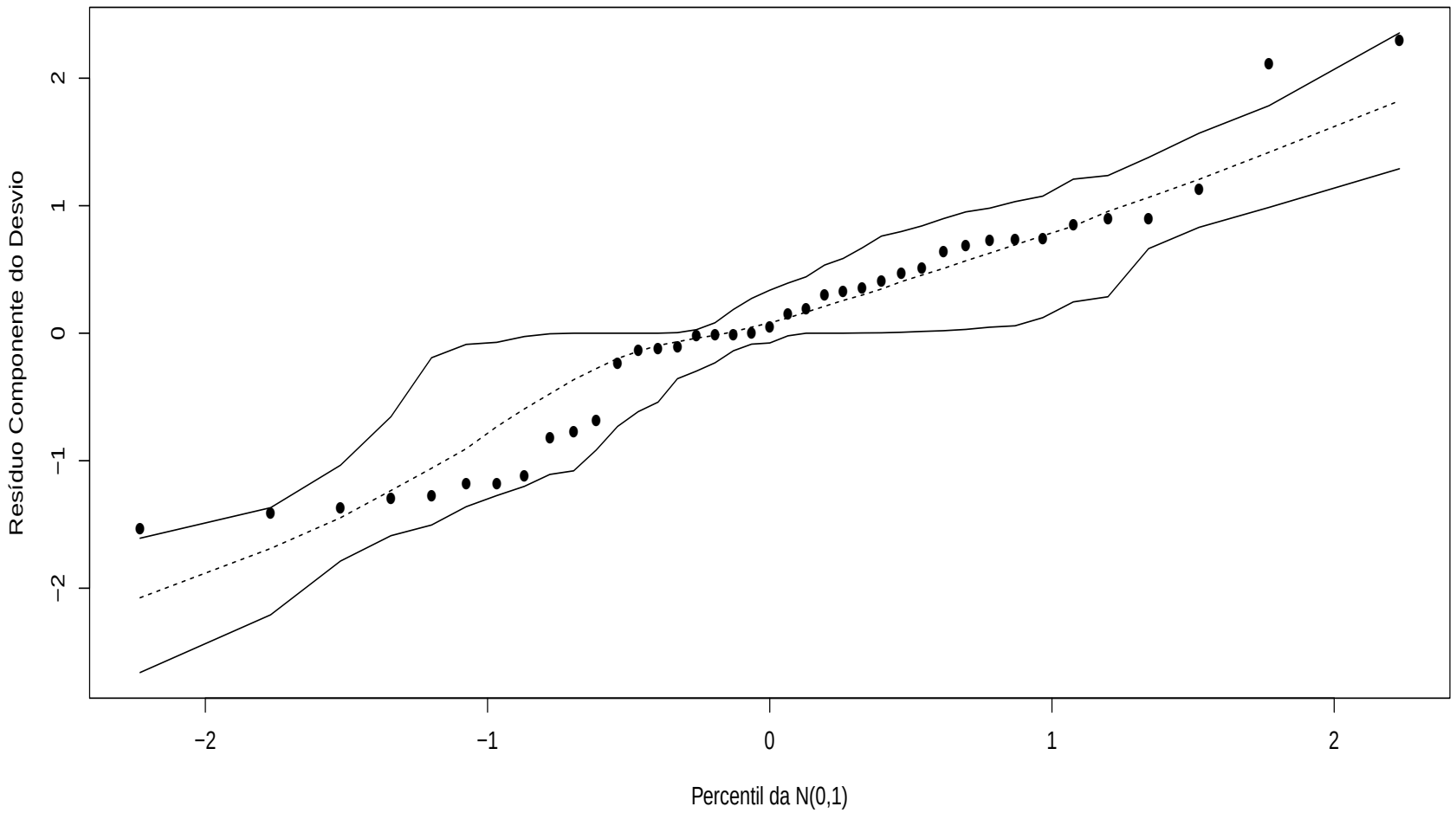




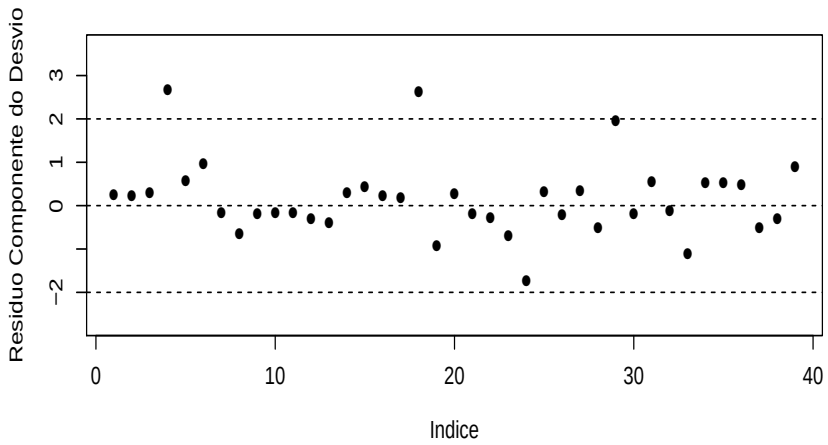


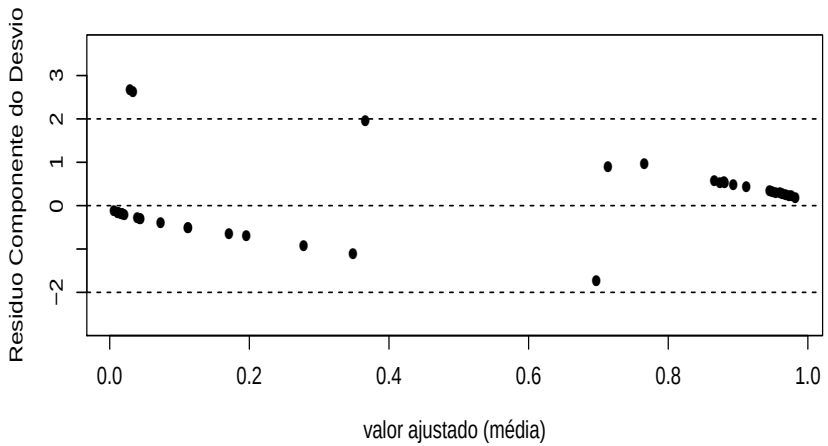


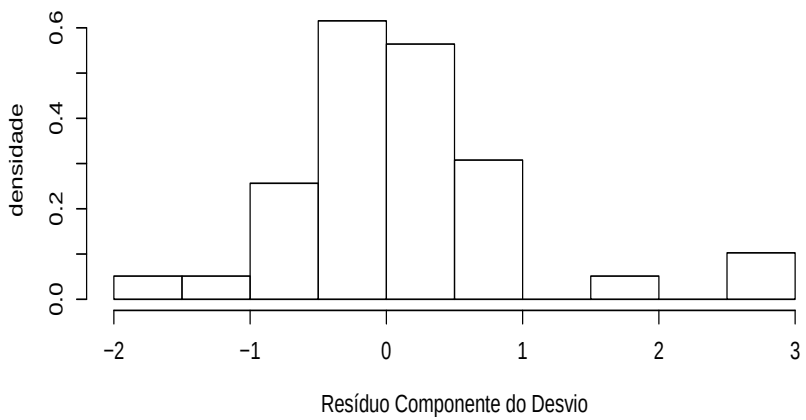
Envelope para os resíduos: ligação probito

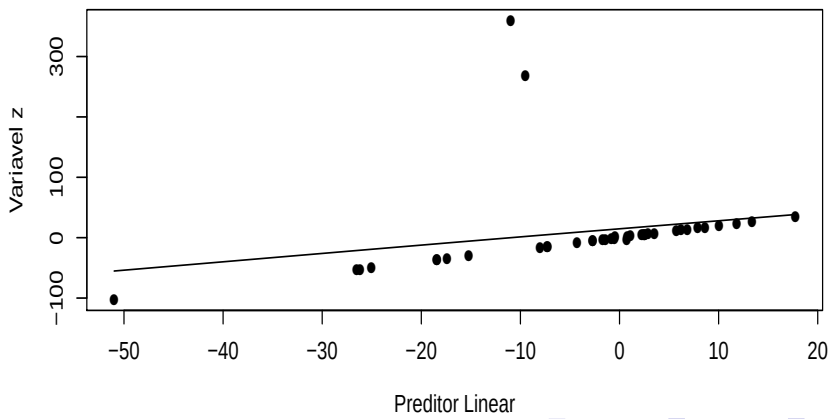


Gráficos de diagnóstico: ligação cauchito

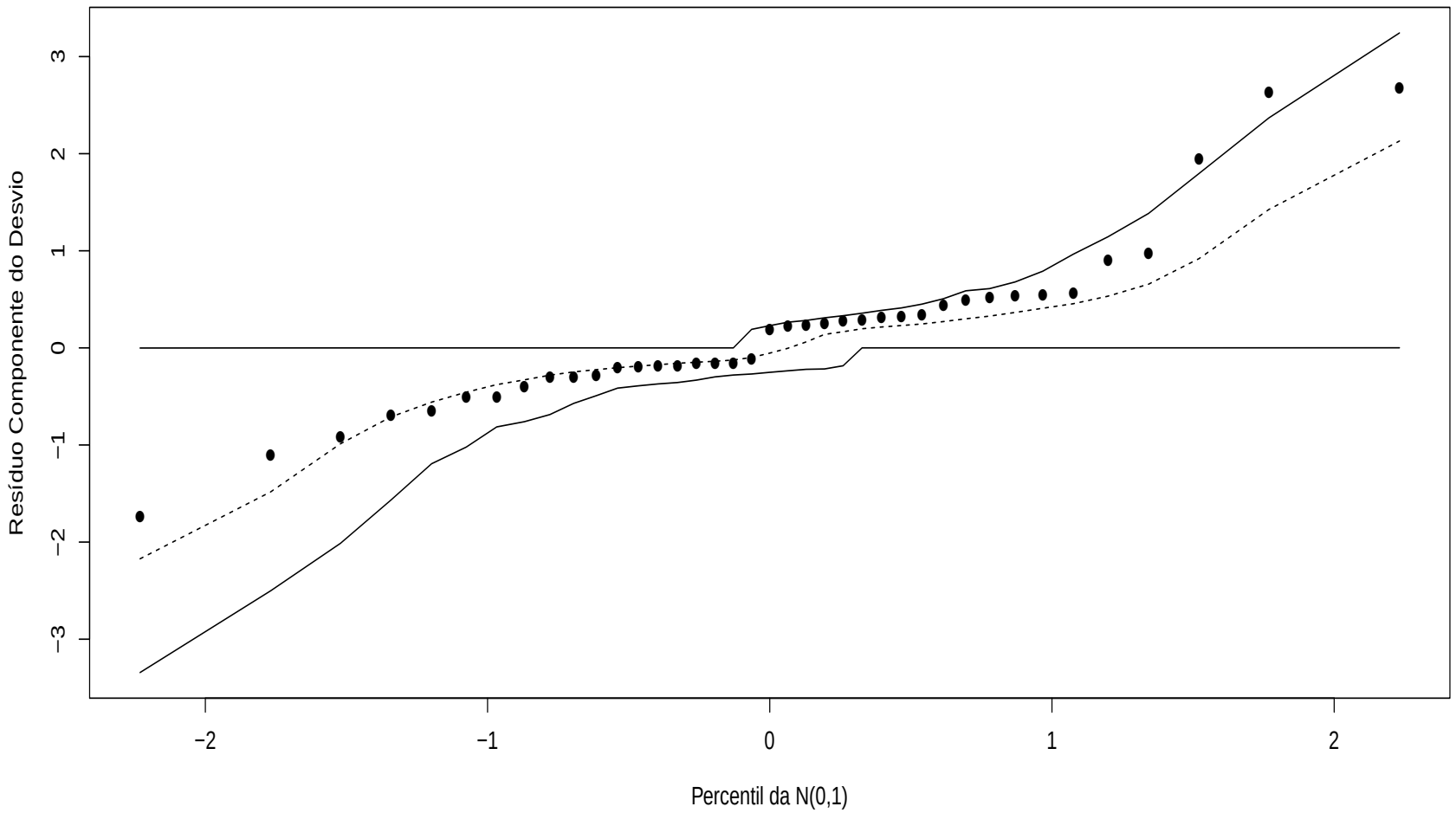




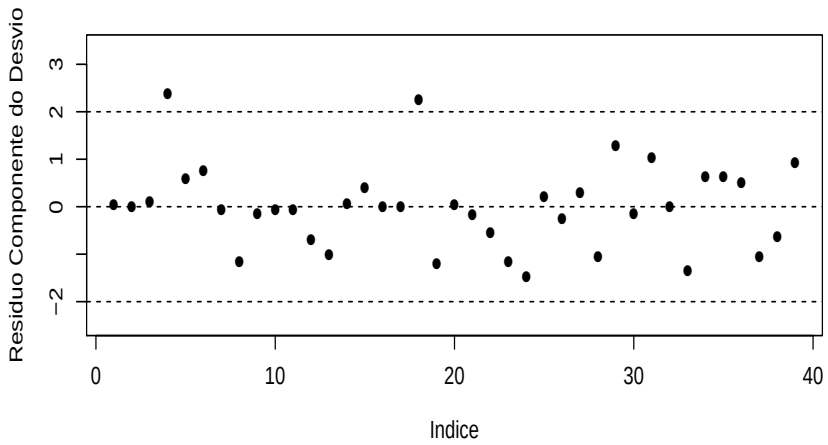


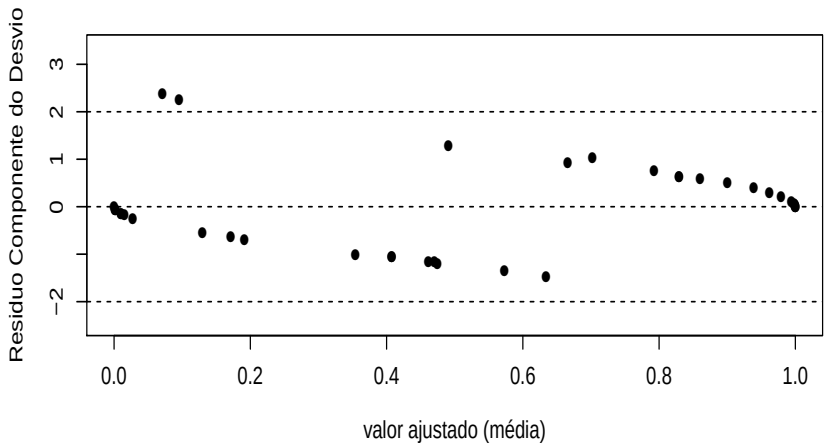


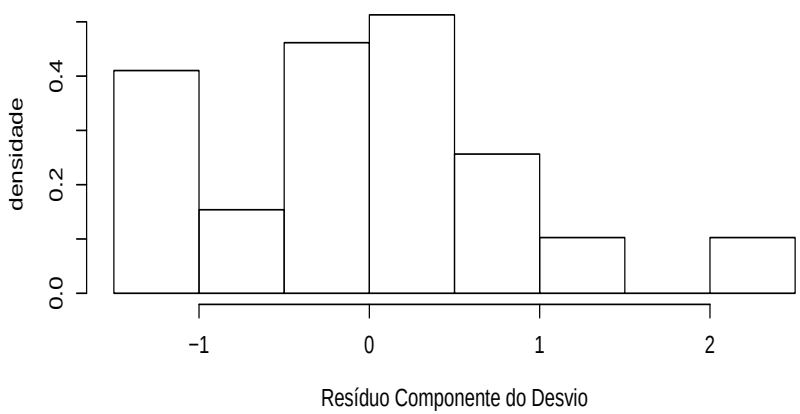
Envelope para os resíduos: ligação cauchito

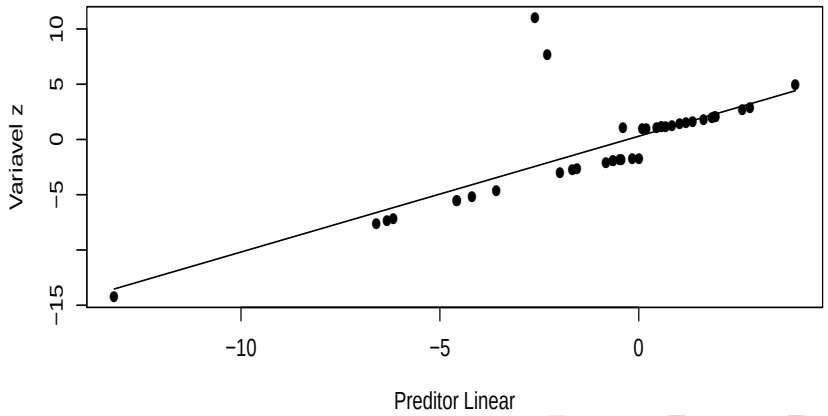


Gráficos de diagnóstico: ligação complemento log-log

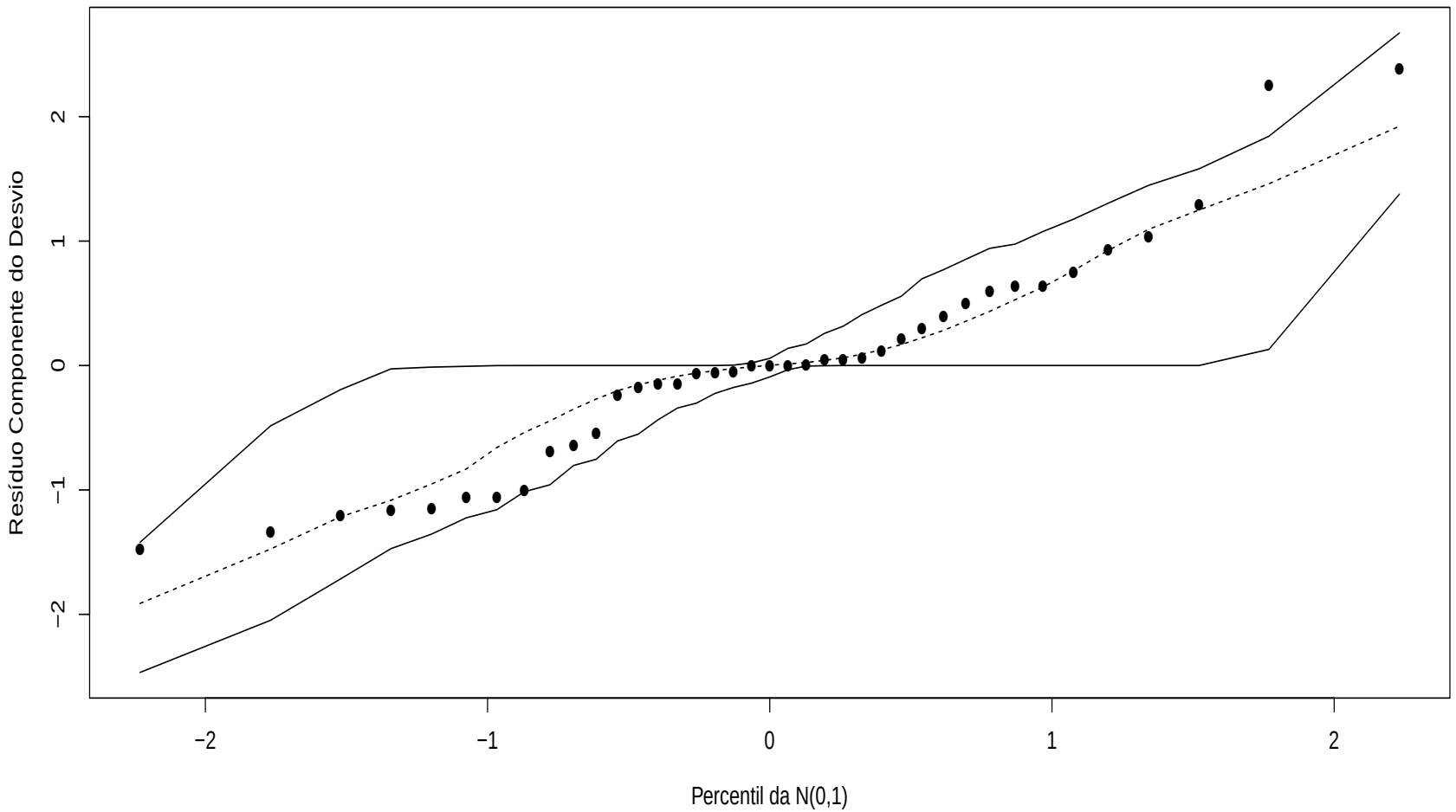




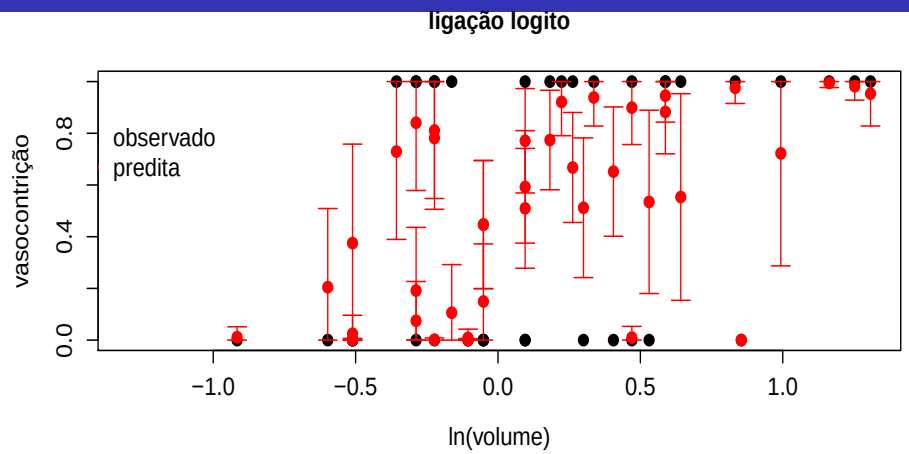


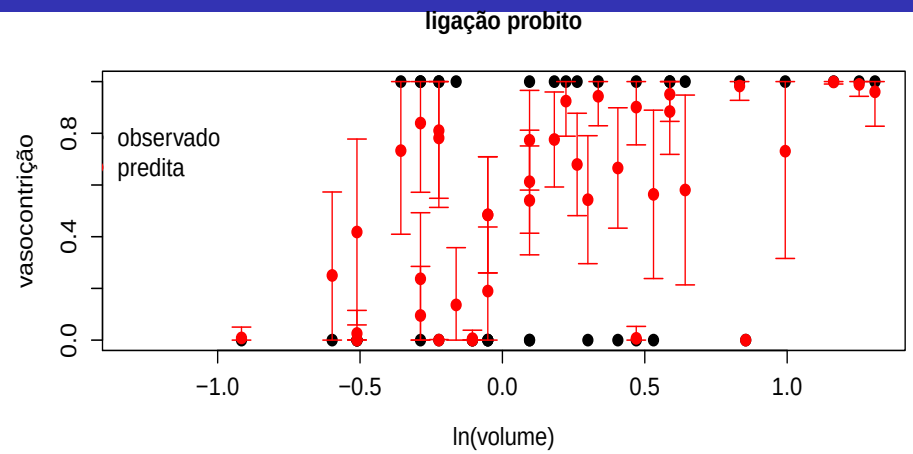


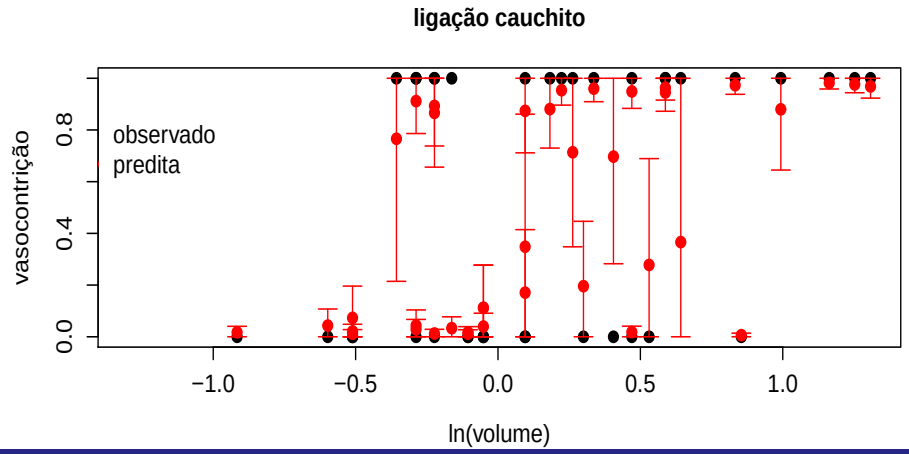
Envelope para os resíduos: ligação complemento log-log

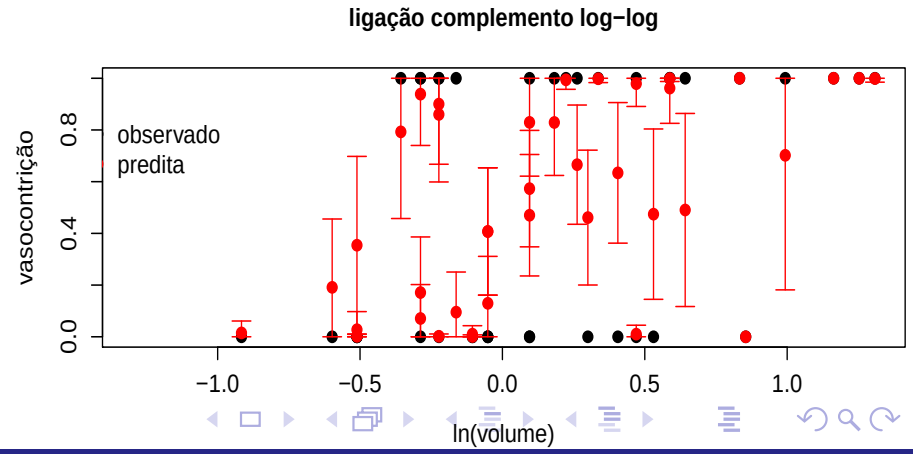


Probabilidades preditas e valores observados pelo modelo em função do log do volume

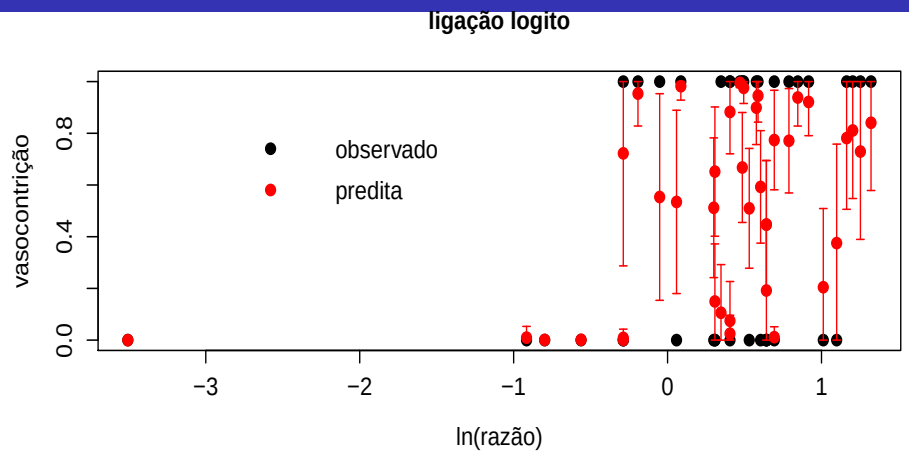


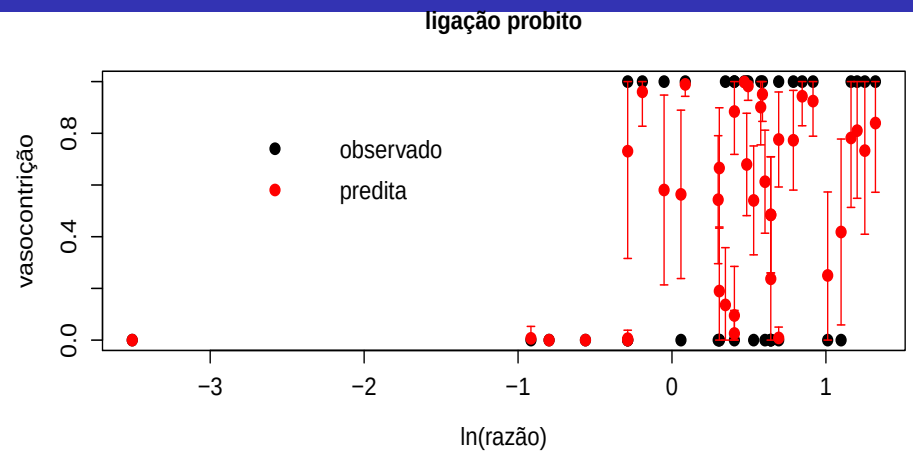


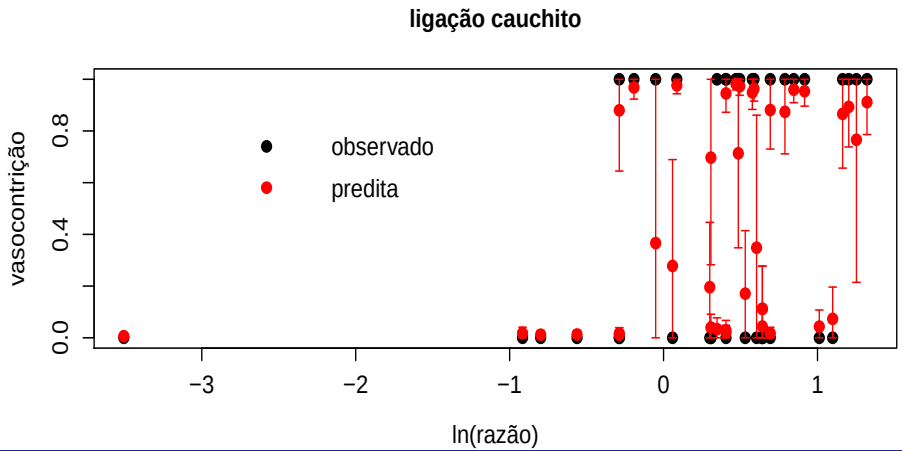


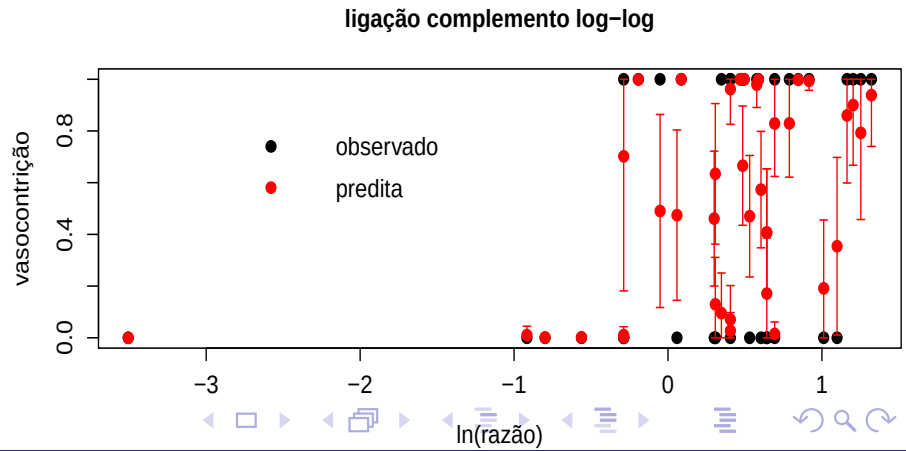


Probabilidades preditas e valores observados pelo modelo em função do log da razão









Modelo	Parâm.	Est.	EP	IC(95%)	Estat. Z_t	p-valor
logito	β_0	-2,88	1,32	[-5,46 ; -0,29]	-2,18	0,0295
	β_2	5,18	1,86	[1,52 ; 8,83]	2,78	0,0055
	β_3	4,56	1,84	[0,96 ; 8,16]	2,48	0,0131
probito	β_0	-1,50	0,68	[-2,85 ; -0,16]	-2,20	0,0279
	β_1	2,86	0,94	[1,02 ; 4,70]	3,05	0,0023
	β_2	2,51	0,95	[0,65 ; 4,38]	2,64	0,0083
cauchito	β_0	-11,89	7,79	[-27,16 ; 3,39]	-1,53	0,1272
	β_1	19,09	12,87	[-6,14 ; 44,31]	1,48	0,1380
	β_2	15,80	10,12	[-4,03 ; 35,64]	1,56	0,1183
c. log-log	β_0	-2,97	1,09	[-5,12 ; -0,83]	-2,72	0,0065
	β_1	4,34	1,56	[1,28 ; 7,39]	2,78	0,0054
	β_2	3,97	1,38	[1,26 ; 6,68]	2,87	0,0041

Conclusões

- O modelo melhor ajustado é o que considera a função de ligação cauchito. Entretanto, muito provavelmente devido ao fato de que este modelo impõe probabilidades maiores para valores mais extremos, os erros-padrão associados às estimativas indicam uma não signicância dos parâmetros, adicionalmente ao tamanho reduzido da amostra.
- Além disso, os ajustes foram muito similares.

Conclusões

- Em princípio podemos conduzir as inferências com base no modelo logito. Se optarmos por utilizarmos o modelo cauchito, as quantidades de interesse (incluindo as razões de chances) devem ser calculadas usando a fda da distribuição Cauchy.
- Fórmula geral para a razão de chances: $\dfrac{F(\eta_{i+1})/(1-F(\eta_{i+1}))}{F(\eta_i)/(1-F(\eta_i))}$.
- Outras possibilidades: utilizar funções de ligação baseadas nas distribuições normal assimétrica e t de Student assimétrica.