ME613 - Análise de Regressão

Parte 12

Samara F. Kiihl - IMECC - UNICAMP

Gráficos de Regressão Parcial

Introdução

Vimos anteriormente:

- Gráfico dos resíduos versus variável preditora: podemos usar para checar presença de curvatura.
- Gráfico dos resíduos versus variável preditora não inclusa no modelo: decidir se deve ser incluída.

Problema: estes gráficos não mostram o efeito marginal de uma variável, dado que as demais já estão no modelo.

Gráfico de regressão parcial

ou fornecem informação sobre a importância marginal de X_k, considerando as demais variáveis já incluídas no modelo.

Para o efeito marginal de X_k, consideramos os resíduos da regressão de Y nas demais variáveis e os resíduos da regressão de X_k nas demais variáveis.

O gráfico destes dois resíduos mostra a importância marginal de X_k na redução da variabilidade do resíduo. E também pode fornecer informação sobre a natureza da relação marginal de X_k com Y.

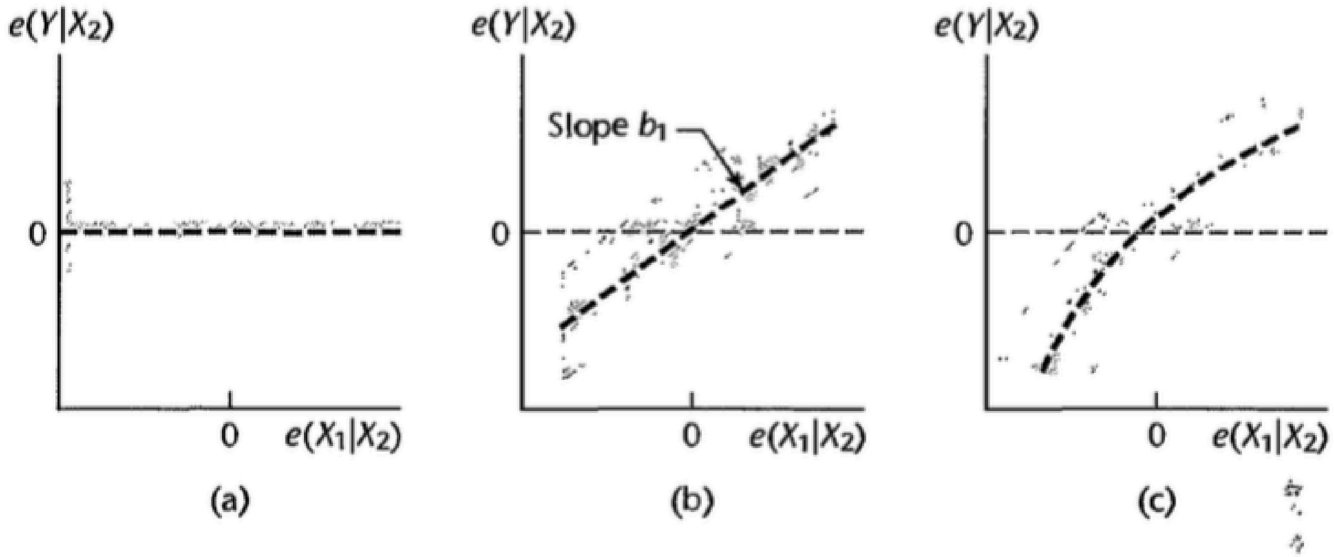
Exemplo

Considere uma regressão múltipla de primeira ordem com duas variáveis preditoras: X_1 e X_2.

Queremos estudar o efeito de X_1, dado que X_2 já está no modelo.

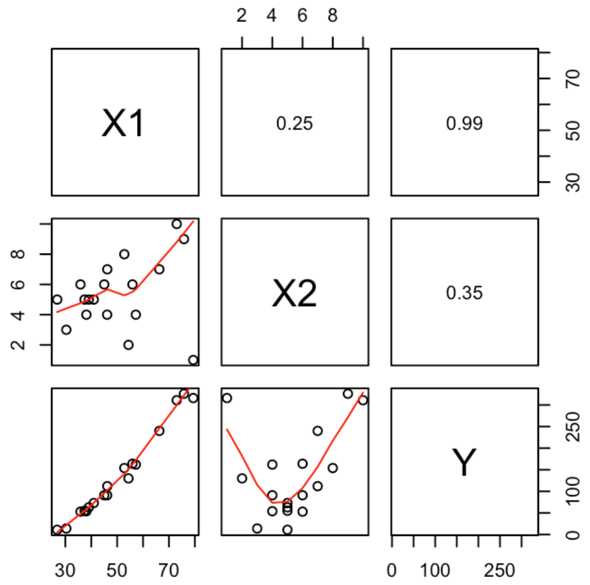
- Fazemos a regressão Y em X_2 e obtemos os resíduos: $e(Y \mid X_2)$.
- Fazemos a regressão de X_1 em X_2 e obtemos os resíduos: $e(X_1 \mid X_2)$.
- Fazemos o gráfico de $e(Y \mid X_2)$ versus $e(X_1 \mid X_2)$.

Exemplo



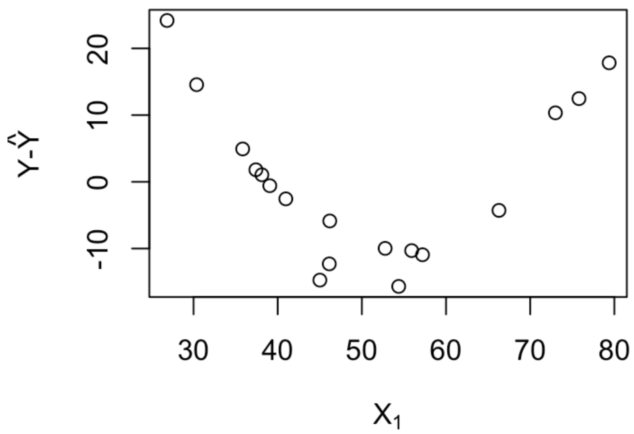
Exemplo: Salário de gerentes

Para cada gerente: média salarial anual nos últimos 2 anos (X_1), medida de aversão a risco (X_2) e valor do seguro de vida (Y).



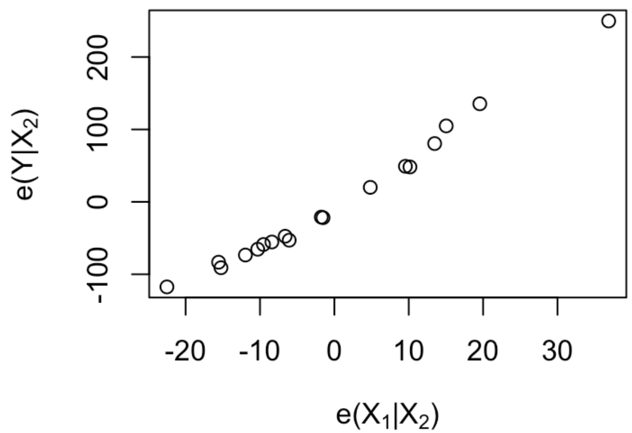
Exemplo: Salário de gerentes

	Estimativa	Erro-Padrão	t	valor de p
(Intercept)	-205.718659	11.3926829	-18.057086	0.0000000
X1	6.288029	0.2041495	30.801102	0.0000000
X2	4.737602	1.3780794	3.437829	0.0036622

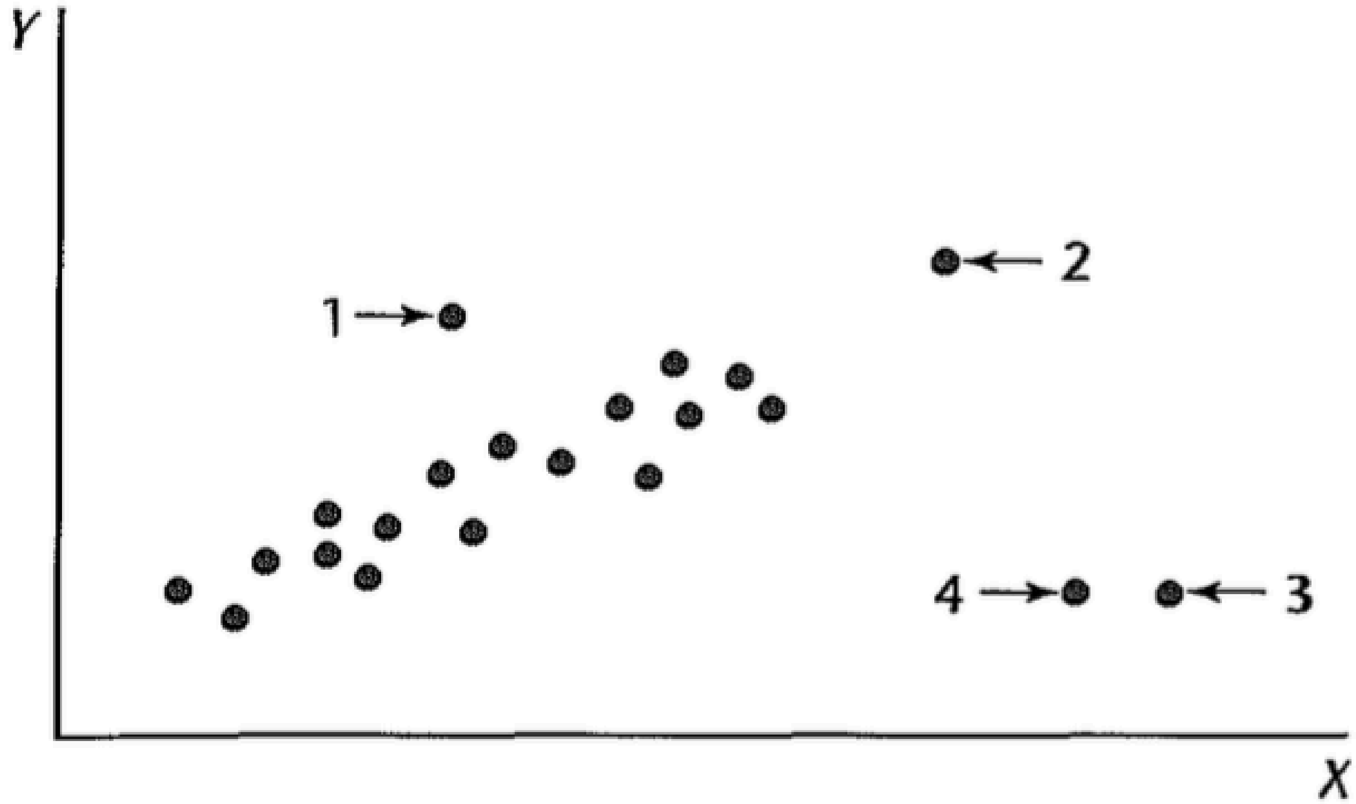


Exemplo: Salário de gerentes

```
modelo1 <- lm(Y ~ X2, data=dados)
y_x2 <- resid(modelo1)
modelo2 <- lm(X1 ~ X2, data=dados)
x1_x2 <- resid(modelo2)
```



Introdução



em Y

Resíduo Semi-studentizado

$$e_i^* = \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{\sqrt{QME}}$$

Para n grande, quando $|e_i^*| > 4$ considera-se a i-ésima observação como .

Exemplo - Gordura corporal

```
dat = read.table('./dados/fat.txt')
colnames(dat) <- c("X1","X2","X3","Y")
X1 = dat[,1]
X2 = dat[,2]
X3 = dat[,3]
Y = dat[,4]
modelo1 <- lm(Y ~ X1 + X2,data=dat)
rstandard(modelo1)
```

```
##             1             2             3             4             5 
## -0.7402261049  1.4765806027 -1.5757913418 -1.3171518783 -0.0001308889 
##             6             7             8             9            10 
## -0.1519867578  0.3064529233  1.6606069555  1.1095479783 -1.0316491806 
##            11            12            13            14            15 
##  0.1407848595  0.9272163634 -1.7121512617  1.4686083237  0.2747599004 
##            16            17            18            19            20 
##  0.2655244112 -0.3538020409 -0.3435016352 -1.1631291289  0.4197625143 
```

Matriz "chapéu"

$$\mathbf{H}_{n\times n} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$$

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{H}\mathbf{Y}$$

$$\mathbf{e} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{Y}$$

$$Var(\mathbf{e}) = \sigma^2(\mathbf{I} - \mathbf{H})$$

$$Var(e_i) = \sigma^2(1 - h_{ii})$$

$$h_{ii} = \mathbf{X}_i^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}_i$$

$$\mathbf{X_i}_{p\times 1} = \begin{pmatrix} 1 \\ X_{i,1} \\ \vdots \\ X_{i,p-1} \end{pmatrix}$$

$$Cov(e_i, e_j) = -h_{ij}\sigma^2 \qquad i \neq j$$

Resíduo Studentizado

$$\widehat{Var(e_i)} = QME(1 - h_{ii})$$

$$\widehat{Cov(e_i, e_j)} = -h_{ij} QME \qquad i \neq j$$

Resíduo studentizado:

$$r_i = \frac{e_i}{\sqrt{QME(1 - h_{ii})}}$$

Resíduo Studentizado com observação excluída

Se uma observação é muito discrepante, ela pode influenciar no ajuste.

Procedimento:

- excluir a i-ésima observação
- ajustar o modelo com as $n-1$ observações restantes
- obter $\hat{Y}_{i(i)}$: o valor predito para a i-ésima observação quando esta foi excluída no ajuste do modelo.

$$d_i = Y_i - \hat{Y}_{i(i)} = \frac{e_i}{1 - h_{ii}}$$

Obs: quanto maior h_{ii}, maior será d_i, em comparação com e_i.

Resíduo Studentizado com observação excluída

$$\widehat{Var(d_i)} = QME_{(i)}(1 + \mathbf{X}_i^T(\mathbf{X}_{(i)}^T\mathbf{X}_{(i)})^{-1}\mathbf{X}_i) = \frac{QME_{(i)}}{1 - h_{ii}}$$

Resíduo Studentizado com observação excluída

$$t_i = \frac{d_i}{\sqrt{\widehat{Var(d_i)}}} \sim t_{n-p-1}$$

podemos calcular t_i sem de fato fazer ajustes separados para cada observação excluída:

$$t_i = e_i\left[\frac{n-p-1}{SQE(1-h_{ii}) - e_i^2}\right]^{1/2}$$

Resíduo Studentizado com observação excluída

A observação i é um se $|t_i| > t_{n-p-1}(1 - \alpha/2n)$, utilizando Bonferroni.

Exemplo - Gordura corporal

```
e <- resid(modelo1)
h <- hatvalues(modelo1)
t <- rstudent(modelo1)
round(data.frame("e"=e,"h"=h,"t"=t),3)
```

```
##         e     h      t
## 1  -1.683 0.201 -0.730
## 2   3.643 0.059  1.534
## 3  -3.176 0.372 -1.654
## 4  -3.158 0.111 -1.348
## 5   0.000 0.248  0.000
## 6  -0.361 0.129 -0.148
## 7   0.716 0.156  0.298
## 8   4.015 0.096  1.760
## 9   2.655 0.115  1.118
## 10 -2.475 0.110 -1.034
## 11  0.336 0.120  0.137
## 12  2.226 0.109  0.923
## 13 -3.947 0.178 -1.826
## 14  3.447 0.148  1.525
## 15  0.571 0.333  0.267
## 16  0.642 0.095  0.258
## 17 -0.851 0.106 -0.345
## 18 -0.783 0.197 -0.334
## 19 -2.857 0.067 -1.176
## 20  1.040 0.050  0.409
```

Exemplo - Gordura corporal

```
alpha=0.10
n = dim(dat)[1]
p = length(coefficients(modelo1))
t_c <- qt(1-alpha/(2*n),df=n-p-1)
```

Se $|t_i| > 3.25$, então i é observação .

em X

Matriz "chapéu"

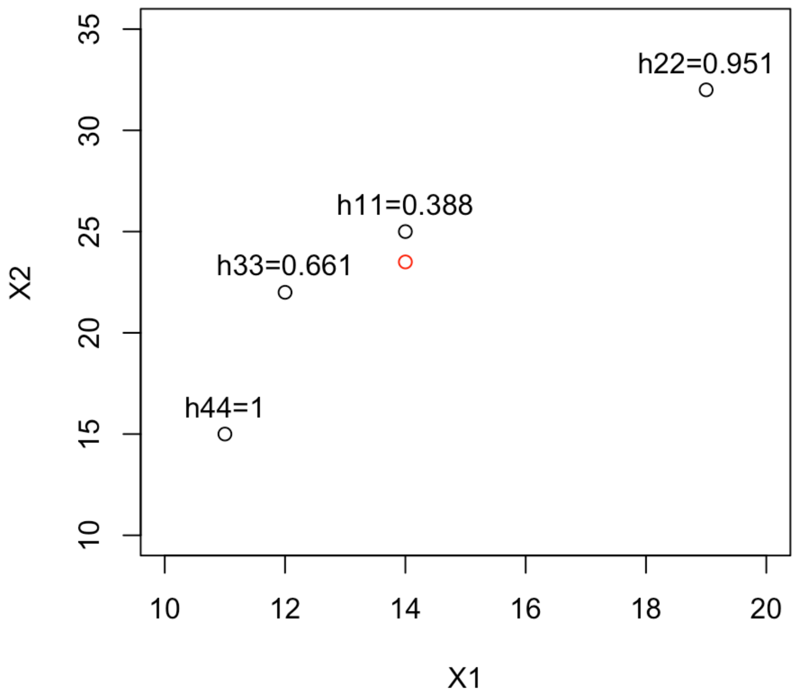
- $0 \leq h_{ii} \leq 1$
- $\sum_{i=1}^{n} h_{ii} = p$, lembrando que p é o número de parâmetros no modelo, incluindo o intercepto.
- Alavanca ( ): h_{ii} mede a distância entre os valores de X da i-ésima observação e os valores médios de X para as n observações.

Exemplo

```r
X1 <- c(14,19,12,11)
X2 <- c(25,32,22,15)
Y <- c(301,327,246,187)
Xmatriz <- matrix(cbind(rep(1,length(X1)),X1,X2),ncol=3)
H <- Xmatriz %*% solve(t(Xmatriz)%*%Xmatriz) %*% t(Xmatriz)
hii <- diag(H)
cbind(X1,X2,hii)
```

```
##      X1 X2       hii
## [1,] 14 25 0.3876812
## [2,] 19 32 0.9512882
## [3,] 12 22 0.6614332
## [4,] 11 15 0.9995974
```

Exemplo


h22=0.951
h11=0.388
h33=0.661
h44=1
X2
X1
10
12
14
16
18
20
10
15
20
25
30
35

Matriz "chapéu"

$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{HY}$, portanto cada $\hat{Y}_i$ é uma combinação linear de todos os valores de Y e o peso de cada Y_i para o valor ajustado $\hat{Y}_i$ depende de h_{ii}.

Quanto maior h_{ii}, maior o peso de Y_i em $\hat{Y}_i$.

h_{ii} é uma função que depende apenas dos valores de X, portanto, mede o papel dos valores de X na determinação da importância de cada Y_i no valor ajustado $\hat{Y}_i$.

Quanto maior h_{ii}, menor a variância de e_i. Desta forma, quanto maior h_{ii}, mais próximo $\hat{Y}_i$ tenderá a estar de Y_i.

Ponto de alavanca

Um valor alavanca h_{ii} é considerado alto se é duas vezes maior que o valor de alavanca médio, denotado por $\hat{h}$:

$$\bar{h} = \frac{\sum_{i=1}^{n} h_{ii}}{n} = \frac{p}{n}$$

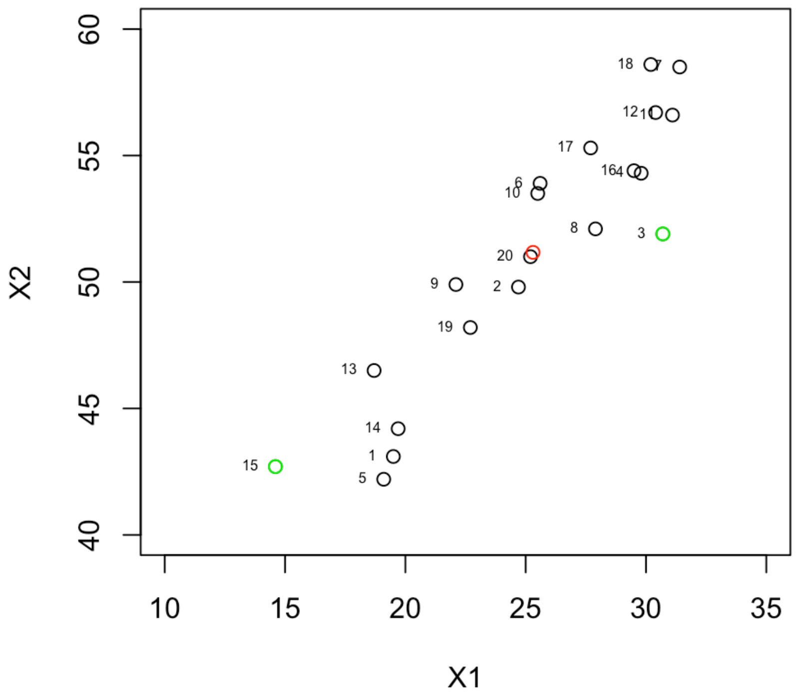
Desta maneira, observações em que $h_{ii} > 2p/n$ são consideradas com respeito aos valores de X.

Exemplo - Gordura corporal

```r
e <- resid(modelo1)
h <- hatvalues(modelo1)
t <- rstudent(modelo1)
round(data.frame("e"=e,"h"=h,"t"=t),3)
```

```
##          e     h      t
## 1  -1.683 0.201 -0.730
## 2   3.643 0.059  1.534
## 3  -3.176 0.372 -1.654
## 4  -3.158 0.111 -1.348
## 5   0.000 0.248  0.000
## 6  -0.361 0.129 -0.148
## 7   0.716 0.156  0.298
## 8   4.015 0.096  1.760
## 9   2.655 0.115  1.118
## 10 -2.475 0.110 -1.034
## 11  0.336 0.120  0.137
## 12  2.226 0.109  0.923
## 13 -3.947 0.178 -1.826
## 14  3.447 0.148  1.525
## 15  0.571 0.333  0.267
## 16  0.642 0.095  0.258
## 17 -0.851 0.106 -0.345
## 18 -0.783 0.197 -0.334
## 19 -2.857 0.067 -1.176
## 20  1.040 0.050  0.409
```

Exemplo - Gordura corporal



$2p/n = 0.3$

Observações influentes

Introdução

Após identificar casos com respeito a Y e/ou X, o próximo passo é verificar se esses casos são .

Uma observação é considerada influente se sua exclusão causa grandes mudanças na regressão ajustada.

- Influência em um único valor ajustado

A influência que a i-ésima observação tem no valor ajustado $\hat{Y}_i$ é medida por:

$$DFFITS_i = \frac{\hat{Y}_i - \hat{Y}_{i(i)}}{\sqrt{QME_{(i)} h_{ii}}}$$

O denominador é o desvio-padrão estimado de $\hat{Y}_i$.

$$Var(\hat{\mathbf{Y}}) = \mathbf{H} Var(\mathbf{Y}) \mathbf{H}^T = \mathbf{H}(\sigma^2 \mathbf{I}) \mathbf{H}^T$$

Como $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T$ (simétrica) e $\mathbf{HH} = \mathbf{H}$ (idempotente), temos que:

$$Var(\hat{\mathbf{Y}}) = \sigma^2 \mathbf{H}$$

- Influência em um único valor ajustado

$$DFFITS_i = e_i \left[\frac{n - p - 1}{SQE(1 - h_{ii} - e_i^2)} \right]^{1/2} \left(\frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}} \right)^{1/2} = t_i \left(\frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}} \right)^{1/2}$$

Se uma observação é um em X e tem alto valor de alavanca, $DFFITS$ tenderá a ter um alto valor.

Para pequenos conjuntos de dados, se $|DFFITS_i| > 1$, a observação é considerada influente.

Para grandes conjuntos de dados, se $|DFFITS_i| > 2\sqrt{p/n}$, a observação é considerada influente.

Exemplo - Gordura corporal

```
format(dffits(modelo1),scientific = FALSE)
```

```
##                1                2                3                4 
## "-0.36614723450" " 0.38381029454" "-1.27306744543" "-0.47634829704" 
##                5                6                7                8 
## "-0.00007292347" "-0.05668650028" " 0.12793708219" " 0.57452120091" 
##                9               10               11               12 
## " 0.40216488535" "-0.36387250695" " 0.05054582680" " 0.32333658364" 
##               13               14               15               16 
## "-0.85078122680" " 0.63551411143" " 0.18885207780" " 0.08376828665" 
##               17               18               19               20 
## "-0.11837349597" "-0.16552651714" "-0.31507065348" " 0.09399705521"
```

- Influência em todos os valores ajustados

Medida para avaliar a influência de uma observação i no ajuste das n observações:

$$D_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} (\hat{Y}_j - \hat{Y}_{j(i)})^2}{pQME}$$

Em forma matricial:

$$D_i = \frac{(\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_{(i)})^T (\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_{(i)})}{pQME}$$

- Influência em todos os valores ajustados

$$D_i = \frac{e_i^2}{pQME}\left[\frac{h_{ii}}{(1-h_{ii})^2}\right]$$

Comparamos D_i com percentis de $F(p, n-p)$: se for maior que o percentil 50, a i -ésima observação deve ser investigada como possível ponto influente.

Exemplo - Gordura corporal

```
format(cooks.distance(modelo1),scientific = FALSE)
```

```
##                  1                  2                  3 
## "0.045950548956025" "0.045481177306003" "0.490156678050177" 
##                  4                  5                  6 
## "0.072161900262186" "0.000000001883399" "0.001136518329757" 
##                  7                  8                  9 
## "0.005764939254433" "0.097938531802951" "0.053133515087085" 
##                 10                 11                 12 
## "0.043957035227563" "0.000903798575500" "0.035154363872331" 
##                 13                 14                 15 
## "0.212150240723778" "0.124892510084211" "0.012575299122032" 
##                 16                 17                 18 
## "0.002474925197901" "0.004926142442252" "0.009636470211422" 
##                 19                 20 
## "0.032360064480030" "0.003096787039886"
```

Exemplo - Gordura corporal

```
caso3 <- cooks.distance(modelo1)[3]
p=length(coefficients(modelo1))
n=dim(dat)[1]
perc=pf(caso3,df1=p,df2=n-p)
```

Caso 3 tem o maior valor: $D_3 = 0.49$. Este valor corresponde ao percentil 30.6 da distribuição $F(p, n-p)$.

$DFBETAS$ - influência nos coeficientes da regressão

Medida de influência da i-ésima observação no coeficiente $\hat{\beta}_k$:

$$DFBETAS_{k(i)} = \frac{\hat{\beta}_k - \hat{\beta}_{k(i)}}{\sqrt{QME_{(i)} c_{kk}}}$$

em que c_{kk} é o k-ésimo elemento da diagonal de $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$.

Para pequenos conjuntos de dados, se $|DFBETAS_{k(i)}| > 1$, a observação é considerada influente.

Para grandes conjuntos de dados, se $|DFBETAS_{k(i)}| > 2/\sqrt{n}$, a observação é considerada influente.

Exemplo - Gordura corporal

```
format(dfbetas(modelo1),scientific = FALSE)
```

```
##    (Intercept)      X1              X2
## 1  "-0.30518208063" "-0.13148559192" " 0.23203185250"
## 2  " 0.17257315757" " 0.11502507830" "-0.14261289523"
## 3  "-0.84710125907" "-1.18252488189" " 1.06690317579"
## 4  "-0.10161195986" "-0.29351950126" " 0.19607192232"
## 5  "-0.00006372122" "-0.00003052747" " 0.00005023715"
## 6  " 0.03967715415" " 0.04008114113" "-0.04426759013"
## 7  "-0.07752748175" "-0.01561293306" " 0.05431633626"
## 8  " 0.26143123587" " 0.39112622713" "-0.33245331815"
## 9  "-0.15135207505" "-0.29465556652" " 0.24690908623"
## 10 " 0.23774917449" " 0.24460100708" "-0.26880860125"
## 11 "-0.00902088534" " 0.01705640110" "-0.00248451805"
## 12 "-0.13049333736" " 0.02245800361" " 0.06999608166"
## 13 " 0.11941465394" " 0.59242024965" "-0.38949127544"
## 14 " 0.45174371217" " 0.11317216394" "-0.29770422361"
## 15 "-0.00300427628" "-0.12475670942" " 0.06876928638"
## 16 " 0.00930846262" " 0.04311346974" "-0.02512498857"
## 17 " 0.07951207831" " 0.05504356655" "-0.07609007641"
## 18 " 0.13205215004" " 0.07532874247" "-0.11610031509"
## 19 "-0.12960322961" "-0.00407202961" " 0.06442930786"
## 20 " 0.01019045469" " 0.00229079680" "-0.00331414570"
```

Exemplo - Gordura corporal

```
influence.measures(modelo1)
```

```
## Influence measures of
##   lm(formula = Y ~ X1 + X2, data = dat) :
##
##        dfb.1_    dfb.X1    dfb.X2     dffit cov.r   cook.d    hat inf
## 1  -3.05e-01 -1.31e-01  2.32e-01 -3.66e-01 1.361 4.60e-02 0.2010
## 2   1.73e-01  1.15e-01 -1.43e-01  3.84e-01 0.844 4.55e-02 0.0589
## 3  -8.47e-01 -1.18e+00  1.07e+00 -1.27e+00 1.189 4.90e-01 0.3719   *
## 4  -1.02e-01 -2.94e-01  1.96e-01 -4.76e-01 0.977 7.22e-02 0.1109
## 5  -6.37e-05 -3.05e-05  5.02e-05 -7.29e-05 1.595 1.88e-09 0.2480   *
## 6   3.97e-02  4.01e-02 -4.43e-02 -5.67e-02 1.371 1.14e-03 0.1286
## 7  -7.75e-02 -1.56e-02  5.43e-02  1.28e-01 1.397 5.76e-03 0.1555
## 8   2.61e-01  3.91e-01 -3.32e-01  5.75e-01 0.780 9.79e-02 0.0963
## 9  -1.51e-01 -2.95e-01  2.47e-01  4.02e-01 1.081 5.31e-02 0.1146
## 10  2.38e-01  2.45e-01 -2.69e-01 -3.64e-01 1.110 4.40e-02 0.1102
## 11 -9.02e-03  1.71e-02 -2.48e-03  5.05e-02 1.359 9.04e-04 0.1203
## 12 -1.30e-01  2.25e-02  7.00e-02  3.23e-01 1.152 3.52e-02 0.1093
## 13  1.19e-01  5.92e-01 -3.89e-01 -8.51e-01 0.827 2.12e-01 0.1784
## 14  4.52e-01  1.13e-01 -2.98e-01  6.36e-01 0.937 1.25e-01 0.1480
## 15 -3.00e-03 -1.25e-01  6.88e-02  1.89e-01 1.775 1.26e-02 0.3332   *
## 16  9.31e-03  4.31e-02 -2.51e-02  8.38e-02 1.309 2.47e-03 0.0953
## 17  7.95e-02  5.50e-02 -7.61e-02 -1.18e-01 1.312 4.93e-03 0.1056
## 18  1.32e-01  7.53e-02 -1.16e-01 -1.66e-01 1.462 9.64e-03 0.1968
## 19 -1.30e-01 -4.07e-03  6.44e-02 -3.15e-01 1.002 3.24e-02 0.0670
## 20  1.02e-02  2.29e-03 -3.31e-03  9.40e-02 1.224 3.10e-03 0.0501
```

Inflação da variância

Introdução

Problemas quando variáveis preditoras apresentam correlação alta entre si:

- Incluir ou excluir uma variável preditora altera os coeficientes da regressão.
- Os erros padrão dos coeficientes estimados ficam muito grandes.

A presença de multicolinearidade pode ser investigada através dos seguintes diagnósticos informais:

- Grandes mudanças nas estimativas dos parâmetros de regressão quando uma variável é incluída ou exclluída do modelo.
- Estimativa dos parâmetros de regressão com sinal oposto do que seria esperado, segundo informações/conhecimento prévio.

Exemplo - Gordura corporal

	Estimativa	Erro-Padrão	t	valor de p
(Intercept)	-19.1742456	8.3606407	-2.2933943	0.0348433
X1	0.2223526	0.3034389	0.7327755	0.4736790
X2	0.6594218	0.2911873	2.2645969	0.0368987

Exemplo - Gordura corporal

	Estimativa	Erro-Padrão	t	valor de p
(Intercept)	117.084695	99.782403	1.173400	0.2578078
X1	4.334092	3.015511	1.437266	0.1699111
X2	-2.856848	2.582015	-1.106441	0.2848944
X3	-2.186060	1.595499	-1.370142	0.1895628

VIF - fator de inflação da variância

Lembrando:

$$Var(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$$

Para medir o impacto da multicolinearidade, é mais útil trabalhar com as variáveis com transformação de correlação, vistas anteriormente.

$$Var(\hat{\boldsymbol{\beta}^*}) = (\sigma^*)^2\mathbf{r}_{XX}^{-1}$$

Definindo VIF_k (fator de inflação da variância para $\hat{\beta_k^*}$) como o k-ésimo elemento de $\mathbf{r}_{XX}^{-1}$, temos:

$$Var(\hat{\beta_k^*}) = (\sigma^*)^2 VIF_k$$

VIF - fator de inflação da variância

Pode-se reescrever:

$$VIF_k = (1 - R_k^2)^{-1}$$

em que R_k^2 é o coeficiente de determinação da regressão de X_k nas demais variáveis preditoras.

Quando $R_k^2 = 0$, $VIF_k = 1$, caso contrário, $VIF_k > 1$.

Exemplo - Gordura corporal

Variáveis escala original

```
modelo2 <- lm(Y ~ X1 + X2 + X3,data=dat)
kable(summary(modelo2)$coef,col.names = c("Estimativa","Erro-Padrão","t","valor de p"))
```

	Estimativa	Erro-Padrão	t	valor de p
(Intercept)	117.084695	99.782403	1.173400	0.2578078
X1	4.334092	3.015511	1.437266	0.1699111
X2	-2.856848	2.582015	-1.106441	0.2848944
X3	-2.186060	1.595499	-1.370142	0.1895628

Exemplo - Gordura corporal

Variáveis padronizadas

	Estimativa	Erro-Padrão	t	valor de p
X1	4.263705	2.877965	1.481500	0.1567712
X2	-2.928701	2.567924	-1.140493	0.2698942
X3	-1.561417	1.105576	-1.412310	0.1759032

Exemplo - Gordura corporal

```
library(car)
vif(modelo2)
```

```
##       X1       X2       X3
## 708.8429 564.3434 104.6060
```

Leitura

- Applied Linear Statistical Models: Capítulo 10.
- Faraway - Linear Models with R: Capítulo 6, Seção 7.3
- Draper & Smith - Applied Regression Analysis: Capítulo 8.
- Caffo - Regression Models for Data Science in R: Residuals, variation, diagnostics.