ME613 - Análise de Regressão

Parte 13

Samara F. Kiihl - IMECC - UNICAMP

Regressão Não-Linear

Introdução

$$Y_i = f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_i$$

em que $\mathbf{X}_i$ é o vetor dos valores observados das variáveis preditoras para o i-ésimo caso:

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

e $\boldsymbol{\beta}$ o vetor de coeficientes.

No caso de regressão linear, temos que:

$$f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\beta}) = \mathbf{X_i}^T\boldsymbol{\beta}$$

Introdução

Regressão não-linear:

$$Y_i = f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma}) + \varepsilon_i$$

Exemplos:

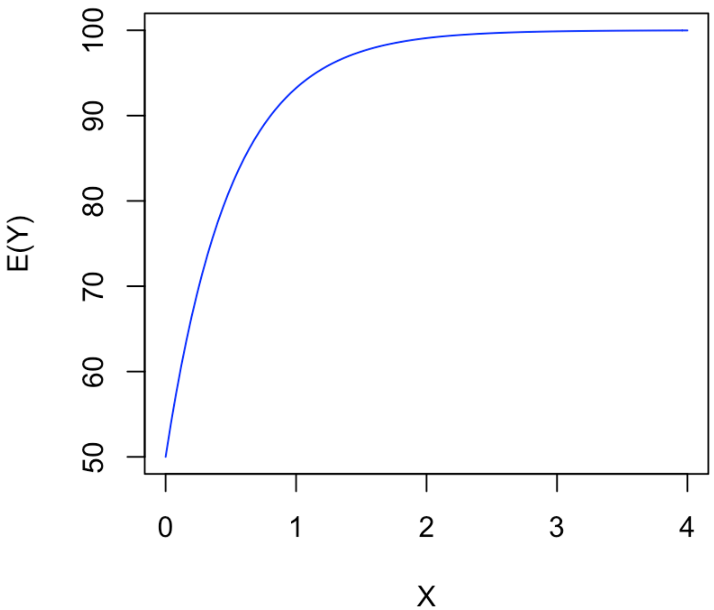
$$Y_i = \gamma_0 \exp(\gamma_1 X_i) + \varepsilon_i$$

$$Y_i = \gamma_0 + \gamma_1 \exp(\gamma_2 X_i) + \varepsilon_i$$

$$Y_i = \frac{\gamma_0}{1 + \gamma_1 \exp(\gamma_2 X_i)} + \varepsilon$$

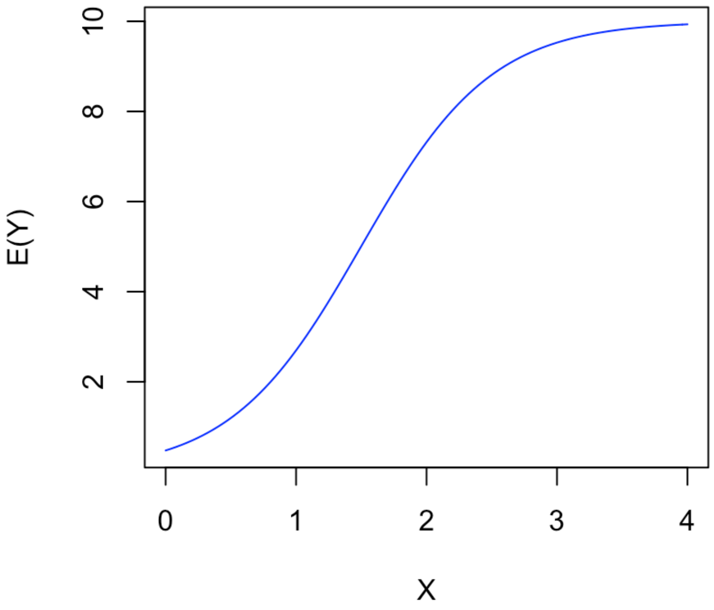
Exemplo

$$E(Y) = 100 - 50\exp(-2X)$$



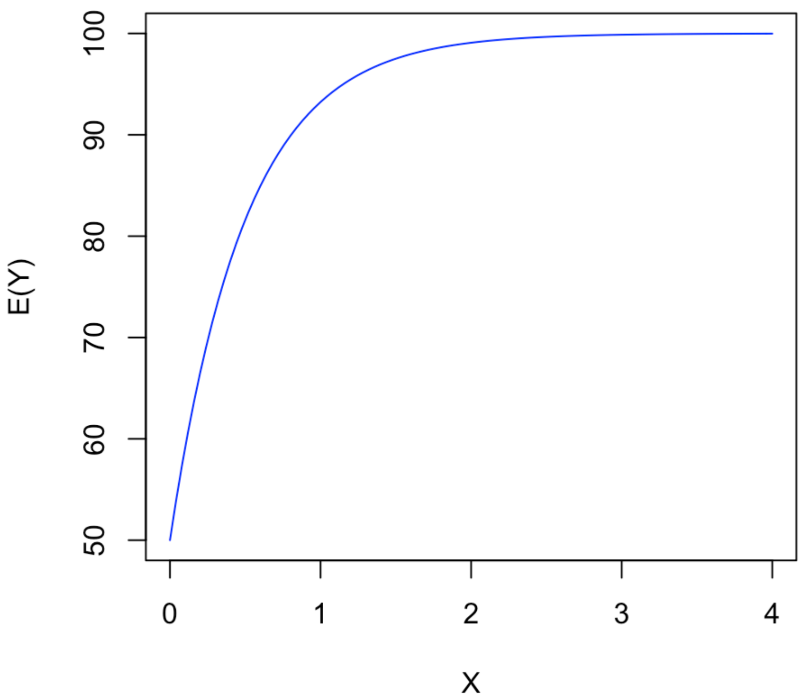
Exemplo

$$E(Y) = \frac{10}{1 + 20\exp(-2X)}$$



Exemplo

$$E(Y) = 100 - 50\exp(-2X)$$



Regressão Não-linear

No caso linear, o número de parâmetros é igual ao número de elementos em $\mathbf{X}_i$, no caso não-linear não temos, necessariamente, esta relação.

$$Y_i = f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma}) + \varepsilon_i$$

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

$$\boldsymbol{\gamma}_{p\times 1} = \begin{pmatrix} \gamma_0 \\ \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_{p-1} \end{pmatrix}$$

Exemplo - Pacientes

X: dias de hospitalização

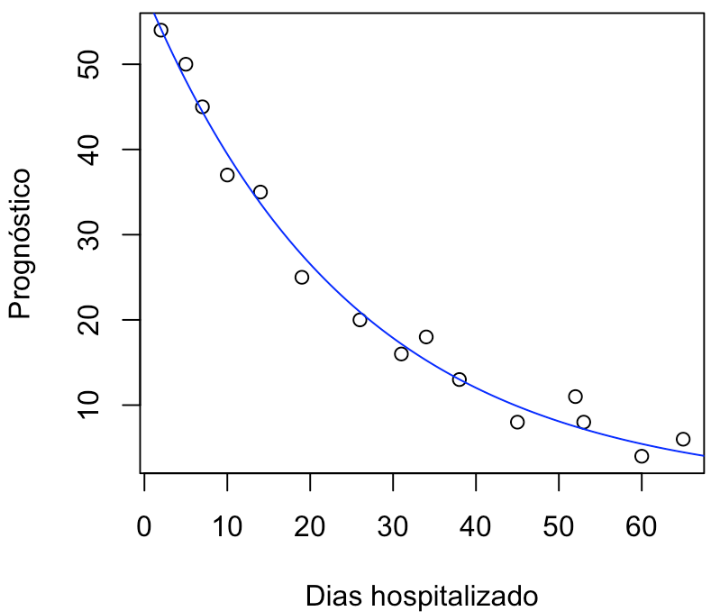
Y: prognóstico

```
##     Y  X
## 1  54  2
## 2  50  5
## 3  45  7
## 4  37 10
## 5  35 14
## 6  25 19
## 7  20 26
## 8  16 31
## 9  18 34
## 10 13 38
## 11  8 45
## 12 11 52
## 13  8 53
## 14  4 60
## 15  6 65
```

Modelo proposto: $Y_i = \gamma_0 \exp(\gamma_1 X_i) + \varepsilon_i$.

Exemplo - Pacientes

$\hat{Y}_i = 58.6065\exp(-0.03959X_i) + \varepsilon_i.$



Mínimos Quadrados

Relembrando, no modelo linear simples:

$$S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i)^2$$

No modelo não-linear:

$$S = \sum_{i=1}^{n} [Y_i - f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})]^2$$

Queremos minimizar S com relação a $\gamma_0, \gamma_1, \ldots, \gamma_{p-1}$.

Mínimos Quadrados

$$\frac{\partial S}{\partial \gamma_k} = \sum_{i=1}^{n} -2[Y_i - f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})] \left[\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_k}\right]$$

Igualando as p derivadas parciais a zero e substituindo os parâmetros γ_k pelas estimativas g_k, temos as p equações normais:

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i \left[\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_k}\right]_{\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{g}} - \sum_{i=1}^{n} f(\mathbf{X}_i, \mathbf{g}) \left[\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_k}\right]_{\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{g}} = 0 \quad k = 0, 1, \ldots, p-1$$

em que $\mathbf{g}$ é o vetor de estimativas por mínimos quadrados:

$$\mathbf{g}_{p\times 1} = \begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ \vdots \\ g_{p-1} \end{pmatrix}$$

Exemplo - Pacientes

$$Y_i = \gamma_0 \exp(\gamma_1 X_i) + \varepsilon_i$$

$$f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma}) = \gamma_0 \exp(\gamma_1 X_i)$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_0} = \exp(\gamma_1 X_i)$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_1} = \gamma_0 X_i \exp(\gamma_1 X_i)$$

Exemplo - Pacientes

Equações normais:

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i \left[\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_k} \right]_{\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{g}} - \sum_{i=1}^{n} f(\mathbf{X}_i, \mathbf{g}) \left[\frac{\partial f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_k} \right]_{\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{g}} = 0 \quad k = 0, 1$$

Temos:

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i \exp(g_1 X_i) - \sum_{i=1}^{n} g_0 \exp(g_1 X_i) \exp(g_1 X_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i g_0 X_i \exp(g_1 X_i) - \sum_{i=1}^{n} g_0 \exp(g_1 X_i) g_0 X_i \exp(g_1 X_i) = 0$$

Exemplo - Pacientes

Simplificando:

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i \exp(g_1 X_i) - g_0 \sum_{i=1}^{n} \exp(2 g_1 X_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i X_i \exp(g_1 X_i) - g_0 \sum_{i=1}^{n} X_i \exp(2 g_1 X_i) = 0$$

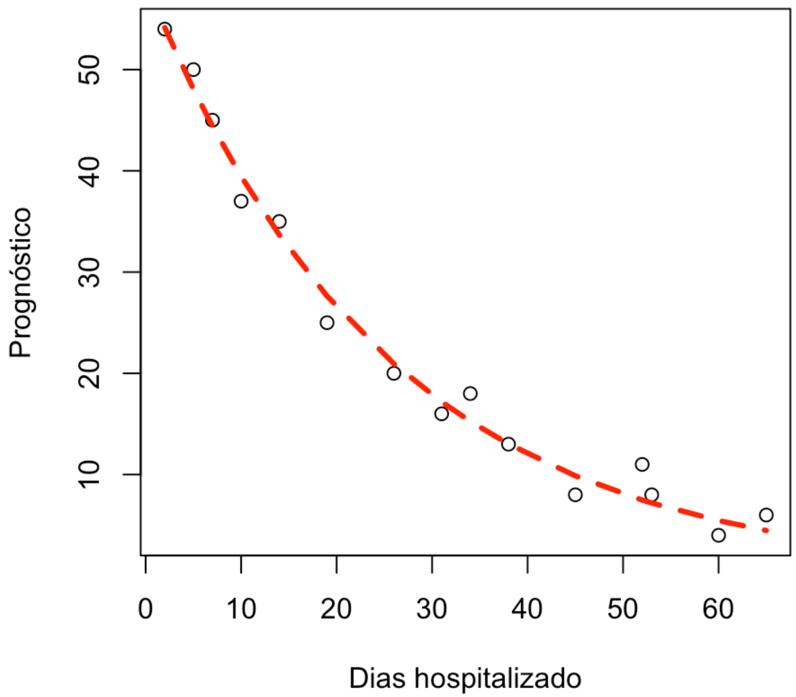
As equações normais não são lineares com relação a g_0 e g_1 e não possuem solução com forma fechada. Métodos numéricos devem ser empregados para obter a solução.

Exemplo - Pacientes

```r
m <- nls(Y~gamma0*exp(gamma1*X),data=dados,start=list(gamma0=56.6646,gamma1=-0.03797))
summary(m)$coef
```

```
##          Estimate  Std. Error   t value     Pr(>|t|)
## gamma0 58.6065313 1.472159424  39.80991 5.699631e-15
## gamma1 -0.0395864 0.001711292 -23.13246 6.013445e-12
```

Exemplo - Pacientes



Exemplo - Pacientes

Para obter os valores iniciais, note que podemos linearizar:

$$\log_e \gamma_0[\exp(\gamma_1 X_i)] = \log_e \gamma_0 + \gamma_1 X_1$$

$$Y_i^* = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i$$

em que $Y_i^* = \log_e Y_i$, $\beta_0 = \log_e \gamma_0$ e $\beta_1 = \gamma_1$.

```
modeloL <- lm(log(Y) ~ X,data=dados)
summary(modeloL)$coef
```

```
##                Estimate  Std. Error   t value     Pr(>|t|)
## (Intercept)  4.03715887 0.084103145  48.00247 5.081672e-16
## X           -0.03797418 0.002284209 -16.62465 3.857871e-10
```

$g_0^{(0)} = \exp(\hat{\beta}_0) = 56.665$ e $g_1^{(0)} = \hat{\beta}_1 = -0.038$.

Leitura

- Applied Linear Statistical Models: Seções 13.1-13.4.
- Draper & Smith - Applied Regression Analysis: Capítulo 24.
- Nonlinear Regression and Nonlinear Least Squares in R