ANÁLISE DE DADOS MULTIVARIADOS I - REGRESSÃO

(AULA 11)

Novembro e dezembro de 2018

Reinaldo Soares de Camargo

Seleção de Variáveis em Modelos de Regressão

Seleção de Variáveis

- Considere agora o modelo geral de regressão:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \ \ldots + \beta_k x_{ki} + \epsilon_i$$

- Imagine que o nosso objetivo é de fazer previsões sobre a variável y_i com base em conjunto possível de variáveis preditoras
- Em geral, a inclusão adicional de variáveis preditoras na regressão, como já mencionamos aumenta o coeficiente de determinação (R^2)
- A inclusão adicional de variáveis preditoras também reduz (mesmo que marginalmente) o erro de previsão (*dentro da amostra*) mesmo que as variáveis preditoras não façam sentido
- Portanto, quanto mais incluímos variáveis explicativas na regressão, o R^2 aumenta e a soma do quadrado dos erros diminui

$$SQE = \sum_{i=1}^{n} [y_i - \hat{y}_i]^2$$

Seleção de Variáveis

- O problema é que a soma do quadrados do erros SQE corresponde aos erros da regressão dentro da amostra (*in-sample error*)
- Nós gostaríamos de ter um modelo de regressão que possa ter boas previsões para dados fora da amostra
    - Exemplo: queremos um modelo para avaliar a probabilidade de sucesso de novos cursos, com base em uma base de dados histórica de cursos anteriores, que fracassaram ou foram bem sucedidos
- Portanto, nós gostaríamos de ter um modelo que apresentasse baixo erro de previsão fora da amostra (*out-of-sample error*)
- Essa ideia de termos um bom modelo para previsão fora da amostra está intrinsicamente ligada aos procedimentos de validação cruzada (*cross-validation*) de um determinado modelo de regressão
    - A ideia da validação cruzada é dividir a amostra disponível em duas subamostras; por exemplo, uma delas com 80% das observações, e a outra com 20%.
    - Essa divisão tem que ser cuidadosa, para manter um certo balanço das informações em cada uma delas.

Seleção de Variáveis

- Validação cruzada:
  - Dividimos a amostra em duas partes – podemos fazer uma divisão aleatória entre as observações que vão entrar em cada subamostra; a primeira amostra com n_1 observações e a segunda com n_2 observações
  - A primeira subamostra é usada para estimar os coeficientes da regressão $(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)$
  - Usamos os coeficientes estimados na primeira amostra para prever a variável reposta na segunda amostra
  - Calculamos agora o erro médio quadrático de previsão (*mean square prediction error*) com base apenas na segunda amostra

$$MSPE = \frac{1}{n_2}\sum_{i=1}^{n_2}[y_i - \hat{y}_i]^2$$

  - Podemos então procurar o modelo de regressão, com as variáveis preditoras, que nos forneça o menor MSPE
  - O MSPE nos dá uma ideia do erro fora da amostra
- Um dos pacotes em R para previsão: "caret" (http://topepo.github.io/caret/index.html)

Seleção de Variáveis

- Vamos agora testar o erro de previsão via *cross-validation* para três modelos
- Vamos dividir a amostra em 20% e 80% aleatoriamente, baleando-se por macrorregião; evitamos assim que uma região fique subrepresentada em uma das amostras
    - Amostra de treinamento: “dadosTrain”
    - Amostra de test: “dadosTest”
- Usaremos o pacote “caret” em R
- Usaremos 80% da amostra para estimação e 20% para testar os erros de previsão de cada modelo
- Três modelos serão avaliados – qual o melhor modelo?

Seleção de Variáveis

- Vamos agora testar o erro de previsão via *cross-validation* para três modelos

- Vamos dividir a amostra em 20% e 80% aleatoriamente, baleando-se por macrorregião; evitamos assim que uma região fique subrepresentada em uma das amostras

    - Amostra de treinamento: “dadosTrain”
    - Amostra de test: “dadosTest”

```
set.seed(2104)
trainIndex <- createDataPartition(dados3$Regiao,
               p = .8, list = FALSE, times = 1) #-- balanceando entre regiões

head(trainIndex)

dadosTrain <- dados3[ trainIndex,] #--- amostra de treinamento
dadosTest  <- dados3[-trainIndex,] #--- amostra usada para testar a previsão

table(dadosTrain$Regiao)
table(dadosTest$Regiao)
```

Seleção de Variáveis

- Modelo 1:

```
mod1 <- lm(mort_infantil ~ renda_per_capita
        + I(renda_per_capita^2)
        + I(renda_per_capita^3)
        + indice_gini
        + salario_medio_mensal
        + perc_criancas_extrem_pobres
        + perc_criancas_pobres
        + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
        + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
        + perc_pop_dom_com_coleta_lixo, data = dadosTrain)
summary(mod1)
```

Seleção de Variáveis

- Modelo 2:

```
mod2 <- lm(mort_infantil ~ renda_per_capita
           + indice_gini
           + salario_medio_mensal
           + perc_criancas_extrem_pobres
           + perc_criancas_pobres
           + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
           + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
           + perc_pop_dom_com_coleta_lixo
           + perc_pop_rural
           + as.factor(Regiao)
           + as.factor(Regiao)*renda_per_capita, data = dadosTrain)
summary(mod2)
```

Seleção de Variáveis

- Modelo 3:

```
mod3 <- lm(mort_infantil ~ renda_per_capita
           + indice_gini
           + salario_medio_mensal
           + perc_criancas_extrem_pobres
           + perc_criancas_pobres
           + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
           + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
           + perc_pop_dom_com_coleta_lixo
           + perc_pop_rural, data = dadosTrain)
summary(mod3)
```

Seleção de Variáveis

- Comparando os três modelos:

```
mod1.pred <- predict(mod1, newdata = dadosTest, se.fit = T)
mod2.pred <- predict(mod2, newdata = dadosTest, se.fit = T)
mod3.pred <- predict(mod3, newdata = dadosTest, se.fit = T)

mod1.pred.error <- mod1.pred$fit - dadosTest$mort_infantil
mod2.pred.error <- mod2.pred$fit - dadosTest$mort_infantil
mod3.pred.error <- mod3.pred$fit - dadosTest$mort_infantil

mod1.mspe <- mean(mod1.pred.error^2)
mod2.mspe <- mean(mod2.pred.error^2)
mod3.mspe <- mean(mod3.pred.error^2)

mod1.mspe
mod2.mspe
mod3.mspe
```

Seleção de Variáveis

- Comparando os três modelos:

```
> mod1.mspe
[1] 16.30217
> mod2.mspe
[1] 12.11678
> mod3.mspe
[1] 16.43305
```

```
> AIC(mod1)
[1] 24780.48
> AIC(mod2)
[1] 23596.65
> AIC(mod3)
[1] 24834.76
```

```
> BIC(mod1)
[1] 24857.3
> BIC(mod2)
[1] 23718.28
> BIC(mod3)
[1] 24905.18
```

Modelo 2 é o melhor, pois teve os menores valores dos testes mspe, AIC e BIC.

```
> formula(mod2)
mort_infantil ~ renda_per_capita + indice_gini + salario_medio_mensal +
    perc_criancas_extrem_pobres + perc_criancas_pobres + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados +
    perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas + perc_pop_dom_com_coleta_lixo +
    perc_pop_rural + as.factor(Regiao) + as.factor(Regiao) *
    renda_per_capita
```

Seleção de Variáveis

- *K-fold cross-validation*:

  Atualmente, uma regra de ouro para a seleção de modelos de previsão baseia-se na metodologia chamada *K-fold cross-validation*

  1. Nesse caso, dividimos (em geral, aleatoriamente) a amostra total de dados em K subamostras; Em geral, usa-se $K = 10$; podemos usar também $K = 5$ ou $K = 20$

  2. Depois de dividir a amostra em $K = 10$ partes, separamos a primeira dessas partes, e estimamos os coeficientes da regressão com base nas outras nove partes conjuntamente

  3. Calculamos agora o erro médio quadrático de previsão (*mean square prediction error*) com base apenas na primeira das 10 partes

$$MSPE_1 = \frac{1}{n_1}\sum_{i=1}^{n_1}[y_i - \hat{y}_i]^2$$

  4. Repetimos os passos 2 e 3 mais nove vezes, cada uma das vezes deixando um 1/10 da amostra de fora estimações, e depois calculando o erro médio de previsão justamente na subamostra deixada de fora

  5. Combinamos os erros médios quadráticos das 10 partes para chegarmos a uma medida agregada do erro de previsão fora da amostra

Seleção de Variáveis

- Em geral, a inclusão indiscriminada de novas variáveis preditoras, apesar de reduzir o erro dentro da amostra, acaba aumentando o erro fora da amostra
- Por outro lado, a não inclusão de variáveis preditoras importantes pode também causar também uma perda de poder de previsão fora da amostra
- Portanto, todos os métodos de seleção automática de variáveis na literatura consideram essa relação de compromisso entre o aumento do poder explicatório da regressão versus a parcimônia na especificação
- Chamamos de ***trade-off viés-variância***
    - Quando incluímos variáveis, ***reduzimos o viés*** do modelo (é possível capturar mais especificidades da relação entre preditores e variável resposta)
    - No entanto, quando incluímos variáveis, temos que estimar mais parâmetros e a imprecisão (***variância***) de cada um deles aumenta
- Uma série de técnicas e indicadores foram criados para encontrarmos modelos para atender a essa relação de compromisso, sem necessariamente termos que recorrer à validação cruzada
    - Vamos estudar algumas dessas técnicas nos próximos slides

Seleção de Variáveis

- Critério de Informação de Akaike - AIC

$$AIC = -2 \log L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k, \sigma^2) + 2 \times p$$

O número p corresponde ao número de parâmetros livres na regressão. No caso da regressão linear, temos: um intercepto, k variáveis preditoras, a variância dos resíduos

$$p = 1 + k + 1 = 2 + k$$

No caso de regressão linear, o AIC é equivalente o critério *Cp* de Mallow

- Critério de Informação Bayesiano - BIC

$$BIC = -2 \log L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k, \sigma^2) + \log n \times p$$

- Os termos $[2 \times p]$ e $[\log n \times p]$, no AIC e BIC, correspondem a pênaltis para a inclusão adicional de variáveis
- Portanto, a inclusão de variáveis vai aumentar $\log L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k, \sigma^2)$, mas aumenta também os pênaltis $[2 \times p]$ e $[\log n \times p]$

Seleção de Variáveis

- Portanto, quando da escolha de um melhor modelo, selecionar aquele que resulte em menor BIC ou menor AIC
- O pênalti no BIC é mais pesado do que no AIC; consequência: o BIC em geral indica a escolha de modelos mais parcimoniosos
- Outros critérios existem, considerando-se outros pênaltis para o número de parâmetros livres *p*, entre eles:
  - Critério de informação de Hannan-Quinn
  - AIC corrigido
- No R:

```
AIC(mod1)
AIC(mod2)
AIC(mod3)

BIC(mod1)
BIC(mod2)
BIC(mod3)
```

Seleção Automática de Variáveis

- Imagine agora queremos encontrar automaticamente um conjunto de variáveis que resulte em um melhor modelo para fins de previsão
- Diversas possibilidades existem na literatura, entre elas:
  - Seleção *best subset **
  - Seleção *stepwise*
  - Seleção *backwards*
  - Seleção *foward*
  - Regressão *ridge*
  - Lasso
- Todas elas buscam satisfazer a relação de compromisso entre erro dentro da amostra e parcimônia do modelo
- O R possui ferramentas para utilização dos métodos acima

Seleção Automática de Variáveis

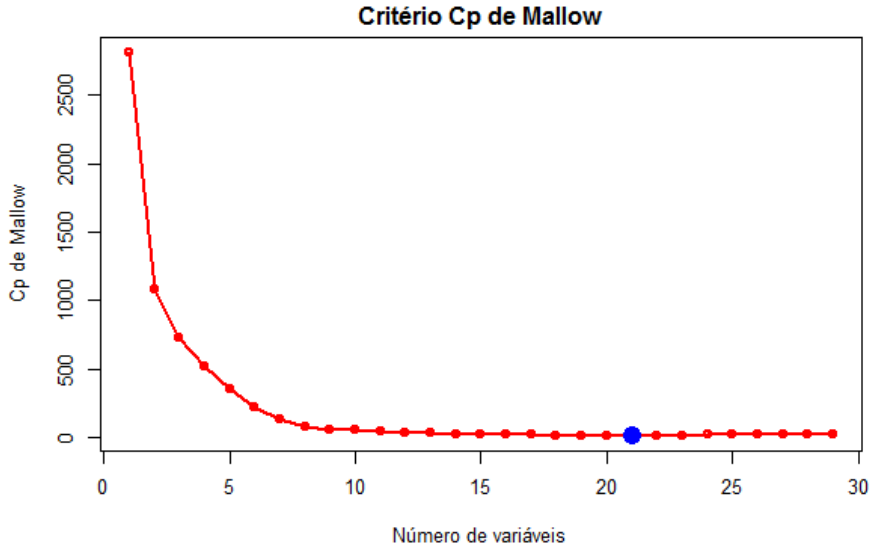
- Seleção *best subset*
  - Varre todas as combinações possíveis de variáveis preditoras para encontrar o conjunto com melhor R^2 ajustado ou melhor critério Cp de Mallow, por exemplo
  - Computacionalmente, pode ser bastante demandante, e pode se tornar inviável quando temos muitas variáveis candidatas
  - Se tivermos M variáveis candidatas, há 2^M conjuntos possíveis; por exemplo, M = 100, há 1,268 x 10^{30} regressões possíveis
- No R:
  - Pacote “leaps”
  - Para cada número de variáveis, encontra o modelo com menos SQE
  - Podemos analisar o valor do Cp (AIC), do BIC, do R^2 ajustado e do R^2 para cada número de variáveis
  - Para cada número de variáveis na regressão, o pacote “leaps” encontra o melhor conjunto de variáveis

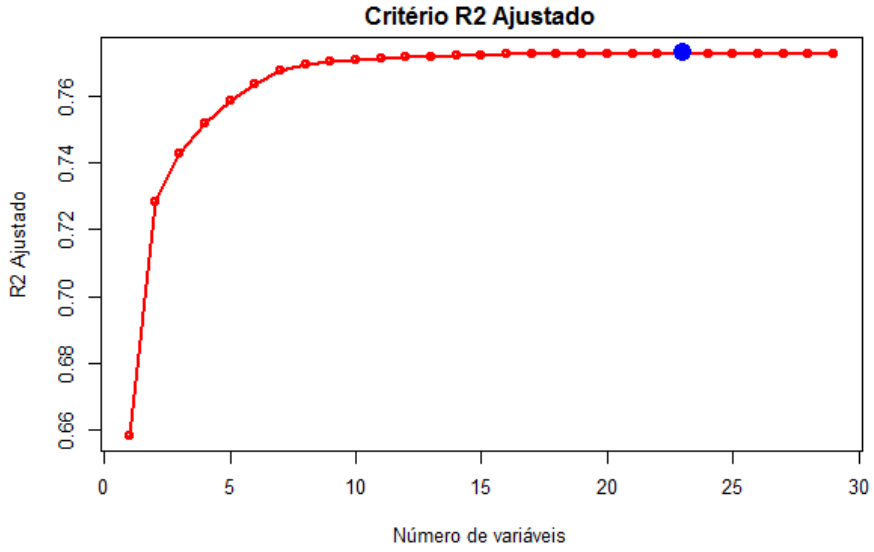
Seleção Automática de Variáveis

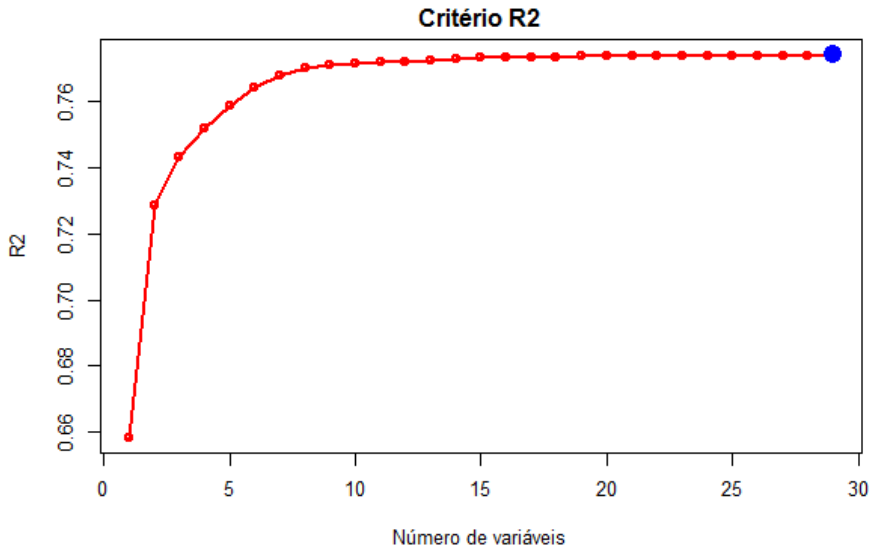
- Modelo completo:

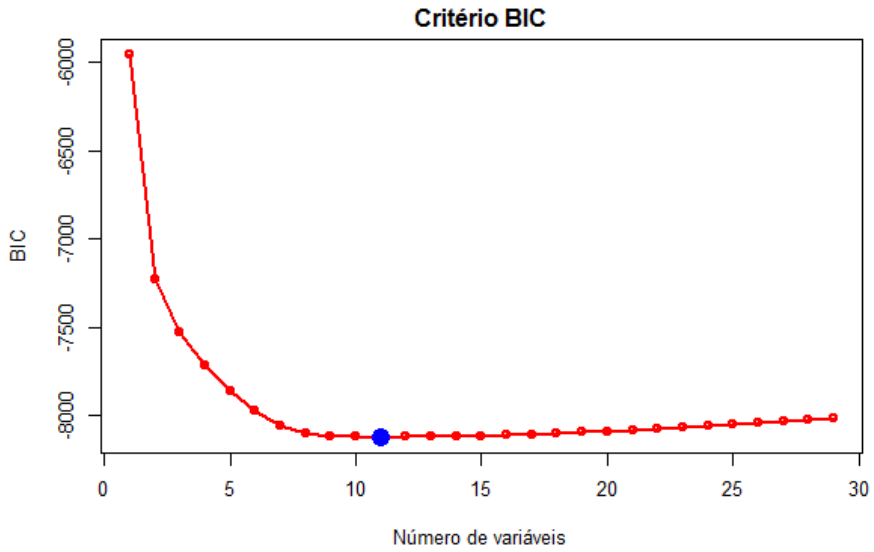
```
bestsub <- regsubsets(mort_infantil ~ renda_per_capita
          + I(renda_per_capita^2)
          + I(renda_per_capita^3)
          + I(renda_per_capita^4)
          + I(renda_per_capita^5)
          + indice_gini
          + I(indice_gini^2)
          + I(indice_gini^3)
          + I(indice_gini^4)
          + I(indice_gini^5)
          + salario_medio_mensal
          + I(salario_medio_mensal^2)
          + I(salario_medio_mensal^3)
          + I(salario_medio_mensal^4)
          + I(salario_medio_mensal^5)
          + perc_criancas_extrem_pobres
          + perc_criancas_pobres
          + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
          + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
          + perc_pop_dom_com_coleta_lixo
          + perc_pop_rural
          + as.factor(Regiao)
          + as.factor(Regiao)*renda_per_capita, data = dados3,
          nvmax = 50)
```

Seleção Automática de Variáveis









Seleção Automática de Variáveis

- Para um número grande (maior do que 50 ou 100) de potenciais preditores, a opção de *best subset* pode ser inviável computacionalmente
- Alternativas computacionalmente viáveis incluem:
  - Seleção *stepwise*
  - Seleção *backwards*
  - Seleção *foward*
- Seleção *forward*:
  1. Comece com uma regressão com apenas o intercepto
  2. Para as demais variáveis candidatas, escolha aquela cuja inclusão implica em maior aumento de R^2
  3. Se essa nova adição foi estatisticamente significante, mantenha a variável; caso contrário, retire a variável, volte ao modelo anterior, e pare o algoritmo
  4. Repita os passos 2 e 3 até que a adição de qualquer nova variável não seja estatisticamente significante (a um nível de significância pré-especificado)

Seleção Automática de Variáveis

- Seleção *backwards*:

    1. Comece com uma regressão com todas as variáveis candidatas
    2. Se houver alguma variável cujo coeficiente é estatisticamente não significativo, elimine a variável que tenha menor nível de significância no modelo (maior p-valor); caso contrário, esse é o modelo final
    3. Repita o passo 2 até atingir um modelo no qual todas as variáveis são estatisticamente significantes (a um nível de significância pré-definido)

- Seleção *Stepwise*:

    1. Trata-se de uma combinação das seleções do tipo *forward* e *backwards*
    2. Os passos *forward* e *backwards* são intercalados, de forma a adicionarmos variáveis que sejam significativas e retirarmos variáveis que não sejam estatisticamente significativas
    3. O algoritmo para quando não for mais possível adicionar variáveis novas que sejam estatisticamente significantes, ou retirar variáveis incluídas que forem estatisticamente não significantes

- Os passos acima dão uma ideia geral dos algoritmos; diferentes softwares possuem versões que são variações ao redor dessa ideia geral

```r
#---------------------------------------------------------------------
#---- Backwards, forward e stepwise selection
#---------------------------------------------------------------------

mod.full <- lm(mort_infantil ~ renda_per_capita
               + I(renda_per_capita^2)
               + I(renda_per_capita^3)
               + indice_gini
               ......
               + as.factor(Regiao)
               + as.factor(Regiao)*renda_per_capita, data = dados3)
summary(mod.full)

step1 <- step(mod.full, direction = "backward")
summary(step1)

step2 <- step(mod.full, direction = "forward")
summary(step2)

step3 <- step(mod.full, direction = "both")
summary(step3)
formula(step3)

mod.step3 <- lm(formula = formula(step3), data = dados3)
summary(mod.step3)
```

Modelos de Regressão Logística

- **4ª Lista de exercícios para entregar em 04/12/2018.**
  - Os exercícios podem ser entregues em grupos de 2 alunos, e o grupo deve submeter o código em R utilizado para responder ao exercício, juntamente com a discussão dos resultados.
  - Utilize a base de dados do IDH brasil 2010 (IDH_Brasil_2010.csv)
  - Rode a regressão logística abaixo:

```
mod5.reduzido <- glm(formula = alta_mort_infantil ~ renda_per_capita
                     + indice_gini
                     + salario_medio_mensal
                     + perc_criancas_extrem_pobres
                     + perc_criancas_pobres
                     + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
                     + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
                     + perc_pop_dom_com_coleta_lixo
                     + perc_pop_rural
                     + as.factor(Regiao),
                     family = binomial(link = "logit"), data = dados3)
summary(mod5.reduzido)
```

  - Questão 1: Interprete os coeficientes da regressão que apresentem significância estatística;

Modelos de Regressão Logística

- **4ª Lista de exercícios para entregar em 04/12/2018 (continuação).**
- Questão 2: Refaça a questão 1, considerando o modelo de regressão logística abaixo, entreprete os odds-ratio dos coeficientes que apresentem significância estatística.

```
mod5.reduzido <- glm(formula = alta_mort_infantil ~ renda_per_capita
            + indice_gini
            + salario_medio_mensal
            + perc_criancas_extrem_pobres
            + perc_criancas_pobres
            + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
            + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
            + perc_pop_dom_com_coleta_lixo
            + perc_pop_rural
            + as.factor(Regiao)
            + as.factor(Regiao)*renda_per_capita,
            family = binomial(link = "logit"), data = dados3)
summary(mod5.reduzido)
```

Questão 3: Com base nos critérios AIC e BIC qual desses modelos seriam selecionados?

- **4ª Lista de exercícios para entregar em 04/12/2018 (continuação).**

- Considere o modelo completo abaixo. Usando os diversos métodos aprendidos em sala de aula, encontre um modelo, subconjunto do modelo abaixo, que apresente o menor AIC. No resultado entregue, você deverá incluir o código em R para obter o melhor modelo, e deverá incluir também a fórmula em R para essa "melhor" regressão

```
mod.full <- lm(mort_infantil ~ renda_per_capita
               + I(renda_per_capita^2)
               + I(renda_per_capita^3)
               + I(renda_per_capita^4)
               + I(renda_per_capita^5)
               + indice_gini
               + I(indice_gini^2)
               + I(indice_gini^3)
               + I(indice_gini^4)
               + I(indice_gini^5)
               + salario_medio_mensal
               + I(salario_medio_mensal^2)
               + I(salario_medio_mensal^3)
               + I(salario_medio_mensal^4)
               + I(salario_medio_mensal^5)
               + perc_criancas_extrem_pobres
               + perc_criancas_pobres
               + perc_pessoas_dom_agua_estogo_inadequados
               + perc_pessoas_dom_paredes_inadequadas
               + perc_pop_dom_com_coleta_lixo
               + perc_pop_rural
               + as.factor(Regiao)
               + as.factor(Regiao)*renda_per_capita, data = dados3)
```

Obrigado!