# Seleção em modelos de regressão

#### Elias T Krainski

Curso de Especialização em Data Science & Big Data Universidade Federal do Paraná

September 15, 2018



Melhor conjunto de preditoras

Seleção passo-a-passo

Regularização







► Em modelos de regressão temos a média de uma variável resposta a modelada em função de *p* variáveis preditoras

$$E(y) = g^{-1}(\eta) \eta = f(x_1, x_2, ..., x_p)$$
 (1)



Em modelos de regressão temos a média de uma variável resposta a modelada em função de p variáveis preditoras

$$E(y) = g^{-1}(\eta) \eta = f(x_1, x_2, ..., x_p)$$
 (1)

Suponha ainda que temos m >> p variáveis preditoras candidatas



Em modelos de regressão temos a média de uma variável resposta a modelada em função de p variáveis preditoras

$$E(y) = g^{-1}(\eta) \eta = f(x_1, x_2, ..., x_p)$$
 (1)

- Suponha ainda que temos m >> p variáveis preditoras candidatas
- ightharpoonup Quais p preditoras escolher entre as m (muitas) candidatas?



# Estratégias comuns

- Melhor conjunto de preditoras
  - estima todos os possíveis modelos e selecionar o melhor



# Estratégias comuns

- Melhor conjunto de preditoras
  - estima todos os possíveis modelos e selecionar o melhor
- Seleção passoa a passo (stepwise)
  - forward: parte de um modelo sem preditora e adiciona a melhor candidata a cada passo
  - backward: parte do modelo com todas e retira a pior a cada passo
  - both: combina anteriores



#### Estratégias comuns

- Melhor conjunto de preditoras
  - estima todos os possíveis modelos e selecionar o melhor
- Seleção passoa a passo (stepwise)
  - forward: parte de um modelo sem preditora e adiciona a melhor candidata a cada passo
  - backward: parte do modelo com todas e retira a pior a cada passo
  - both: combina anteriores
- Regularização
  - solução para outro problema que tem o efeito (colateral) de selecionar preditoras



Melhor conjunto de preditoras



 o número de possíveis modelos com p variáveis dentre m candidatas é

$$\binom{m}{p} = \frac{m!}{p!(m-p)!}$$



 o número de possíveis modelos com p variáveis dentre m candidatas é

$$\binom{m}{p} = \frac{m!}{p!(m-p)!}$$

- ightharpoonup suponha que temos m=4 preditoras candidatas
  - ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=0 é 1
  - ▶ o número de possíveis modelos com p = 1 é m = 4
  - ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=2 é 6
  - o número de possíveis modelos com p = 3 é 4

$$f(x_2, x_3, x_4), f(x_1, x_3, x_4), f(x_1, x_2, x_4) e f(x_1, x_2, x_3)$$

ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=4 é 1



 o número de possíveis modelos com p variáveis dentre m candidatas é

$$\binom{m}{p} = \frac{m!}{p!(m-p)!}$$

- ightharpoonup suponha que temos m=4 preditoras candidatas
  - ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=0 é 1
  - o número de possíveis modelos com p = 1 é m = 4
  - ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=2 é 6
  - o número de possíveis modelos com p = 3 é 4

$$f(x_2, x_3, x_4), f(x_1, x_3, x_4), f(x_1, x_2, x_4) e f(x_1, x_2, x_3)$$

- ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=4 é 1
- ▶ Número total de possíveis modelos é 2<sup>m</sup>

$$ightharpoonup 2^{10} = 1024, 2^{20} = 1048576, 2^{50} = 1.1259e+15, ...$$



 o número de possíveis modelos com p variáveis dentre m candidatas é

$$\binom{m}{p} = \frac{m!}{p!(m-p)!}$$

- ightharpoonup suponha que temos m=4 preditoras candidatas
  - ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=0 é 1
  - ▶ o número de possíveis modelos com p = 1 é m = 4
  - ightharpoonup o número de possíveis modelos com p=2 é 6
  - o número de possíveis modelos com p = 3 é 4

$$f(x_2, x_3, x_4), f(x_1, x_3, x_4), f(x_1, x_2, x_4) \in f(x_1, x_2, x_3)$$

- o número de possíveis modelos com p = 4 é 1
- ▶ Número total de possíveis modelos é 2<sup>m</sup>
  - ightharpoonup 2<sup>10</sup> = 1024, 2<sup>20</sup> = 1048576, 2<sup>50</sup> = 1.1259e+15, ...
  - A probabilidade de ganhar na megacena com um único bilhete de 6 números é  $1/\binom{60}{6} = 1/50063860$

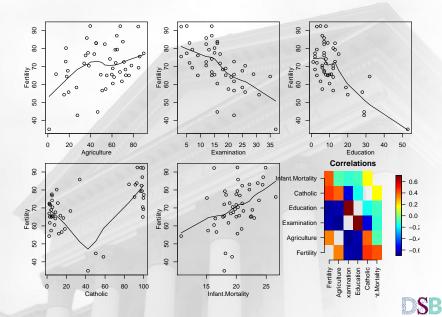


# Estimando todos os possíveis modelos

- No modelo linear (y ~ Normal), usa-se elementos da decomposição QR (usada na estimação)
  - pacote leaps
- Para GLMs ver https://github.com/hadley/meifly/



# **Exemplo Swiss**



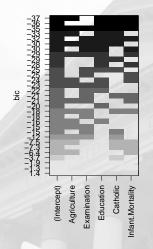
## Swiss: regressão múltipla

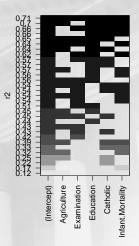
```
summary(lm(Fertility ~., swiss))
##
## Call:
## lm(formula = Fertility ~ ., data = swiss)
##
## Residuals:
##
       Min
                 10 Median
                                  30
                                          Max
## -15.2743 -5.2617 0.5032 4.1198 15.3213
##
## Coefficients:
                  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
##
## (Intercept)
                   66.91518 10.70604 6.250 1.91e-07 ***
## Agriculture
                  -0.17211 0.07030 -2.448 0.01873 *
## Examination
                  -0.25801 0.25388 -1.016 0.31546
                 -0.87094 0.18303 -4.758 2.43e-05 ***
## Education
                   0.10412 0.03526 2.953 0.00519 **
## Catholic
## Infant.Mortality 1.07705 0.38172 2.822 0.00734 **
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 7.165 on 41 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.7067, Adjusted R-squared: 0.671
## F-statistic: 19.76 on 5 and 41 DF. p-value: 5.594e-10
```



## Exemplo: todos os possíveis modelos

```
library(leaps)
a <- regsubsets(Fertility~., nbest=10, data=swiss)</pre>
```







Seleção passo-a-passo



#### Comparação de modelos

- Quando dois modelos diferentes são propostos, é necessário compará-los
- Há diversas medidas de comparação de modelos
- Essas medidas podem ser classificadas em dois grupos
  - Medidas de ajuste (do modelo aos dados)
  - Medidas de predição (fora da amostra)
- Modelos mais flexíveis tendem à se ajustar melhor aos dados mas predizer pior



# Seleção via inclusão passo-a-passo (forward)

- 1. Inicia com modelo sem covariáveis
- 2. Para cada uma das covariáveis candidatas
  - Calcula o ganho pela sua inclusão no modelo atual
- 3. Ordena as variáveis pelo seu ganho
- 4. Se não houver ganho positivo, para
- Se houver ganho positivo, adiciona a variável com maior ganho e volta ao passo 2



# Seleção via retirada passo-a-passo (backward)

- 1. Ajusta o modelo com todas as covariáveis
- 2. Para cada covariável presente no modelo atual
  - Calcula o ganho pela sua retirada do modelo
- 3. Ordena as variáveis pelo seu ganho
- 4. Se não houver ganho positivo, para
- 5. Se houver ganho positivo, retira a variável com maior ganho e volta ao passo 2



## Seleção passo-a-passo com ambas as direções ( both )

- 1. Ajusta um modelo inicial
- 2. Para cada covariável presente no modelo atual
  - Calcula o ganho pela sua inclusão no modelo atual
- Para cada covariável candidata não presente no modelo atual
  - Calcula o ganho pela sua retirada do modelo
- 4. Ordena o ganho devido a cada covariável
  - Se o maior ganho for negativo, para
- 5. Identifica a variável com maior ganho
  - Se a covariável com maior ganho está presente no modelo, retira-a e volta ao passo 2
  - Se a covariável com menor ganho está fora do modelo, adiciona-a e volta ao passo 2



## Exemplo RD de internações Paraná - Julho 2018

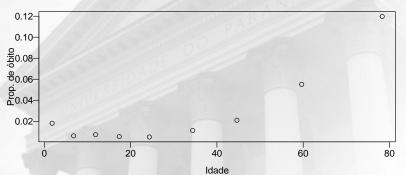
```
library(read.dbc)
dim(rd <- read.dbc("~/dados/datasus/rd/PR/RDPR1807.dbc"))
names(rd)</pre>
```

```
"ESPEC"
          "UF 7T"
                          "ANO CMPT"
                                         "MES CMPT"
                                                                       "CGC_HOSP"
                                                                                      "N ATH"
                                                                                                      "TDFNT"
                          "MUNTC RES'
                                         "NASC
                                                        "SFXO"
                                                                       "UTT MES IN'
           "CFP"
                                                                                      "UTT MES AN
                                                                                                      "UTI_MES_AL"
          "UTT MES TO"
                         "MARCA UTT
                                         "UTT TNT TN"
                                                        "UTT TNT AN"
                                                                       "UTT INT AL"
                                                                                      "UTI INT TO"
                                                                                                      "DTAR ACOM"
    [22]
                          "PROC SOLIC
                                         "PROC REA"
                                                        "VAL SH"
                                                                       "VAL SP"
                                                                                      "VAL SADT'
                                                                                                      "VAL RN"
          "OT DIARTAS"
                                        "VAL_SANGUE"
          "VAL ACOMP"
                          "VAL ORTP"
                                                        "VAL SADTSR"
                                                                       "VAL_TRANSP"
                                                                                      "VAL OBSANG
                                                                                                      "VAL_PED1AC"
          "VAL TOT"
                                        "US_TOT"
                                                        "DT_INTER"
                          "VAI UTT'
                                                                       "DT SATDA"
                                                                                      "DTAG PRINC"
                                                                                                      "DTAG SECUN"
     [43]
                                                        "GESTAO"
                                                                       "RUBRTCA'
                                                                                      "IND_VDRL
          "COBRANCA"
                          "NATURF7A"
                                         "NAT JUR"
                                                                                                      "MUNTC MOV"
     [50]
[57]
          "COD TDADE"
                          "TDADE"
                                         "DTAS PERM"
                                                        "MORTF"
                                                                       "NACTONAL"
                                                                                      "NUM PROC"
                                                                                                      "CAR TNT"
##
          "TOT PT SP"
                          "CPF AUT"
                                         "HOMONIMO"
                                                        "NUM FILHOS"
                                                                       "INSTRU'
                                                                                      "CID NOTIF'
     64
          "CONTRACEP2
                                         "INSC PN"
                                                        "SEO AIH5"
                                                                       "CBOR"
                                                                                      "CNAER"
                          "GESTRISCO"
     Γ71<sup>-</sup>
          "GESTOR COD"
                                                                       "CNES"
                          "GESTOR TP"
                                         "GESTOR CPF"
                                                        "GESTOR DT"
                                                                                      "CNPJ MANT'
                                                                                                      "INFEHOSP"
     Γ78<sup>3</sup>
          "CID ASSO"
                          "CID MORTE"
                                                        "FINANC
                                                                       "FAEC TP"
                                         "COMPLEX"
                                                                                      "REGCT"
                                                                                                      "RACA COR"
##
          "FTNTA"
                          "SEOUENCIA"
                                         "REMESSA
                                                        "AUD JUST"
                                                                       "SIS JUST'
                                                                                      "VAL SH FED"
                                                                                                      "VAL SP FED"
          "VAL SH GES
                          "VAL SP GES
                                         "VAL UCI'
                                                        "MARCA UCI'
                                                                       "DTAGSEC1"
                                                                                      "DTAGSEC2"
                                                                                                      "DIAGSEC3"
    Ī99
          "DIAGSEC4"
                          "DIAGSEC5"
                                         "DTAGSEC6"
                                                        "DIAGSEC7"
                                                                       "DIAGSEC8"
                                                                                      "DIAGSEC9"
                                                                                                      "TPDTSEC1"
   Γ106
                          "TPDTSEC3"
                                         "TPDTSEC4"
                                                        "TPDT SEC5"
                                                                       "TPDTSEC6"
                                                                                      "TPDTSEC7"
          "TPDISEC2"
                                                                                                      "TPDTSEC8"
    Γ113<sup>-</sup>
          "TPDTSFC9"
```



#### Eexmplo RD: Morte por idade

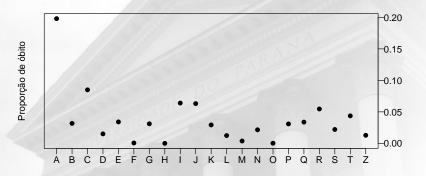
```
idade.b <- c(0,5,10,15,20,30,40,50,70, max(rd$IDADE)+1e-6)
idade.g <- cut(rd$IDADE, idade.b, right=FALSE)
idade.m <- tapply(rd$IDADE, idade.g, mean)
p.idade.g <- tapply(rd$MORTE, idade.g, mean)
plot(idade.m, p.idade.g, xlab='Idade', ylab='Prop. de óbito')</pre>
```





# Exemplo: Morte por diagnóstico principal

```
cid1 <- substr(rd$DIAG_PRINC, 1, 1)
p.cid1 <- tapply(rd$MORTE, cid1, mean)
plot(p.cid1, axes=FALSE, ylab='Proporção de óbito', pch=19)
box(); axis(4); axis(1, 1:length(p.cid1), names(p.cid1))</pre>
```



round(100\*sort(prop.table(table(cid1))))

```
## cid1
## B Q H L R E Z M G P D T A F N C S K I J O
## 1 I 1 2 2 2 2 2 2 2 2 3 3 4 6 7 8 10 13 14 14
```



# Exemplo: RD regressão logística

## Number of Fisher Cossins itemsticus. 10

```
dados <- as.data.frame(model.matrix(~cid1-1))</pre>
names(dados) <- gsub('cid1', '', names(dados))</pre>
dados <- dados[, c1s <- c('A', 'C', 'I', 'J', 'O', 'R')]
dadosidade \leftarrow cut(rdIDADE, c(0,5,40,60,100), right=TRUE)
dados$y <- rd$MORTE; dados <- dados[complete.cases(dados),]</pre>
summary(m3 \leftarrow glm(v \sim ... family=binomial, data=dados))
##
## Call:
## glm(formula = v ~ .. family = binomial. data = dados)
## Deviance Residuals:
                Median
  ## Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
             -5.34585
                    0.14573 -36.684 < 2e-16 ***
  (Intercept)
              2.22955
                       0.06594
                             33.812
              0.98895
                       0.06293
              0.57411
                       0.05801
                       0.05737
              0.96368
                              16.796
             -3.66015
                       0.70872 -5.164
              0.80684
                       0.12489
                             6.460 1.04e-10 ***
## idade(5,40]
             0.41342
                       0.15722
                              2.630
## idade(40,60]
             1.48630
                       0.14776
                              10.059
                                    < 2e-16 ***
## idade(60,100] 2.43648
                       0.14308
                              17.029
                                   < 2e-16 ***
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
## (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
     Null deviance: 24917 on 73048 degrees of freedom
## Residual deviance: 20892 on 73039 degrees of freedom
## AIC: 20912
```

#### Teste de retirada de uma variável do modelo

```
drop1(m3, test='Ch')
## Single term deletions
##
## Model ·
## y \sim A + C + I + J + O + R + idade
         Df Deviance AIC
                            LRT Pr(>Chi)
## <none>
               20892 20912
## A
               21845 21863 953.27 < 2.2e-16 ***
## C
          1 21118 21136 226.50 < 2.2e-16 ***
## T
     1 20987 21005 95.52 < 2.2e-16 ***
     1 21162 21180 270.01 < 2.2e-16 ***
## T
## O
        1 21006 21024 114.81 < 2.2e-16 ***
     1 20926 20944 34.68 3.88e-09 ***
## R
## idade 3 22422 22436 1530.92 < 2.2e-16 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1
drop1(m3, test='Ch', k=log(nrow(dados)))
## Single term deletions
##
## Model:
## v \sim A + C + I + J + O + R + idade
                            LRT Pr(>Chi)
         Df Deviance AIC
##
## <none>
               20892 21004
## A
              21845 21946 953 27 < 2 2e-16 ***
## C
              21118 21219 226.50 < 2.2e-16 ***
## T
        1 20987 21088 95.52 < 2.2e-16 ***
## J
        1 21162 21262 270.01 < 2.2e-16 ***
         1 21006 21107 114.81 < 2.2e-16 ***
## O
## R
        1 20926 21027 34.68 3.88e-09 ***
## idade 3 22422 22501 1530.92 < 2.2e-16 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```



#### Exemplo RD backward

selb <- step(m3, direction='backward', trace=0)
summary(selb)</pre>

```
selb <- step(m3, direction='backward', trace=0)
summary(selb)
##
## Call:
## glm(formula = y \sim A + C + I + J + O + R + idade, family = binomial,
      data = dados)
##
## Deviance Residuals:
      Min
                10 Median
                                         Max
## -0.9055 -0.3258 -0.2042 -0.1199 4.1455
##
## Coefficients:
##
                Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## (Intercept)
                -5.34585 0.14573 -36.684 < 2e-16 ***
               2.22955 0.06594 33.812 < 2e-16 ***
## A
                0.98895 0.06293 15.715 < 2e-16 ***
## C
## I
               0.57411 0.05801 9.896 < 2e-16 ***
## J
                0.96368   0.05737   16.796   < 2e-16 ***
                -3.66015 0.70872 -5.164 2.41e-07 ***
## 0
## R
               0.80684 0.12489 6.460 1.04e-10 ***
## idade(5,40] 0.41342 0.15722 2.630 0.00855 **
## idade(40,60] 1.48630 0.14776 10.059 < 2e-16 ***
## idade(60,100] 2.43648
                           0.14308 17.029 < 2e-16 ***
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
      Null deviance: 24917 on 73048 degrees of freedom
## Residual deviance: 20892 on 73039 degrees of freedom
## 170 20012
```



#### Teste de adição de uma variável no modelo

```
m0 \leftarrow glm(y \sim 0, family=binomial, data=dados)
sc0 <- paste('~.+', paste(c(c1s, 'idade'), collapse='+'))</pre>
add1(m0, as.formula(sc0), test='Ch')
m0 <- glm(y ~ 0, family=binomial, data=dados)
sc0 <- paste('~.+', paste(c(c1s, 'idade'), collapse='+'))</pre>
add1(m0, as.formula(sc0), test='Ch')
## Single term additions
##
## Model:
## y ~ 0
        Df Deviance AIC LRT Pr(>Chi)
## <none> 101267 101267
       1 100348 100350 920 < 2 2e-16 ***
## A
## C 1 96941 96943 4327 < 2.2e-16 ***
## I 1 92766 92768 8501 < 2.2e-16 ***
## J 1 91983 91985 9285 < 2.2e-16 ***
## 0 1 86991 86993 14277 < 2.2e-16 ***
    1 99915 99917 1352 < 2.2e-16 ***
## R
## idade 4 22165 22173 79103 < 2.2e-16 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```



#### Exemplo RD forward

```
self <- step(m0, as.formula(sc0), test='Ch', trace=0)
summary(self)</pre>
```

```
self <- step(m0, as.formula(sc0), test='Ch', trace=0)</pre>
summary(self)
##
## Call:
## glm(formula = y \sim idade + A + O + J + C + I + R - 1, family = binomial,
##
      data = dados)
##
## Deviance Residuals:
      Min
                10 Median
                                          Max
## -0.9055 -0.3258 -0.2042 -0.1199 4.1455
##
## Coefficients:
##
                Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## idade(0.5] -5.34585 0.14573 -36.684 < 2e-16 ***
## idade(5,40]
               -4.93243 0.07357 -67.041 < 2e-16 ***
## idade(40.60]
               -3.85954 0.05068 -76.154 < 2e-16 ***
## idade(60.1001 -2.90937  0.04247 -68.502 < 2e-16 ***
## A
                2.22955 0.06594 33.812 < 2e-16 ***
## 0
                -3.66015 0.70872 -5.164 2.41e-07 ***
                            0.05737 16.796 < 2e-16 ***
## T
                 0.96368
                 0.98895    0.06293    15.715    < 2e-16 ***
## C
                 0.57411 0.05801 9.896 < 2e-16 ***
## T
## R
                 0.80684
                            0.12489 6.460 1.04e-10 ***
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
      Null deviance: 101267 on 73049 degrees of freedom
## Residual deviance: 20892 on 73039 degrees of freedom
## 170 20012
```





# Regularização

- ▶ Há casos em que p > n (genética por exemplo)
- ▶ Nesses casos é impossível estimar todos os *p* coeficientes
- A regularização é uma forma de tornar isso possível

#### Regularização

- É uma penalização dos coeficientes

  - ► Ridge:  $\sum_{j} \beta_{j}^{2} < t$ ► LASSO:  $\sum_{i} |\beta_{j}| < t$



## Regularização: material

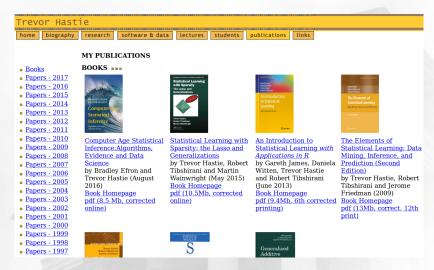


Figure 1: Página com lista de livros do prof. Trevor Hastie web.stanford.edu/~hastie/pub.htm



#### Exemplo de LASSO

Simula 10 covariáveis, das quais três são correlacionadas entre si

```
n <- 1000
p <- 10
set.seed(1)
x <- matrix(runif(n*p), n)</pre>
x[,2] <- x[,2]+x[,1]
x[,3] <- x[,3]-x[,4]+x[,5]
round(100*cor(x))
round(100*cor(x))
     100
    [2,]
  [3,]
  Γ7. 1
  [9,]
## F10.7
```



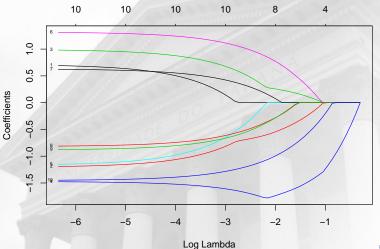
## Exemplo de LASSO (cont.)

```
set.seed(2)
(b \leftarrow sample(0.5+(1:p)/p)*(rbinom(p, 1, 0.5)*2-1))
## [1] 0.7 -1.2 1.0 -1.5 -1.1 1.3 0.6 -0.8 -0.9 -1.4
s < -0.5
set.seed(3)
y < -10 + drop(x%*%b) + rnorm(n)*s
library(glmnet)
lasso.res <- glmnet(x, y)</pre>
```



# Exemplo de LASSO (cont.)

```
plot(lasso.res, xvar='lambda', label=TRUE)
```





#### LASSO características

- A partir do momento que o coeficiente de x1 zerou, a trajetoria do coeficiente de x2 altera
- A partir do momento que o coeficiente de x5 zerou,
  - a trajetoria dos coeficientes de x3 e x4 se alteram.
  - A partir do momento que o coeficiente de x3 zera, a trajetoria do coeficiente de x4 altera
- A trajetoria dos demais nao sao influenciadas pelo fato do coeficiente de qualquer das outras serem zerados

