

Aprendizado supervisionado 1

Especialização em Ciência de dados, IM/UFRJ Thaís C O Fonseca DME/UFRJ

Modelos de regressão linear múltipla

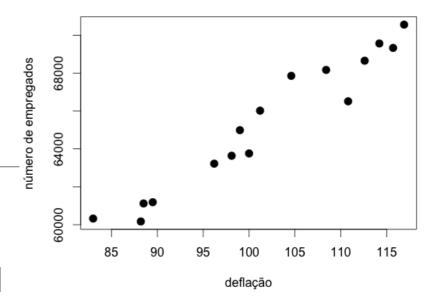
Exemplo

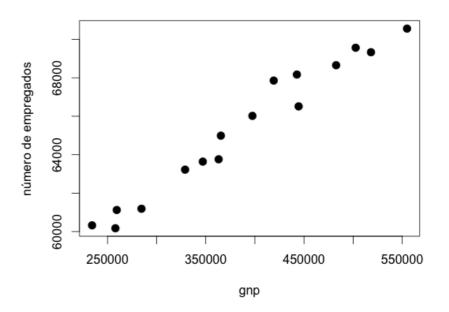
Considere novamente o exemplo sobre emprego. Além do índice econômico temos disponível também

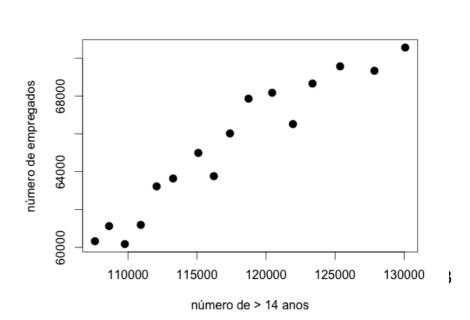
- o GNP, o produto nacional bruto.
- o número de pessoas com mais de 14 anos de idade.

Seja X1 o índice econômico de deflação, Y o número de pessoas empregadas, X2 o GNP e X3 o número de pessoas com mais de 14 anos

Existe relação entre Y e as covariáveis X1, X2 e X3?







Modelo de regressão linear múltipla

O modelo geral é dado por

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k + \epsilon.$$

Nesse caso,

$$E(y \mid x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k.$$

 \rightarrow Dizemos que a regressão é linear pois $E(y \mid x)$ depende de forma linear de $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$.

O modelo abaixo é linear?

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \epsilon$$

Sim!!!! Basta reescrever $x_3=x_1x_2$.

Notação matricial

Para uma amostra de tamanho n, y_1, \ldots, y_n , defina:

$$\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)' \to \text{ vetor n por 1 de observáveis}$$

$$\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)' \to \text{ vetor } (p=k+1) \text{ por } 1 \text{ de coeficientes}$$

$$\epsilon = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)' \to \text{ vetor n por 1 de erros}$$

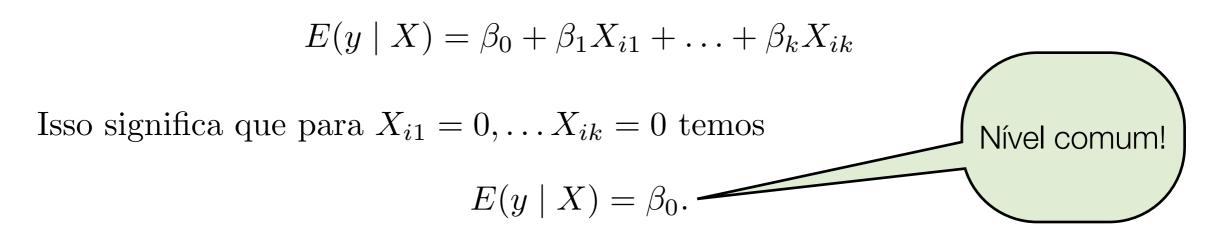
$$\mathbf{X} = (\mathbf{1}, x_1, \dots, x_k) \rightarrow \text{matriz n por p de covariáveis}$$

O modelo é dado por

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \epsilon$$

Interpretação dos coeficientes

• Vimos que para cada $X_{i1}, \dots X_{ik}$ temos



Então β_0 é interpretado como o valor esperado de y para o valor 0 das covariáveis.

Interpretação dos coeficientes

• Considere $X = X^*$ então

$$E(y \mid X^*) = \beta_0 + \beta_1 X_{i1}^* + \beta_2 X_{i2}^* + \ldots + \beta_k X_{ik}^*.$$

Considere também $X_{i1} = X_{i1}^* + 1$ e $X_{i(-1)} = X_{i(-1)}^*$

$$E(y \mid X_{i1}^* + 1, X_{i(-1)}^*) = \beta_0 + \beta_1(X_{i1}^* + 1) + \beta_2 X_{i2}^* \dots + \beta_k X_{ik}^*.$$

Fazendo a diferença temos

$$E(y \mid X_{i1}^* + 1, X_{i(-1)}^*) - E(y \mid X = X^*) = \beta_1.$$

Então β_1 é interpretado como a mudança no valor esperado de y quando acrescentamos 1 unidade em X_1 para as outras variáveis fixas em uma constante qualquer.

O mesmo

para x_j!

Método de mínimos quadrados

Considere uma amostra de tamanho n.

Queremos encontrar o modelo ajustado

$$\hat{\mathbf{y}} = X\hat{\beta} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \ldots + \hat{\beta}_k x_k$$

que minimiza a soma de quadrados dos erros. Então queremos encontrar β que minimize a função

$$S(\beta) = (\mathbf{y} - X\beta)'(\mathbf{y} - X\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (\beta_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \dots + \hat{\beta}_k x_{ik}))^2.$$

Isto é, queremos minimizar

$$S(\beta) = \mathbf{y}'\mathbf{y}' - \beta'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\beta + \beta'\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta$$

Resultando em

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$$

satisfeito
quando as
colunas de X
não forem
linearmente
dependentes!

Será

Quando a matriz (X'X)-1 existe!!!

Algumas definições

• Modelo ajustado

Podemos reescrever

$$\hat{\mathbf{y}} = X\hat{\beta}$$

Matriz H: importante na análise de resíduos.

$$\hat{\mathbf{y}} = X(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} = H\mathbf{y}$$

• Resíduos

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - X\hat{\beta} = \mathbf{y} - H\mathbf{y} = (I_n - H)\mathbf{y}$$

Suposições do modelo de regressão múltipla

As suposições são as mesmas do modelo simples:

- 1. Erros tem média zero. $E(\epsilon) = 0$
- 2. Variância constante. $V(\epsilon) = \sigma^2$
- 3. Erros não correlacionados. $Cor(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$

Vimos que o modelo para k covariáveis é dado por:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k + \epsilon$$

Método de máxima verossimilhança

$$L(\beta, \sigma^2; y, x) = f(y_1, \dots, y_n; x)$$

$$= (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(y - X\beta)'(y - X\beta)\right\}$$

Para encontrar o EMV devemos maximizar a função acima.

Isso equivale a encontrar o estimador de mínimos quadrados para β .

Os valores de β, σ^2 que maximizam a função acima são

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(y - X\hat{\beta})'(y - X\hat{\beta})}{n}$$

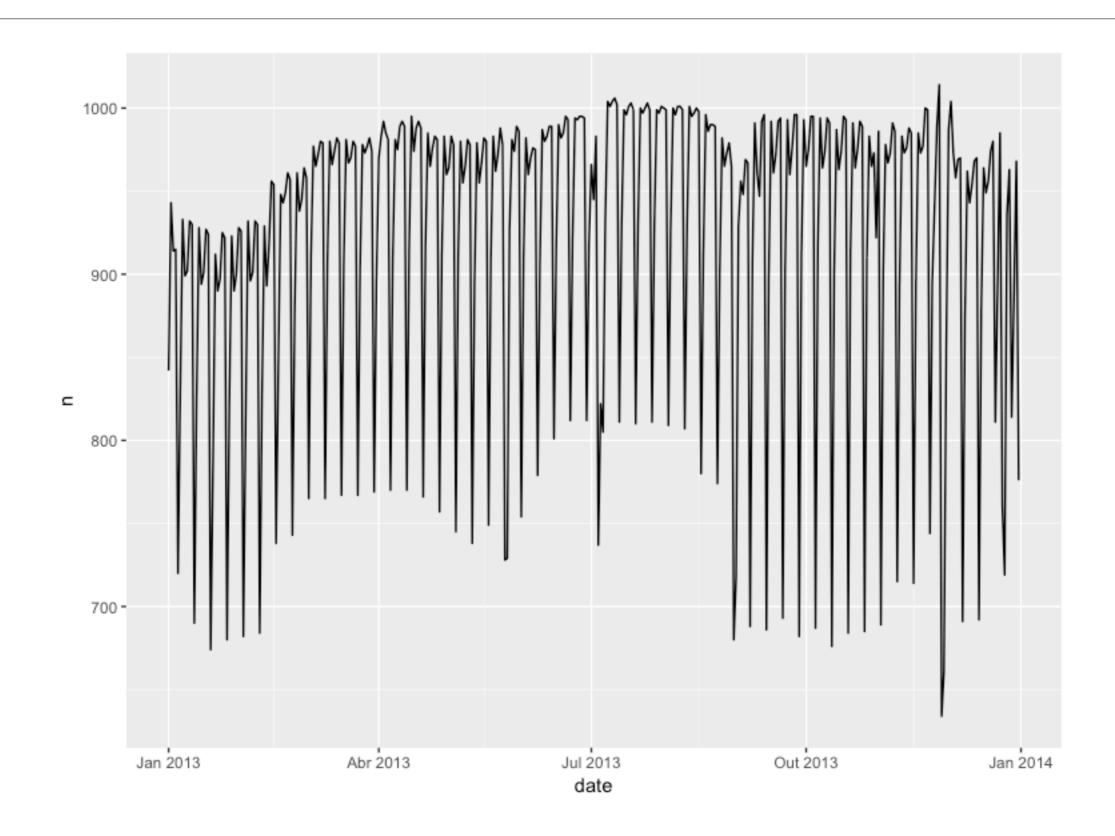
Exemplo de modelagem (regressão)

O que afeta o número diário de voos em NY

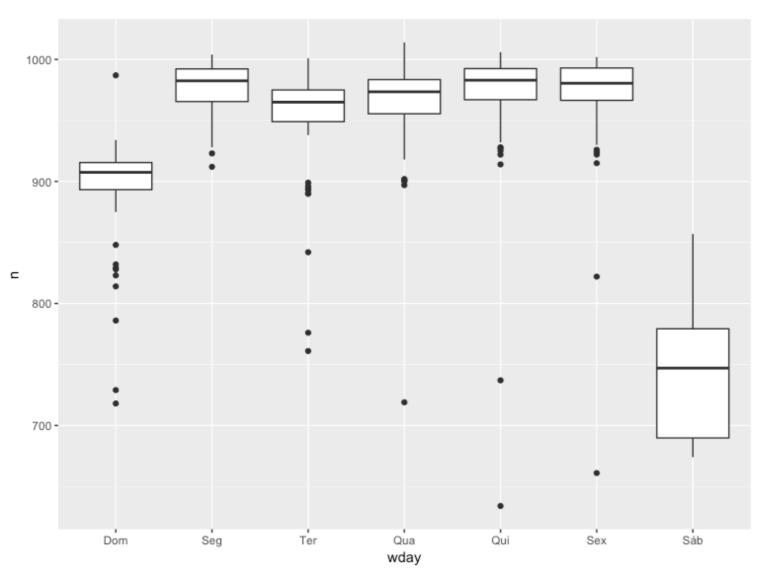
- Vamos considerar os dados do número de voos por dia que saem da cidade de Nova York.
- O conjunto de dados é de pequeno porte: 365 linhas e 2 colunas.

```
# A tibble: 365 x 2
  date
  <date> <int>
  2013-01-01
               842
2 2013-01-02 943
3 2013-01-03 914
4 2013-01-04 915
5 2013-01-05
             720
6 2013-01-06
             832
  2013-01-07
             933
  2013-01-08
             899
9 2013-01-09
               902
  2013-01-10
              932
 ... with 355 more rows
```

Gráfico da série temporal do número de voos



Dados por dia da semana



- Claro efeito de fim de semana, em particular no sábado.
- Maior parte das viagens devem ser a trabalho.
- Note que o efeito de sábado é bem menor (até mesmo quando comparado a domingo).

 Vamos ajustar um modelo com efeito de dia da semana. Qual é esse modelo?

Modelo com efeito de dia da semana

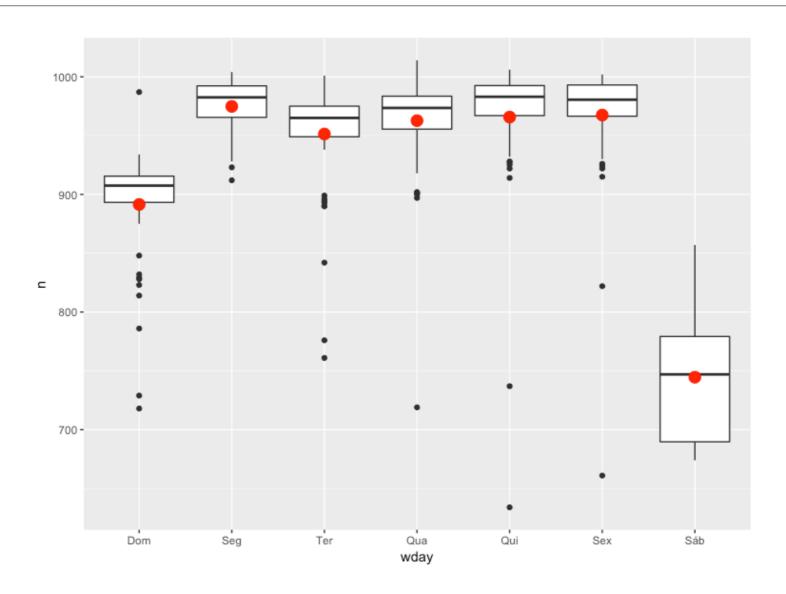
Neste exemplo temos variáveis dummies indicadoras do dia da semana, com $I_{mon} = 1$ se segunda-feira e 0 caso contrário.

$$y = X\beta + \epsilon$$
,

onde $X = (I_{sun}, I_{mon}, I_{tue}, I_{wed}, I_{thu}, I_{fri}, I_{sat}).$

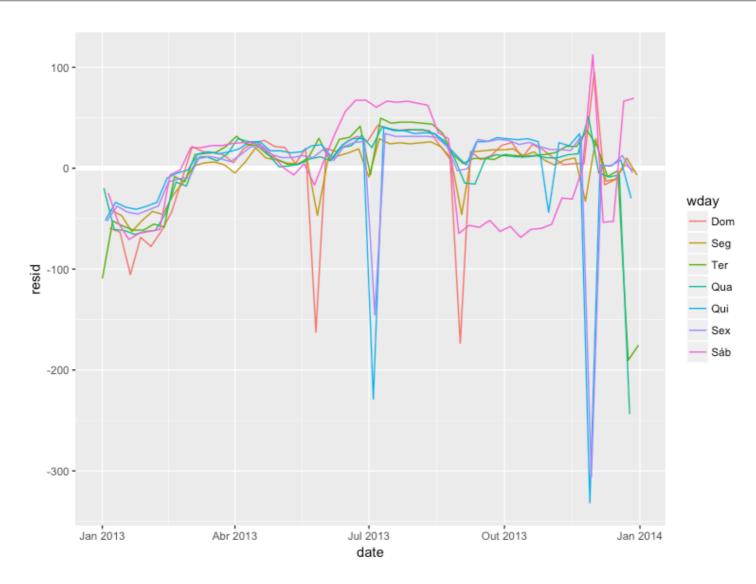
```
Coefficients:
daily$wdaySun daily$wdayMon daily$wdayTue daily$wdayWed daily$wdayThu
891.5 974.8 951.4 962.7 965.8
daily$wdayFri daily$wdaySat
967.5 744.6
```

Modelo com efeito de dia da semana



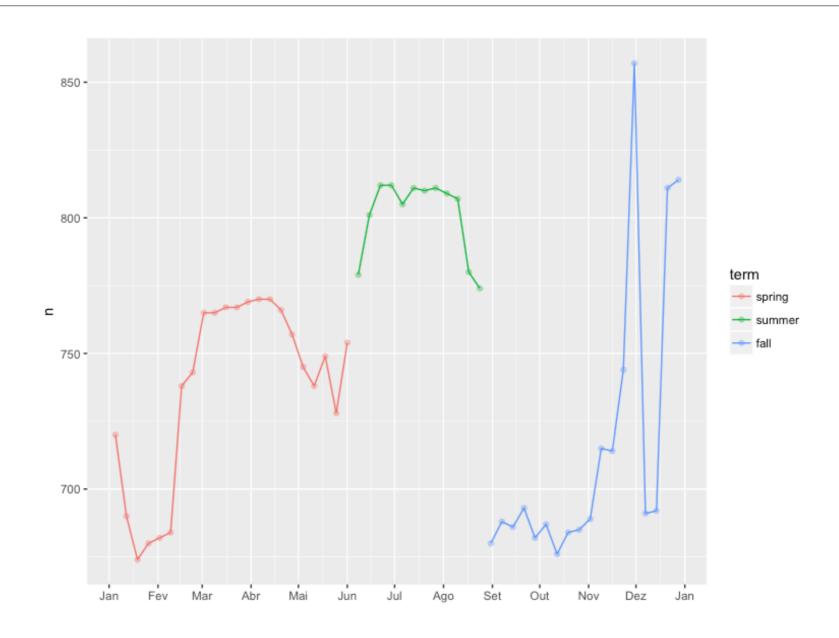
· Dados e previsão usando modelo com efeito de dia da semana.

Resíduos



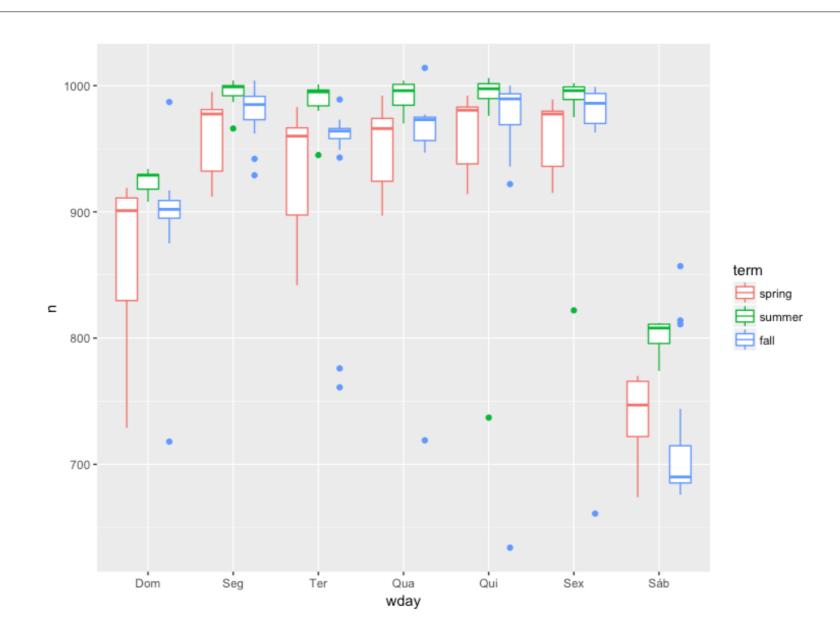
- Resíduos por dia da semana.
- Note que o comportamento no sábado difere dos demais.

Número de voos aos sábados no "term"



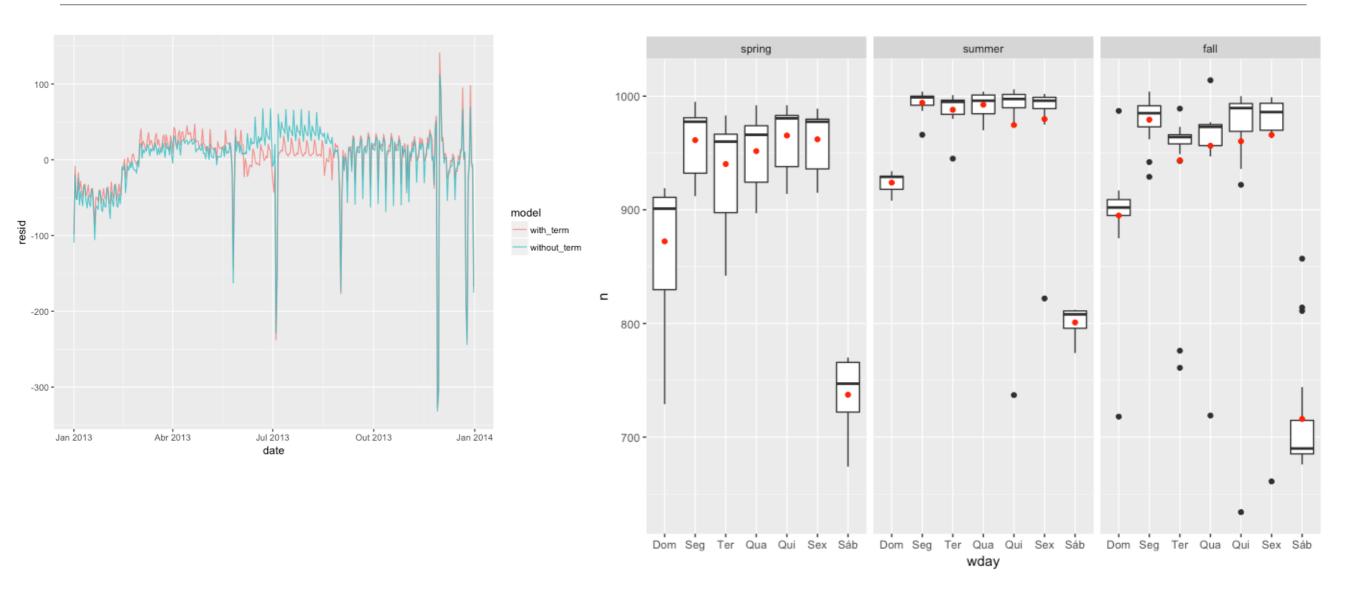
Note os comportamentos bem distintos ao longo do ano.

Para os outros dias da semana



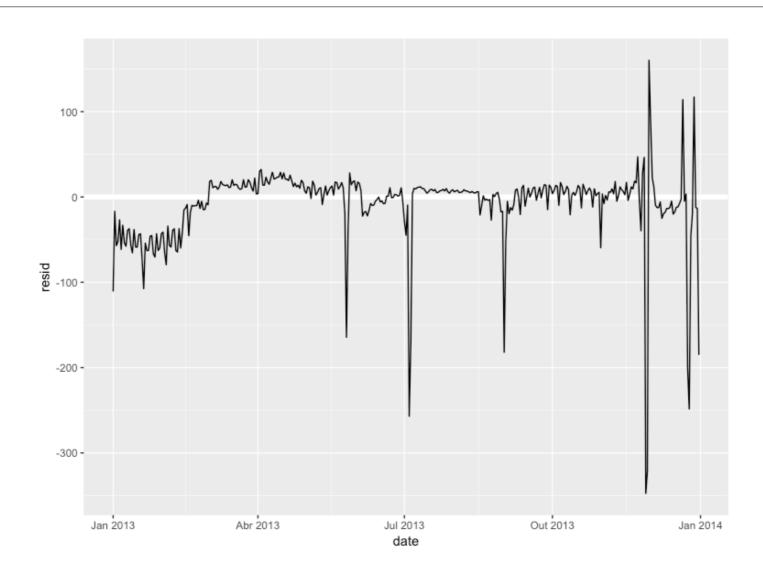
- O summer term tem número de voo mais altos do que os outros terms.
- · Esse efeito deve ser incluído no modelo.

Modelo com term



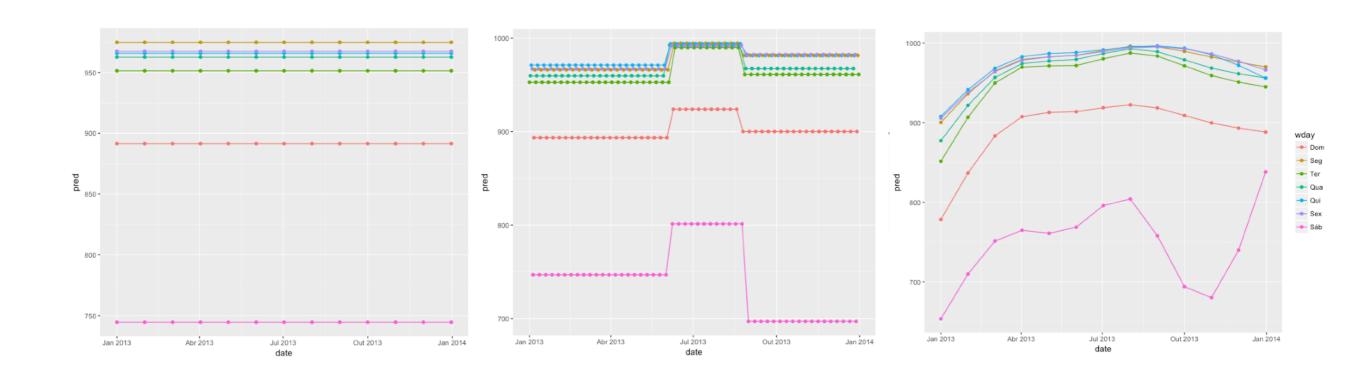
As médias estimadas são afetadas pelos outliers nos dados.

Resíduos



- Agora não vemos mais os efeitos de dia da semana e dos terms.
- Conseguimos ver grandes outliers devido a feriados nacionais. E também uma tendência ao longo do ano.

Melhorando o modelo



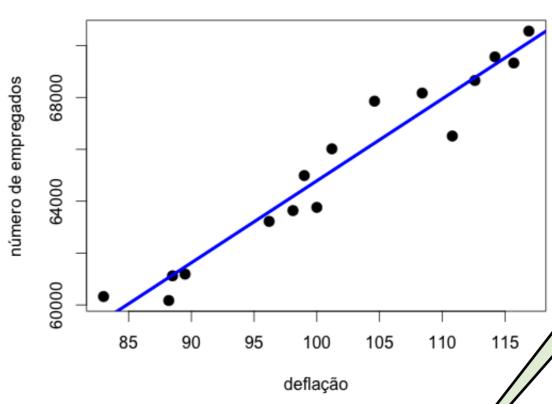
- Gráfico: Modelo ajustado com efeito do dia da semana, com efeito do dia da semana e term e modelo que usa splines (veremos mais a frente esse ajuste).
- Note que o modelo de regressão mantém a interpretabilidade.

Alguns comentários

- Note que algum pensamento crítico foi necessário nesse exemplo para que variáveis explicativas razoáveis fossem sugeridas.
- Um método totalmente automático pode não considerar esses nuances que o cientista de dados fazendo a modelagem deve considerar.
- Isso é verdade mesmo em contexto puramente preditivos.
- O modelo considera observações não correlacionadas, porém temos uma série temporal. O modelo poderia ser melhorado para incluir correlação temporal.

Regressão: contexto de Estatística x contexto de Machine learning

Contexto estatístico



Foco na
interpretação dos
coeficientes, verificação
das hipóteses.

- O ajuste da regressão é bom?
- O modelo parece útil para previsão?
- As suposições básicas são válidas?

Os erros têm média 0, variância constante e são não correlacionados?

Contexto de machine learning

• Iremos focar no objetivo preditivo, isto é, no caso de regressão linear onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)$ temos

$$g(\mathbf{x}) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \ldots + \hat{\beta}_p x_p$$

• Após ajustar o modelo utilizando $\mathbf{x_1}, \dots, \mathbf{x}_N$, para novos dados temos

$$g(\mathbf{x}_{N+1}) \approx y_{N+1}, \dots, g(\mathbf{x}_{N+k}) \approx y_{n+k}$$

- Escolheremos o modelo com o melhor poder preditivo.
 - O modelo é utilizado apenas para criar bons algoritmos para prever bem novas observações.
 - Muitas vezes, não há modelo probabilístico explícito por trás dos algoritmos utilizados.

Função de risco

- Seja $g(\mathbf{x})$ a função utilizada para previsão.
- Para uma nova observação (\mathbf{x}, y) , podemos definir o risco de um modelo preditivo por

$$R_g = E[y - g(\mathbf{x})]^2$$

- Esta função de risco é a perda quadrática esperada e será dita risco quadrático.
- Quanto menor o risco melhor o modelo, segundo a perda escolhida.

Função de risco

• Podemos mostrar que

$$R_g = E[y - g(\mathbf{x})]^2$$

$$= E\{[y - E(y \mid x)]^2\} + E\{[E(y \mid x) - g(\mathbf{x})]^2\}$$

- Condicional a \mathbf{x} , temos que $g(x) = E(y \mid x)$ minimiza o risco.
- \bullet Se X visto como aleatório temos o mesmo resultado com a esperança também tomada na distribuição de ${\bf x}.$

Modelagem e previsão

Modelo global e modelo local (perda quadrática)

Outras relações mais lexíveis que a regressão linear poderiam ser usadas aqui.

- Vimos que $E(y \mid x)$ minimiza a perda quadrática.
- Podemos pensar em duas soluções:

(i) Regressão:
$$\hat{g}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1, \dots + \hat{\beta}_p x_p;$$

(ii) Vizinhos próximos: $\hat{g}(x) = media(y_i \mid x_i \in V_k(x))$.

Para N grande a média empírica irá convergir para a teórica. Porém a taxa de convergência é mais lenta quando p cresce.

- Aproxima-se a media teórica usando a média empírica de dados de treinamento.
- Considere-se apenas os k vizinhos mais próximos.

Aprendizado supervisionado

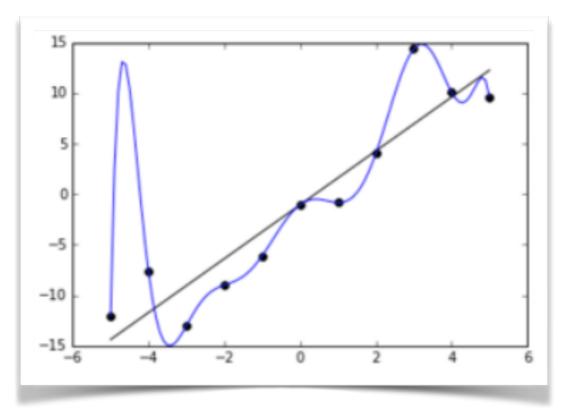
• Considere interesse em estimar $g(\mathbf{x})$ usando dados $(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)$ e a relação

$$y = g(\mathbf{x}) + \epsilon.$$

- Dados de treinamento $(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)$ alimentam um algoritmo que produz outputs $\hat{g}(x_i)$;
- O erro $y_i \hat{g}(x_i)$ realimenta o algoritmo de modo a aperfeiçoá-lo.

Dados de treinamento e teste

- Note que se usamos apenas os dados de treinamento para escolher o melhor modelo de regressão podemos ter sobreajuste.
- Por exemplo um polinômio com n-1 graus ajusta os dados perfeitamente.
- Mas esse modelo n\u00e3o seria \u00e1til para prever fora da amostra de treinamento.



Dados de treinamento e teste

- Definimos então um conjunto de teste.
- Este não é usado para estimar parâmetros, apenas para calcular o risco do modelo.
- · Por exemplo,

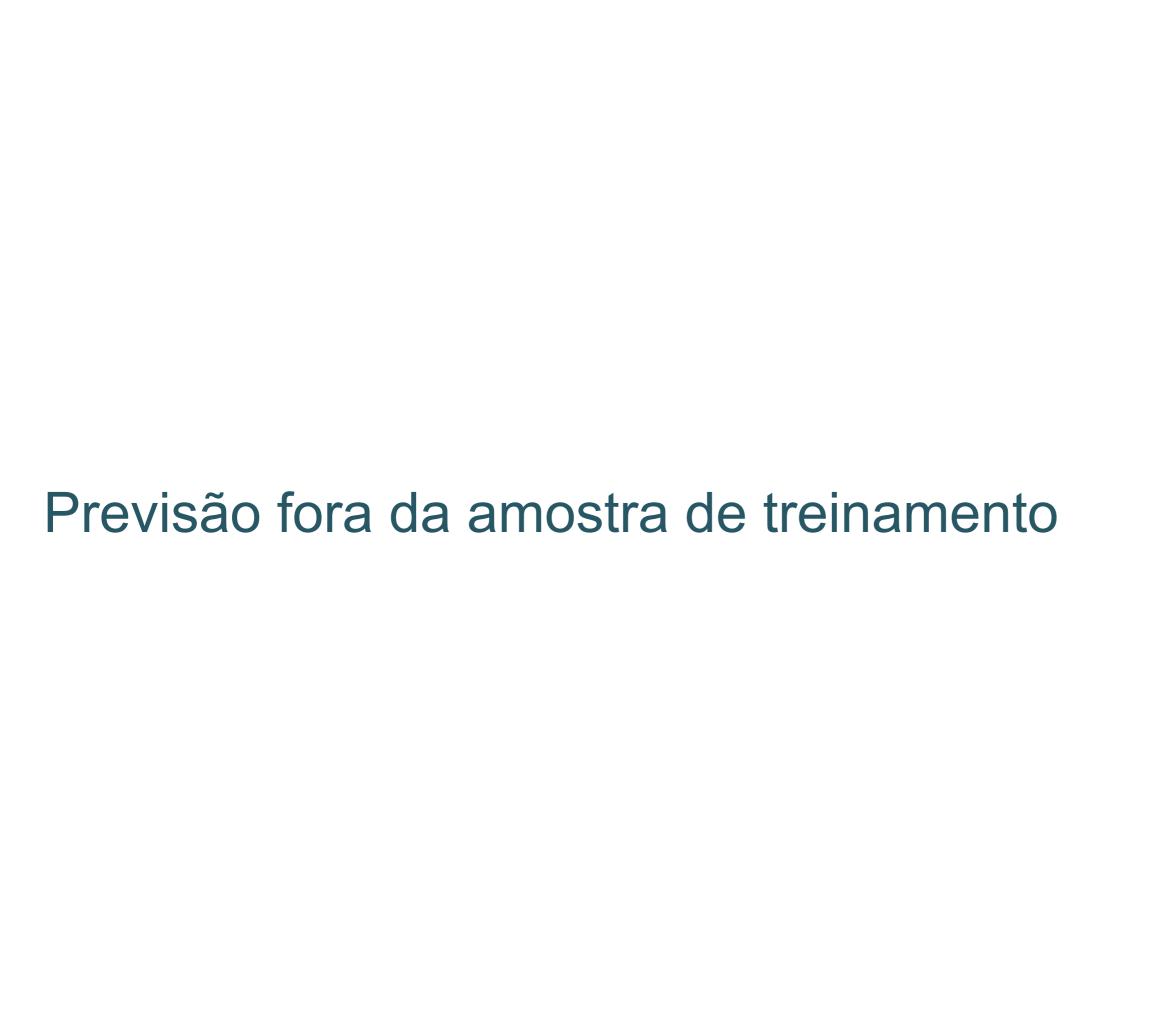
$$R_g = \sum_{j=1}^{M} (y_{N+j} - \hat{g}(\mathbf{x}_{N+j}))^2$$

Dados de teste

- Pode ser escolhido de forma aleatória dentre todos os dados observados.
- Pode-se definir por exemplo 70% dos dados para treinamento e 30% para teste.
- Validação cruzada (leave-one-out):

$$R_g = \sum_{i=1}^{N+M} (y_i - \hat{g}_{-i}(\mathbf{x_i}))^2,$$

onde g_{-i} foi estimada usando todos os dados menos a i-ésima observação.



Previsão no caso de regressão múltipla

Vimos que no caso de regressão simples um valor predito é dado por

$$\hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0.$$

Vimos também que extrapolação pode ser perigoso.

Por exemplo, o comportamento fora do intervalo de x's observados pode ser muito diferente de uma reta!

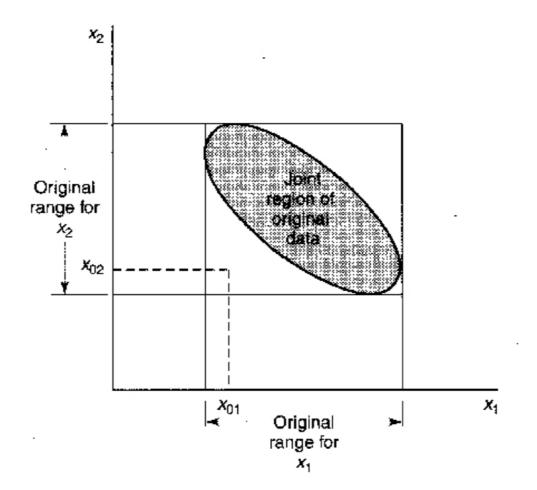
Se a previsão é feita fora do intervalo (min(x), max(x)) chamamos extrapolação.

No caso de regressão múltipla, temos **X1, X2,..., Xk**.

Como saber se estamos extrapolando?

Região de previsão

- Em regressão múltipla é difícil saber se x_0 está ou não dentro do domínio dos x's observados ou se trata-se de uma extrapolação.
- Testar cada componente x_{0j} não é suficiente!



Região de previsão

Considere a matriz $H = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$.

 $h_{max} = max\{h_{ii}\}$ está no limite da região do domínio observado de X.

Portanto, para verificar se x_0 está dentro da região de previsão basta verificar se

$$h_{00} = x_0'(\mathbf{XX})^{-1}x_0 < h_{max}.$$

Caso contrário temos uma extrapolação!

Prevendo para um novo valor de $x = x_0$

Mas temos uma extrapolação???

```
XX = cbind(rep(1,16),X[,-1])
max(hatvalues(ajuste2)) #### 0.3384269
t(X0)%*%solve(t(XX)%*%XX)%*%X0 #### 4.66992
```



Exemplo: nem sempre o modelo correto tem o melhor poder preditivo

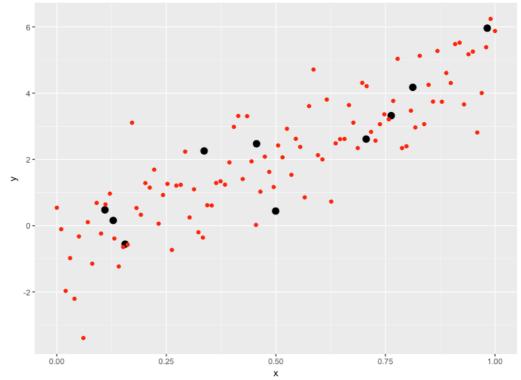
• Considere o modelo de regressão polinomial

(i)
$$y = x^t \beta + \epsilon$$
;

(ii)
$$\beta = (0, 3, 2, 0.2, 0.1, 0.1)$$
 e $x = (1, x, x^2, \dots, x^5)$;

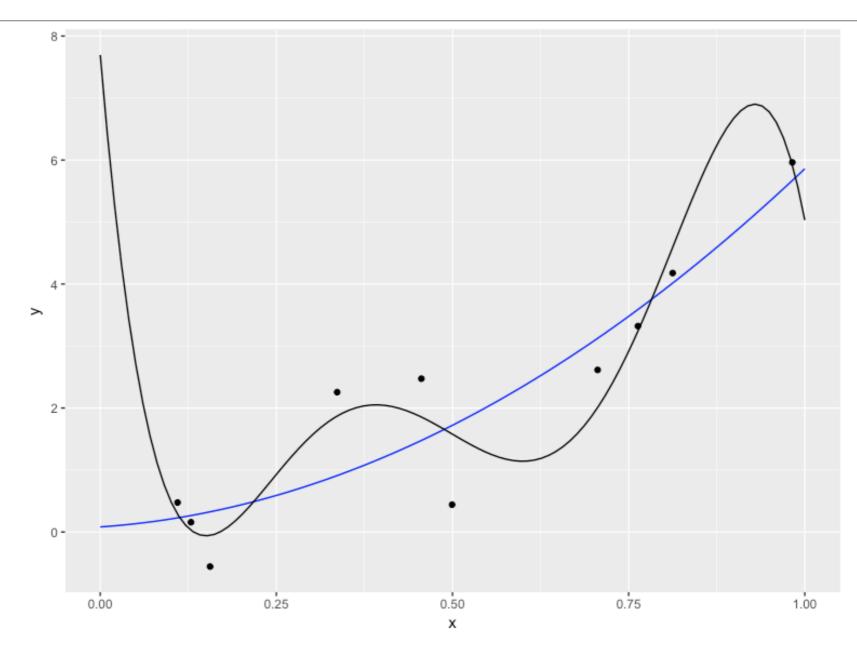
(iii)
$$\epsilon \sim N(0,1)$$
.

• Vamos ajustar um modelo polinomial de ordem 2 e o modelo correto de ordem 5.



Neste exemplo, temos 10 pontos de treinamento e 100 pontos de teste.

Exemplo: nem sempre o modelo correto tem o melhor poder preditivo



 Para 100 pontos de teste o erro quadrático médio do modelo de ordem 2 é 111 enquanto para o modelo de ordem 5 é 437.

Seleção de variáveis

Métodos forward, backward e stepwise

- O número de modelos possíveis no modelo de regressão quando temos p covariáveis é 2^p .
- Quando p cresce é inviável selecionar variáveis apenas olhando para análises descritivas ou ajustando todos os modelos. E.g. $2^{10} = 1024$.
- Método forward, backward e stepwise: algoritmos sequenciais nos quais uma variável por vez é introduzida no modelo.
 - A variável é escolhida dependendo de algum critério de ajuste.
 - O número de modelos testados neste algoritmo é 1 + p(p+1)/2.

Ideia dos algoritmos

- Seleção Forward: começa com nenhum preditor; sequencialmente adiciona o preditor mais importante no modelo; parada quando não há melhora na medida de interesse.
- Seleção Backward: começa com todos os preditores no modelo e sequencialmente remove o preditor que menos contribui para o modelo; parada quando todos os preditores do modelo são significativos.
- Seleção stepwise: combina seleção forward com backward; começa com nenhum preditor; sequencialmente adicional o preditor que mais contribui para o modelo; após incluir uma variável ele remove variáveis que possivelmente não são mais necessárias no modelo.

- Vamos analisar o banco de dados marketing do pacote datarium.
- A base contém o impacto nas vendas do gasto com 3 tipos de propagandas: youtube, facebook e jornal. Dimensão: 200 por 3.
- Objetivo do ajuste: medir o impacto do gasto nas vendas.
- Vamos dividir os dados em treinamento e teste.

```
youtube facebook newspaper sales
1 276.12 45.36 83.04 26.52
2 53.40 47.16 54.12 12.48
3 20.64 55.08 83.16 11.16
4 181.80 49.56 70.20 22.20
```

```
set.seed(123)
training.samples <- marketing$sales %>%
  createDataPartition(p = 0.8, list = FALSE)
train.data <- marketing[training.samples, ]
test.data <- marketing[-training.samples, ]</pre>
```

Modelo para todas as variáveis.

```
Model1 <- lm(sales ~ youtube + facebook + newspaper, data = train.data)
summary(model)</pre>
```

Modelo sem newspaper.

```
Model2 <- lm(sales ~ youtube + facebook, data = train.data)
summary(model2)</pre>
```

Erro preditivo:

```
predictions <- model1 %>% predict(test.data)
RMSE(predictions, test.data$sales)
1.590096
predictions <- model2 %>% predict(test.data)
RMSE(predictions, test.data$sales)
1.57911
```

Podemos melhorar o modelo para previsão? Vamos considerar o modelo com interações.

```
model.full <- lm(sales ~ youtube * facebook * newspaper, data = train.data)
summary(model.full)</pre>
```

```
Coefficients:
                           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)
                          7.269e+00 6.552e-01 11.094 < 2e-16 ***
                           2.136e-02 3.044e-03 7.015 6.81e-11 ***
youtube
facebook
                          2.571e-02 1.861e-02
                                               1.381
                                                         0.169
                          2.617e-02 1.961e-02 1.334
                                                         0.184
newspaper
                          9.526e-04 9.089e-05 10.481 < 2e-16 ***
youtube:facebook
                          -8.706e-05 8.555e-05 -1.018
                                                         0.310
youtube:newspaper
                                                         0.634
facebook:newspaper
                          -2.132e-04 4.473e-04 -0.477
                                                         0.889
youtube:facebook:newspaper 2.865e-07 2.050e-06
                                                0.140
```

RMSE(predictions, test.data\$sales)
1.020196

Erro preditivo do modelo com interações:

```
predictions <- model.full %>% predict(test.data)
RMSE(predictions, test.data$sales)
1.020196
```

 Esse modelo tem todas as variáveis e interações. Podemos ajustar um modelo mais simples?

```
step.model2 <- stepAIC(model.full, direction = "both", trace = FALSE)
summary(step.model2)
predictions <- step.model2 %>% predict(test.data)
RMSE(predictions, test.data$sales)
1.007243
```

```
Coefficients:
                   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)
                 7.526e+00 3.608e-01 20.860
                                               <2e-16 ***
voutube
                 2.099e-02 1.773e-03 11.838
                                               <2e-16 ***
facebook
                 1.867e-02 1.075e-02 1.736
                                               0.0845 .
                 1.747e-02 7.368e-03 2.371
newspaper
                                               0.0190 *
youtube:facebook 9.579e-04 5.211e-05 18.382
                                               <2e-16 ***
youtube:newspaper -7.101e-05 3.306e-05 -2.148
                                               0.0333 *
```

Caminho do método stepwise:

step.model2\$anova

Transformação da variável resposta

Suponha que desejamos transformar a variável y para obter variância constante.

Porém não sabemos qual transformação usar.

O método de Box-Cox transforma y para $g_{\lambda}(y)$ onde

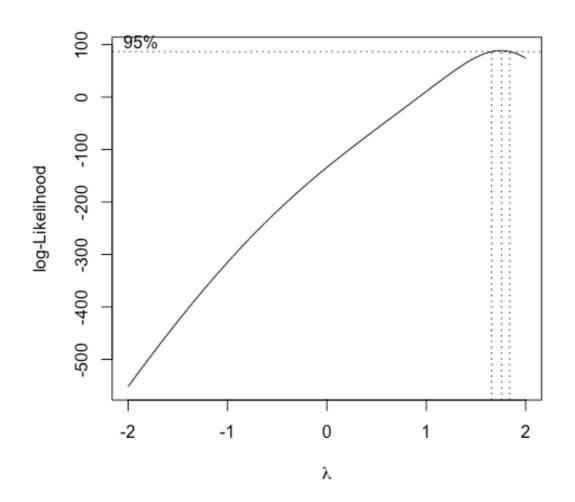
$$g_{\lambda}(y) = \begin{cases} \frac{y^{\lambda} - 1}{\lambda} & se \ \lambda \neq 0 \\ log(y) & se \ \lambda = 0 \end{cases}$$

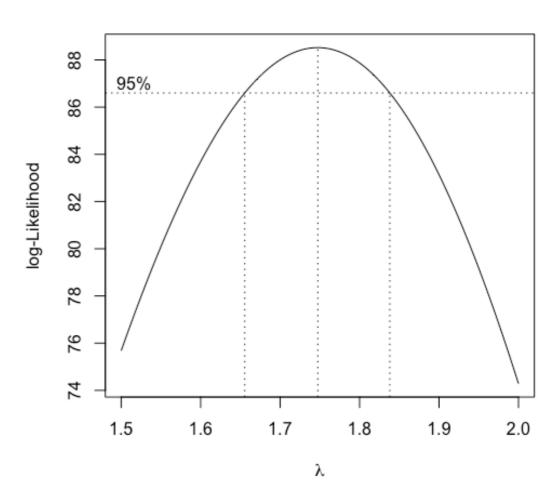
Para $y>0,\ g$ é contínua em $\lambda.$ Podemos usar máxima verossimilança para estimar $\lambda.$

No R: usar a função boxcox(ajuste) da biblioteca MASS.

Exemplo: sales

```
library(MASS)
boxcox(model.full)
transf.y = boxcox(model.full,lambda = seq(1.5, 2, 1/20)) ### refinando a busca
```





Exemplo: preço de venda

lambda0 = transf.y\$x[transf.y\$y==max(transf.y\$y)] train.data\$salesnew = train.data\$sales^lambda0 model.full2 <- lm(salesnew ~ youtube*facebook*newspaper, data = train.data) summary(model.full) summary(model.full2) Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) 3.745e+01 5.485e+00 6.828 1.87e-10 *** Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) 1.441e-01 2.548e-02 5.654 7.42e-08 *** (Intercept) 7.269e+00 6.552e-01 11.094 < 2e-16 *** youtube 2.136e-02 3.044e-03 7.015 6.81e-11 *** youtube facebook -1.688e-01 1.558e-01 -1.084 0.280 2.571e-02 1.861e-02 1.381 facebook 0.169 newspaper 5.196e-02 1.642e-01 0.316 0.752 2.617e-02 1.961e-02 1.334 0.184 newspaper youtube:facebook 1.809e-02 7.609e-04 23.777 < 2e-16 *** youtube:facebook 9.526e-04 9.089e-05 10.481 < 2e-16 *** youtube:newspaper -1.885e-04 7.162e-04 -0.263 0.793 youtube:newspaper -8.706e-05 8.555e-05 -1.018 0.310 facebook:newspaper 1.316e-03 3.744e-03 0.351 0.726 0.634 facebook:newspaper -2.132e-04 4.473e-04 -0.477 youtube:facebook:newspaper -2.995e-06 1.716e-05 -0.175 0.862 youtube:facebook:newspaper 2.865e-07 2.050e-06 0.140 0.889 Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1 Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1 Residual standard error: 9.772 on 154 degrees of freedom Residual standard error: 1.167 on 154 degrees of freedom Adjusted R-squared: 0.9896 Multiple R-squared: 0.9901, Multiple R-squared: 0.9675, Adjusted R-squared: 0.966 F-statistic: 2191 on 7 and 154 DF, p-value: < 2.2e-16 F-statistic: 654.9 on 7 and 154 DF, p-value: < 2.2e-16