

Regularização em MLGs

Carlos de Moura

2025-12-01

Índice

| | |
|--|-----------|
| Sobre | 3 |
| 1 Regularização | 4 |
| 1.1 Seleção de variáveis naïve | 4 |
| 1.2 Ridge | 4 |
| 1.3 Lasso | 8 |
| 1.4 Comparação das técnicas | 8 |
| 1.5 Elastic net | 8 |
| 1.6 Lidando com outliers | 8 |
| 2 Estimação | 10 |
| 3 Tunagem | 11 |
| 4 Exemplo prático | 12 |
| References | 13 |

Sobre

“Eu tô te explicando Pra te confundir Eu tô te confundindo Pra te esclarecer” Tom Zé

Este é o [material auxiliar](#) da apresentação do trabalho final do curso de Modelos Lineares Generalizados (MLGs) (DEST-UFMG, 2025/2). O tema é regularização em MLGs, em específico os métodos de regularização ridge, lasso e elastic net e este [quarto book](#) está dividido da seguinte forma:

- Definição de regularização e apresentação dos métodos de shrinkage, com exemplos de regressão normal;
- Estimação dos parâmetros em MLG com penalização;
- Tunagem dos parâmetros de regularização;
- Exemplo prático com dados reais no R.

Referências bibliográficas importantes que foram usadas para a feitura desse trabalho são citadas ao final do documento.

Alguns pacotes que usaremos estão abaixo listados.

```
if (!{"pak" %in% rownames(installed.packages())}) install.packages("pak")  
  
pak::pak(c("matrixcalc", "glmnet"))
```

1 Regularização

1.1 Seleção de variáveis naïve

Stepwise

1.2 Ridge

A técnica Ridge foi a primeira das três técnicas a surgir, no trabalho de Hoerl & Kennard (1970). Originalmente, os autores buscavam entender como superar problemas em que a matriz de covariáveis X estava mal-especificada. Relembrando que na regressão linear normal, temos que

$$Y = X\beta + \epsilon, \quad \epsilon \sim N_n(0, \sigma^2 I_n)$$

O estimador de máxima verossimilhança (EMV) de β será o mesmo estimador de mínimos quadrados (EMQ)

$$\hat{\beta} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y,$$

se:

- $X^\top X$ for inversível;
- A matriz de covariáveis é ortogonalizável, i.e., os dados foram coletados de maneira independente;
- há menos betas que observações, isto é `ncol(X) < nrow(X)`.

Além disso, $\hat{\beta}$ é não viciado, consistente e tem matriz de covariâncias dada por

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X^\top X)^{-1}.$$

Uma vez que temos a distribuição do estimador, fica fácil fazer inferência via intervalos de confiança, por exemplo.

$$\hat{\beta} \sim N_p(\beta, \sigma^2(X^\top X)^{-1}).$$

Nesse sentido, se temos uma matriz de dados problemática - no sentido em que $(X^\top X)^{-1}$ não está bem definida, teremos problema de estimação via EMQ.

Veja o exemplo numérico abaixo.

```
set.seed(12345)

n = 10
beta = c(1, 0)
X = cbind(1:n, 2*(1:n))
Y = X %*% beta + rnorm(n)
```

Ver matriz X

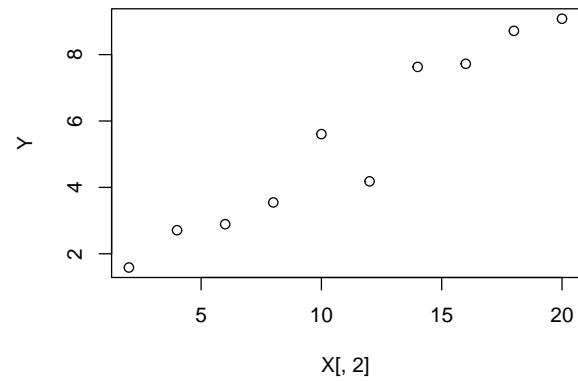
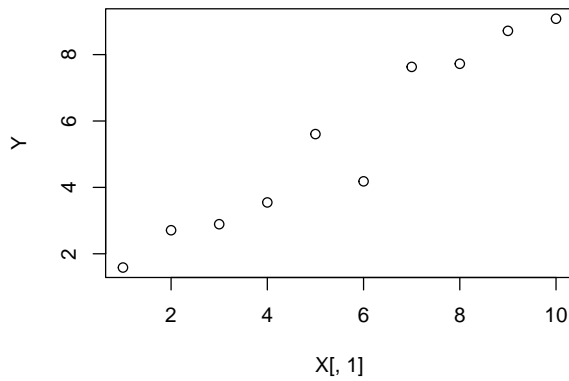
```
head(X)
```

```
      [,1] [,2]
[1,]     1     2
[2,]     2     4
[3,]     3     6
[4,]     4     8
[5,]     5    10
[6,]     6    12
```

```
matrixcalc::is.singular.matrix(t(X)%*%X)
```

```
[1] TRUE
```

```
par(mfrow=c(1,2))
plot(Y~X[,1])
plot(Y~X[,2])
```



```
lm(Y~0+X)
```

Call:

```
lm(formula = Y ~ 0 + X)
```

Coefficients:

| X1 | X2 |
|--------|----|
| 0.9544 | NA |

E se a regressão estivesse na outra covariável?

```
set.seed(12345)
```

```
beta = c(0, 1)
```

```
X = cbind(1:n, 2*(1:n))
```

```
Y = X %*% beta + rnorm(n)
```

```
lm(Y~0+X)
```

Call:

```
lm(formula = Y ~ 0 + X)
```

Coefficients:

| X1 | X2 |
|-------|----|
| 1.954 | NA |

Detalhes

Comentários sobre o modelo não saber selecionar variáveis.

```
set.seed(12345)

beta = c(1, 0)
X = cbind(1:n, 2*(1:n))
ruído = cbind(rep(0,n), rnorm(n,0,.1))
X = X + ruído
Y = X %*% beta + rnorm(n)
```

Ver matriz X

```
head(X)
```

| | [,1] | [,2] |
|------|------|-----------|
| [1,] | 1 | 2.058553 |
| [2,] | 2 | 4.070947 |
| [3,] | 3 | 5.989070 |
| [4,] | 4 | 7.954650 |
| [5,] | 5 | 10.060589 |
| [6,] | 6 | 11.818204 |

```
matrixcalc::is.singular.matrix(t(X)%*%X)
```

```
[1] FALSE
```

```
lm(Y~0+X)
```

Call:

```
lm(formula = Y ~ 0 + X)
```

Coefficients:

| X1 | X2 |
|-------|--------|
| 6.658 | -2.820 |

Comentários sobre combinações lineares, parcimônia e inflação da variância na inferência.

A proposta de Hoerl & Kennard (1970)

1.3 Lasso

A regressão lasso surgiu com o artigo de Tibshirani (1996).

1.4 Comparação das técnicas

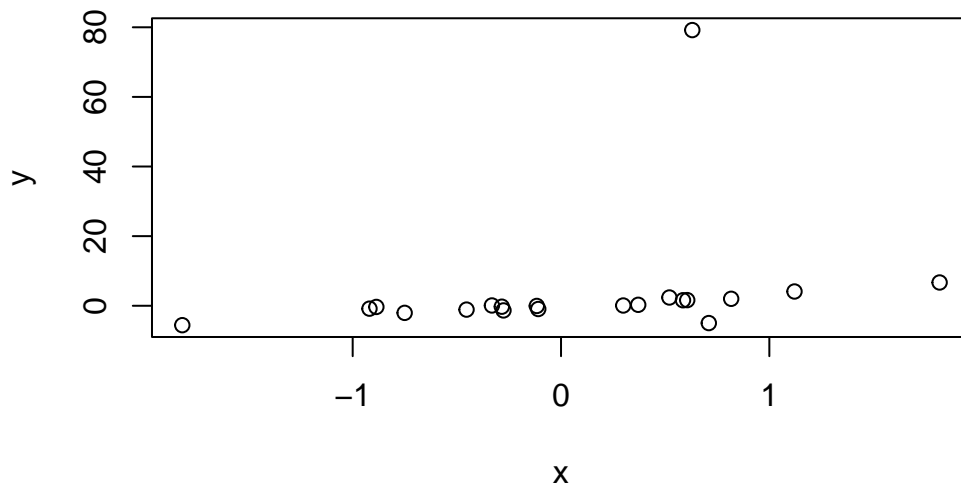
“You Can’t Always Get What You Want”

1.5 Elastic net

O artigo Zou & Hastie (2005) introduz o elastic net, que nada mais é que uma mistura das técnicas ridge e lasso.

1.6 Lidando com outliers

```
set.seed(12345); x = rnorm(20); e = rt(20, 1); y = 2*x + e; plot(y~x); lm(y~0+x)
```



Call:
lm(formula = y ~ 0 + x)

Coefficients:

^x
6.136

2 Estimação

“Se isto for possível, Pois, me contem, Como escrever de novo, Um jornal de ontem” Tom Zé
FS vs shrinkage

1+ 1

[1] 2

3 Tunagem

Validação cruzada

1

[1] 1

4 Exemplo prático

Esparsidade, multicolinearidade e outliers

1

[1] 1

References

- Friedman, J., Hastie, T., Tibshirani, R., et al. (2025). *glmnet: Lasso and Elastic-Net Regularized Generalized Linear Models*. Stanford University. Obtido de <https://glmnet.stanford.edu/>
- Hoerl, A. E., & Kennard, R. W. (1970). Ridge Regression: Biased Estimation for Nonorthogonal Problems. *Technometrics*, 12(1), 55–67. Obtido de <https://www.jstor.org/stable/1267351>
- James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2021). *An Introduction to Statistical Learning: With Applications in R*. Springer Texts em Statistics. Springer. Obtido de <https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-0716-1418-1>
- Kuhn, M., & Silge, J. (2022). *Tidy Modeling with R*. O'Reilly Media. Obtido de <https://www.tmwr.org/>
- R Core Team. (2024). *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing. Obtido de <https://www.r-project.org/>
- Tibshirani, R. (1996). Regression Shrinkage and Selection via the Lasso. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 58(1), 267–288. Obtido de <https://www.jstor.org/stable/2346178>
- Zou, H., & Hastie, T. (2005). Regularization and Variable Selection via the Elastic Net. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Statistical Methodology)*, 67(2), 301–320. Obtido de <https://www.jstor.org/stable/3647580>