Temperatura Crítica de Superconductores

¿Es suficiente una regresión múltiple?

Grupo A - Estadística

Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Matemáticas
EYP2307 - Análisis de Regresión

1 de Diciembre de 2020

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

Recursos Utilizados

1. Usamos RStudio.
2. R Markdown y R Sweave.
3. GitHub.
4. Bases de datos.
   - `train.csv`
   - `unique_m.csv`

Resumen del Avance 1

- El objetivo era predecir la Temperatura Crítica de los Superconductores, con un modelo de regresión lineal simple.
- Se limpió la base de datos: de **169** variables se pasaron a **34**.
- Se hizo un modelo de regresión simple con la variable `std_ThermalConductivity`, ya que es modelo con mejor R^2 respecto `critical_temp` ($R^2 = \mathbf{0.43}$).

Resumen del Avance 1

- Buscamos alternativas para mejorar el R^2.
- Se crearon **7** bases de datos según `range_Valence`, ya que es la variable categórica que mejores correlaciones nos da.
- Finalmente obtuvimos **7** modelos para predecir la variable respuesta, con un R^2 conjunto igual a **0.56**.

Objetivo del Avance **2**

- Predecir la temperatura crítica de los superconductores en base a nuestra variable respuesta, aplicando nuevas herramientas para mejorar los resultados obtenidos en el Avance **1**.

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.
  4. `add1`.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.
  4. `add1`.
  5. `drop1`.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.
  4. `add1`.
  5. `drop1`.
  6. *VIF*.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.
  4. `add1`.
  5. `drop1`.
  6. *VIF*.
  7. Modelo con la idea del Avance **1**.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.
  4. `add1`.
  5. `drop1`.
  6. *VIF*.
  7. Modelo con la idea del Avance **1**.
  8. *Ridge Regression*.

Nuevos modelos

- Creamos una serie de nuevos modelos de regresión lineal múltiple:
  1. *Backward*.
  2. *Forward*.
  3. *Backward-Forward*.
  4. `add1`.
  5. `drop1`.
  6. *VIF*.
  7. Modelo con la idea del Avance **1**.
  8. *Ridge Regression*.
  9. *Lasso Regression*.

Nuevos modelos

- Se utilizó la base de datos limpiada en el Avance **1** para trabajar solo con **34** variables.

Nuevos modelos

- Se utilizó la base de datos limpiada en el Avance **1** para trabajar solo con **34** variables.
- Se solucionó el problema de multicolinearidad en cada modelo viendo el *VIF* (Excepto en *Ridge* y *Lasso Regression*).

Nuevos modelos

- Se utilizó la base de datos limpiada en el Avance **1** para trabajar solo con **34** variables.
- Se solucionó el problema de multicolinearidad en cada modelo viendo el *VIF* (Excepto en *Ridge* y *Lasso Regression*).
- En todos los modelos se usó criterio AIC (excepto en Modelo con VIF).

Modelo con *Backward*

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **2** variables eliminadas.

Modelo con *Backward*

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **2** variables eliminadas.
- Modelo conformado finalmente por **27** β's.

Modelo con *Forward*

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **4** variables eliminadas.

Modelo con *Forward*

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **4** variables eliminadas.
- Modelo conformado finalmente por **28** β's.

Modelo con *Backward-Forward*

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **2** variables eliminadas.

Modelo con *Backward-Forward*

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **2** variables eliminadas.
- Modelo conformado finalmente por **27** β's.

Modelo con add1

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **3** variables eliminadas.

Modelo con add1

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **3** variables eliminadas.
- Modelo conformado finalmente por **28** β's.

Modelo con drop1

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **1** variable eliminada.

Modelo con `drop1`

- Multicolinearidad $\rightarrow$ **1** variable eliminada.
- Modelo conformado finalmente por **25** β's.

Modelo con *VIF*

- Se consideró el modelo conformado por todas las variables de la base de datos.

Modelo con *VIF*

- Se consideró el modelo conformado por todas las variables de la base de datos.
- Se fue eliminando el problema de multicolinearidad progresivamente.

Modelo con *VIF*

- Se consideró el modelo conformado por todas las variables de la base de datos.
- Se fue eliminando el problema de multicolinearidad progresivamente.
- Modelo conformado finalmente por **28** variables.

Modelo con la idea del Avance **1**

- Se crearon **7** bases de datos según `range_Valence`.

Modelo con la idea del Avance **1**

- Se crearon **7** bases de datos según `range_Valence`.
- Se creó un modelo para cada base de datos mediante selección *Backward*.

Modelo con la idea del Avance 1

- Se crearon **7** bases de datos según `range_Valence`.
- Se creó un modelo para cada base de datos mediante selección *Backward*.
- Cantidad de variables:
  1. Modelo para `range_Valence` = 0: **25** variables.
  2. Modelo para `range_Valence` = 1: **23** variables.
  3. Modelo para `range_Valence` = 2: **24** variables.
  4. Modelo para `range_Valence` = 3: **25** variables.
  5. Modelo para `range_Valence` = 4: **22** variables.
  6. Modelo para `range_Valence` = 5: **19** variables.
  7. Modelo para `range_Valence` = 6: **27** variables.

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

AIC, BIC y R^2 de los modelos.

Modelo	AIC	BIC	R^2
Backward	126489.9	127064.9	0.66
Forward	126880.5	127103.5	0.66
Backward-Forward	126849.9	127064.9	0.66
`add1`	126858.4	127081.4	0.66
`drop1`	126849.6	127048.7	0.66
VIF	126880.5	127103.5	0.66
Idea Avance 1	121021.6	121840.3	0.74

Modelo Elegido: *Backward*

Gráfica reales vs ajustados.

Analisis de Puntos

- abc

Supuesto de *Independencia*

- Se utilizó el Test de *Durbin-Watson*.

Supuesto de *Independencia*

- Se utilizó el Test de *Durbin-Watson*.
- Independencia de residuos $\Leftrightarrow$ Valor D entre **1.5** y **2.5**.

Supuesto de *Independencia*

- Se utilizó el Test de *Durbin-Watson*.
- Independencia de residuos $\Leftrightarrow$ Valor D entre **1.5** y **2.5**.
- Valor D = **0.89** $\rightarrow$ No se cumple el supuesto.

Supuesto de *Normalidad*

- Se utilizó el Test de *Kolmogorov-Smirnov*.

Supuesto de *Normalidad*

- Se utilizó el Test de *Kolmogorov-Smirnov*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.

Supuesto de *Normalidad*

- Se utilizó el Test de *Kolmogorov-Smirnov*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.
- El modelo no cumple con este supuesto.

Supuesto de *Normalidad*

- Se utilizó el Test de *Kolmogorov-Smirnov*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.
- El modelo no cumple con este supuesto.
- *Primera solución aplicada*: Transformación de *Box-Cox*.

Supuesto de *Normalidad*

- Se utilizó el Test de *Kolmogorov-Smirnov*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.
- El modelo no cumple con este supuesto.
- *Primera solución aplicada*: Transformación de *Box-Cox*.
- *Segunda solución aplicada*: Transformación de *Johnson*.

Supuesto de *Normalidad*

- Se utilizó el Test de *Kolmogorov-Smirnov*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.
- El modelo no cumple con este supuesto.
- *Primera solución aplicada*: Transformación de *Box-Cox*.
- *Segunda solución aplicada*: Transformación de *Johnson*.
- No se lograron resultados satisfactorios.

Supuesto de *Homocedasticidad*

- Se utilizó el Test de *Breusch-Pagan*.

Supuesto de *Homocedasticidad*

- Se utilizó el Test de *Breusch-Pagan*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.

Supuesto de *Homocedasticidad*

- Se utilizó el Test de *Breusch-Pagan*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.
- El modelo no cumple con este supuesto.

Supuesto de *Homocedasticidad*

- Se utilizó el Test de *Breusch-Pagan*.
- Criterio: valor-p $>$ **0.05**.
- El modelo no cumple con este supuesto.
- Solución propuesta para Heterocedasticidad:

Weighted Least Squares Regression.

Weighted Least Squares Regression

- Caso especial de *Mínimos Cuadrados Generalizados*.

Weighted Least Squares Regression

- Caso especial de *Mínimos Cuadrados Generalizados*.
- Se puede utilizar cuando hay Heterocedasticidad.

Weighted Least Squares Regression

- Caso especial de *Mínimos Cuadrados Generalizados*.
- Se puede utilizar cuando hay Heterocedasticidad.
- Solución del sistema

$$(X^\top W X)\hat{\beta} = X^\top W y.$$

W : Matriz diagonal de ponderaciones.

Weighted Least Squares Regression: Elección de *W*

- Ver gráfica de

  |Residuos Estandarizados| vs. Valores Ajustados.

Weighted Least Squares Regression: Elección de *W*

- Ver gráfica de

  $|$Residuos Estandarizados$|$ vs. Valores Ajustados.

- Ensayo y error.

Weighted Least Squares Regression: Elección de *W*

- Ver gráfica de

  $|$Residuos Estandarizados$|$ vs. Valores Ajustados.

- Ensayo y error.
- Veamos la gráfica en nuestro caso.

|Residuos Estandarizados| vs. Valores Ajustados

- abc

Resultados del modelo

- Modelo con 9 variables.

Resultados del modelo

- Modelo con 9 variables.
- $R^2 = \mathbf{0.96}$.

Resultados del modelo

- Modelo con 9 variables.
- $R^2 = \mathbf{0.96}$.
- $AIC = -\mathbf{76455.66}$.

Resultados del modelo

- Modelo con 9 variables.
- $R^2 = \mathbf{0.96}$.
- $AIC = -\mathbf{76455.66}$.
- Nos sorprendieron estos resultados.

Resultados del modelo

- Modelo con 9 variables.
- $R^2 = \mathbf{0.96}$.
- $AIC = -\mathbf{76455.66}$.
- Nos sorprendieron estos resultados.
- Veamos algunas gráficas.

|Residuos Estandarizados| vs. Valores Ajustados

- abc

Valores Reales vs. Valores Ajustados

- abc

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

Ridge Regression

- **Objetivo:** Minimizar **RSS**.

Ridge Regression

- **Objetivo:** Minimizar **RSS**.
- *Shrinkage Penalty* : $RSS_{\text{Ridge}} = RSS_{\text{AMC}} + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2$.
  - $\lambda = \mathbf{0}$: $RSS_{\text{Ridge}} = RSS_{\text{AMC}}$.
  - $\lambda \geq \mathbf{0}$: Impacto en valores de β.
  - $\lambda \to \infty$: $\beta \to \vec{\mathbf{0}}$.

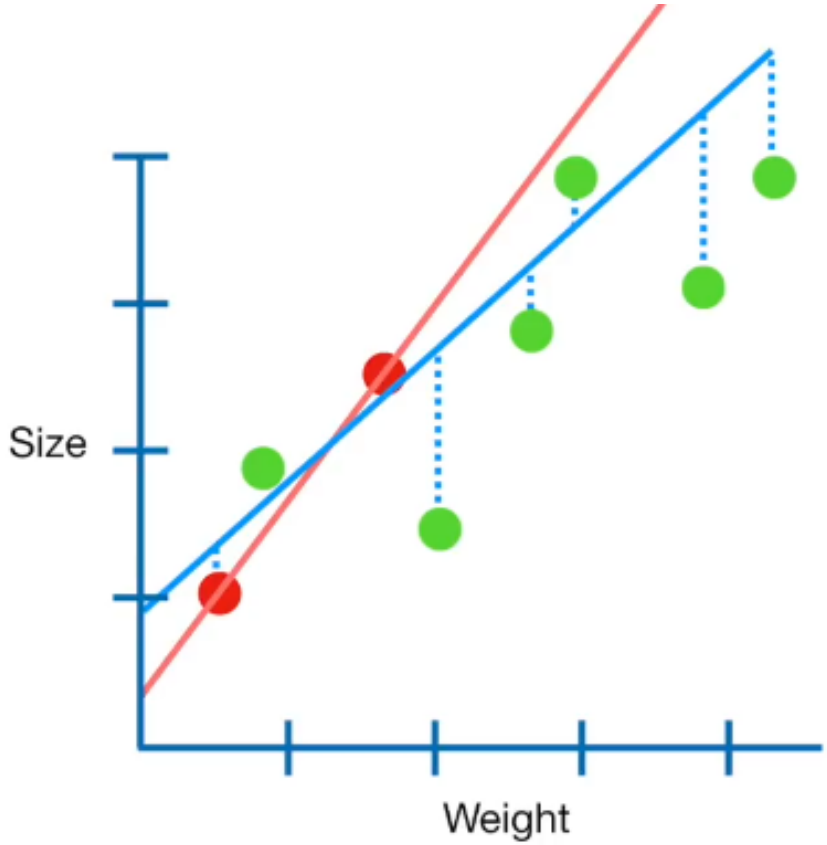
Ridge Regression: λ óptimo

- Es aquel que reduce la mayor varianza del modelo sin apenas perder ajuste.

Ridge Regression: λ óptimo

- Es aquel que reduce la mayor varianza del modelo sin apenas perder ajuste.
- *Validación cruzada*.

Ridge Regression: Visualización



Ridge Regression: Ventajas

- Reduce la varianza.

Ridge Regression: Ventajas

- Reduce la varianza.
- Datos de Entrenamiento vs. Datos de Prueba.

Ridge Regression: Ventajas

- Reduce la varianza.
- Datos de Entrenamiento vs. Datos de Prueba.
- Minimiza la influencia sobre el modelo de los predictores menos relacionados con la variable respuesta.

Ridge Regression: Limitación

- Modelo final incluye todos los predictores.

Lasso Regression

- Misma idea que en *Ridge Regression*.

Lasso Regression

- Misma idea que en *Ridge Regression*.
- Realiza selección de predictores.

Lasso Regression

- Misma idea que en *Ridge Regression*.
- Realiza selección de predictores.
- *Shrinkage Penalty* : $RSS_{\text{Lasso}} = RSS_{\text{AMC}} + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$.

Comparación entre *Ridge* y *Lasso Regression*

- Usamos uno u otro dependiendo del escenario.

Comparación entre *Ridge* y *Lasso Regression*

- Usamos uno u otro dependiendo del escenario.
- *Ridge Regression*: cuando los $\beta's \neq \mathbf{0}$ y tienen la misma magnitud aproximadamente.

Comparación entre *Ridge* y *Lasso Regression*

- Usamos uno u otro dependiendo del escenario.
- *Ridge Regression*: cuando los $\beta's \neq \mathbf{0}$ y tienen la misma magnitud aproximadamente.
- *Lasso Regression*: cuando un gran grupo de parámetros $\approx \mathbf{0}$.

Resultados de la implementación en R

- Se usó el package `glmnet`.

Resultados de la implementación en R

- Se usó el package `glmnet`.
- Se usó la misma fórmula que el modelo resultante con *Backward* en *Ridge* Regression.

Resultados de la implementación en R

- Se usó el package `glmnet`.
- Se usó la misma fórmula que el modelo resultante con *Backward* en *Ridge* Regression.
- En *Lasso Regression* se consideró el modelo completo.

Resultados de la implementación en R

- El λ óptimo en los modelos nos dió:

Resultados de la implementación en R

- El λ óptimo en los modelos nos dió:
  - *Ridge Regression*: **0.01**.
  - *Lasso Regression*: **0.05**.

Resultados de la implementación en R

- El λ óptimo en los modelos nos dió:
  - *Ridge Regression*: **0.01**.
  - *Lasso Regression*: **0.05**.
- Veamos algunos coeficientes importantes de los modelos.

Coeficientes de los modelos en orden creciente

Coeficiente	*Backward*	*Ridge*	*Lasso*
Intercepto	-48.2633	-46.8465	-44.4442
gmean_ThermalConductivity	-0.3338	-0.3301	-0.3171
⋮			
wtd_range_atomic_radius			0
⋮			
wtd_entropy_TConductivity	6.9492	6.7131	7.684503
Ba	9.3430	9.3538	10.6381

Comparación entre modelos

- La función que nos permite hacer *Ridge* y *Lasso Regression* no nos aporta información suficiente para calcular la *Log-Verosimilitud*.

Comparación entre modelos

- La función que nos permite hacer *Ridge* y *Lasso Regression* no nos aporta información suficiente para calcular la *Log-Verosimilitud*.
- Un criterio de comparación es el R^2 ajustado.

Comparación entre modelos

- La función que nos permite hacer *Ridge* y *Lasso Regression* no nos aporta información suficiente para calcular la *Log-Verosimilitud*.
- Un criterio de comparación es el R^2 ajustado.
- R^2:
  - *Backward*: **0.66**.
  - *Ridge Regression*: **0.66**.
  - *Lasso Regression*: **0.65**.

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

Conclusiones

- Sobre los nuevos modelos.

Conclusiones

- Sobre los nuevos modelos.
- Sobre el cumplimiento de los supuestos.

Conclusiones

- Sobre los nuevos modelos.
- Sobre el cumplimiento de los supuestos.
- *Weighted Least Squares Regression*

Conclusiones

- Sobre los nuevos modelos.
- Sobre el cumplimiento de los supuestos.
- *Weighted Least Squares Regression*
- *Ridge* y *Lasso Regression*.

Conclusiones

- Sobre los nuevos modelos.
- Sobre el cumplimiento de los supuestos.
- *Weighted Least Squares Regression*
- *Ridge* y *Lasso Regression*.
- Contraste con Avance **1**.

Conclusiones

- Sobre los nuevos modelos.
- Sobre el cumplimiento de los supuestos.
- *Weighted Least Squares Regression*
- *Ridge* y *Lasso Regression*.
- Contraste con Avance **1**.
- **¿Es suficiente una regresión múltiple?**

Contenido

Avance 1

Nuevos modelos

Elegimos modelo

Ridge y Lasso Regression

Conclusiones

Referencias bibliográficas

Referencias bibliográficas

- https://support.minitab.com/es-mx/minitab/18/help-and-how-to/modeling-statistics/regression/supporting-topics/basics/weighted-regression/

  Regresión ponderada.

- https://rpubs.com/Joaquin_AR/242707

  Selección de predictores: Ridge y Lasso.

  2016

- https://rstatisticsblog.com/data-science-in-action/machine-learning/ridge-regression-in-r/

  Simple Guide To Ridge Regression In R.

  2020