MBA EM **ENGENHARIA DE SOFTWARE**

Técnicas de Machine Learning

Prof. Dr. Wilson Tarantin Junior

MBA USP ESALQ

A responsabilidade pela idoneidade, originalidade
e licitude dos conteúdos didáticos apresentados é do professor.

MBA USP ESALQ

Machine learning

- Contextualização
  - Processamento dos dados por meio de algoritmos para a produção de informações
  - Aplica-se o machine learning com o intuito de **encontrar padrões nos dados**, seja criando modelos preditivos ou realizando análises exploratórias visando à busca de relações latentes
  - Envolve conhecimentos sobre estatística, softwares ou linguagem de programação e sobre o negócio
    - Frequentemente, o objetivo é a geração de informações úteis para fundamentar a tomada de decisão (*data-driven decision making*)

Banco de dados

- Definição e composição
  - O banco de dados armazena as informações de interesse para a análise em questão
  - Normalmente, o banco de dados contém uma amostra, ou seja, um subconjunto extraído da população
  - O banco de dados é composto por variáveis e por observações
    - **Observações**: unidades que têm suas características e atributos medidos
    - **Variáveis**: características/atributos observados, medidos ou categorizados

Banco de dados

- Bancos de dados sobre:
    - Pessoas
    - Países
    - Empresas
    - Tarefas
    - Produtos
    - Projetos
    - ...

Banco de dados

- Estrutura para uso

  - Para aplicação em machine learning, comumente o banco de dados é estruturado com as variáveis em colunas e as observações em linhas em uma **estrutura tabular**

ID	Idade	Profissão	Renda Mensal	Estado (UF)	Escolaridade	...
Pessoa 1						
Pessoa 2						
Pessoa 3						
Pessoa 4						
Pessoa 5						
Pessoa 6						
Pessoa 7						
Pessoa n						

Tipos de variáveis

- As variáveis podem ser divididas em:

  - **Métricas**: são as variáveis quantitativas, isto é, apresentam características que podem ser mensuradas ou contadas

  - **Não métricas**: são as variáveis qualitativas, indicam as características que não podem ser medidas. Tais variáveis contêm categorias, por isto, muitas vezes, são chamadas de variáveis categóricas

  - **A identificação do tipo de variável é fundamental para a escolha da técnica que será utilizada na análise dos dados**

Tipos de variáveis: exemplos ilustrativos

- Métricas
  - Idade – em anos
  - Renda mensal – em R$
  - Número de habitantes no município – contagem
  - Quantidade de pessoas na equipe – contagem

- Categóricas (qualitativas)
  - Nacionalidade
  - Grau de escolaridade
  - Escalas likert
  - Linguagem de programação do projeto

Variáveis qualitativas

- Características principais

  - As variáveis qualitativas têm sua representação feita por tabelas de frequências ou gráficos formados a partir delas

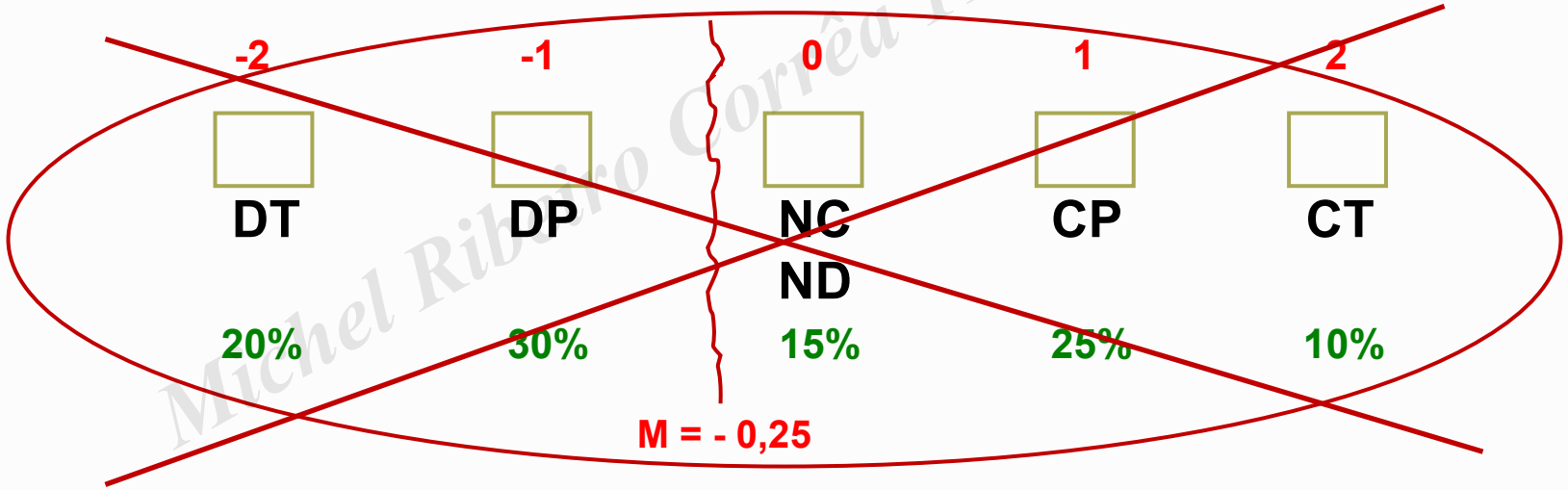
  - **Tabela de frequências**: apresenta as contagens observadas por categoria da variável

  - Não é possível obter medidas descritivas como média ou desvio padrão para variáveis qualitativas

Variáveis qualitativas

- Um **erro** comum no tratamento de variáveis qualitativas é realizar **ponderação arbitrária**

  - **Problema da ponderação arbitrária: gera resultados enviesados**



Ponderação Arbitrária !

Variáveis quantitativas

- Características principais

  - As variáveis quantitativas podem ser representadas por muitas ferramentas descritivas, como medidas de posição, dispersão e gráficos

  - A seguir, alguns exemplos comuns de estatísticas descritivas para variáveis métricas:

    - **Medidas de posição**: média, mediana, quartis
    - **Medidas de dispersão**: variância e desvio padrão

Modelos Lineares de Regressão Simples e Múltipla

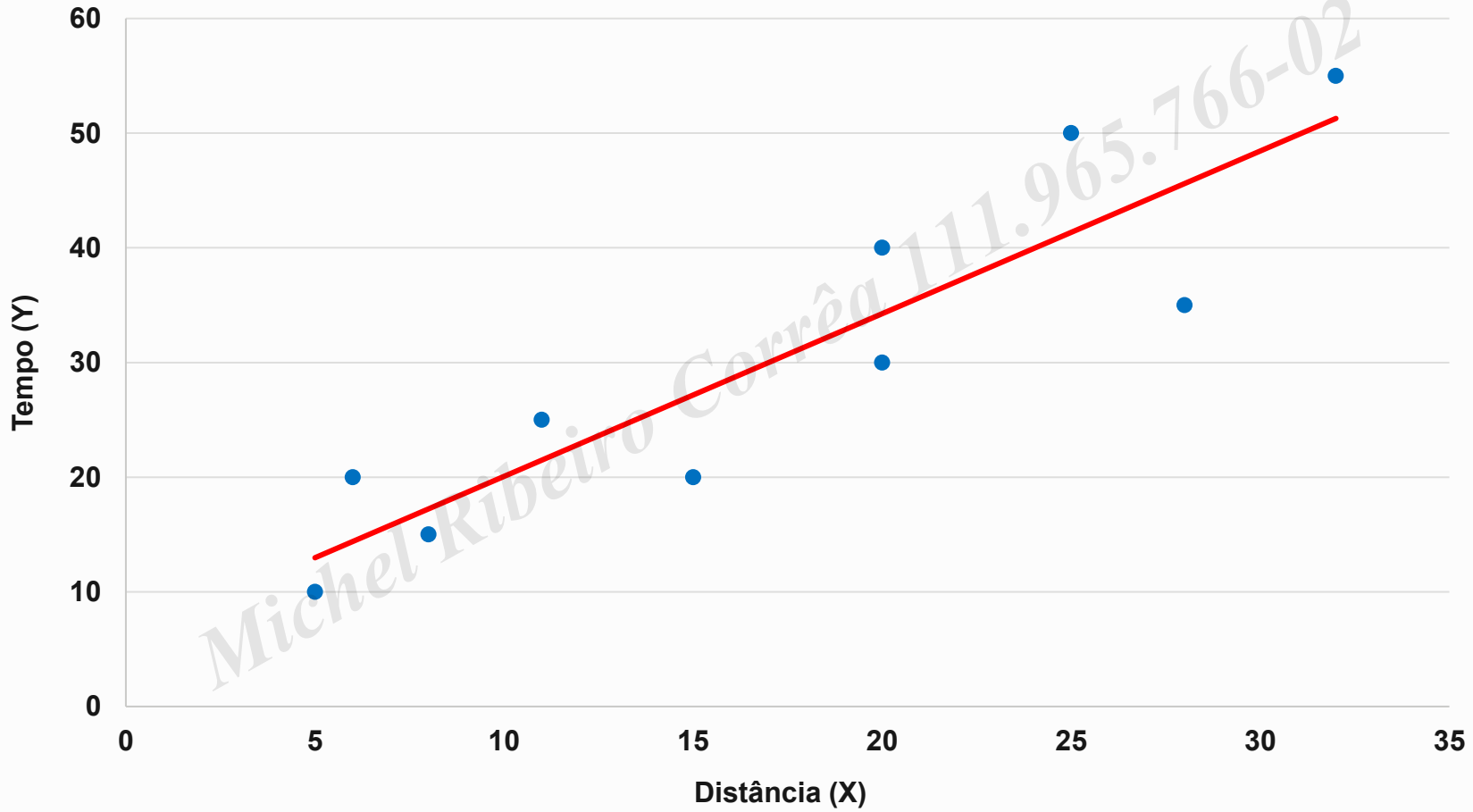
Modelos lineares de regressão

- Modelos supervisionados de machine learning
  - Conhecidos como modelos confirmatórios ou técnicas de dependência
  - O objetivo é estimar modelos, equações, com o intuito de elaborar previsões
  - Portanto, **há inferência dos resultados** para outras observações de fora da amostra
  - Define-se uma relação $Y = f(X_1, X_2, \ldots, X_k)$
    - **Y**: chamada de variável dependente, é a variável a ser explicada no modelo (*target*)
    - **X**: chamadas de variáveis explicativas, são as preditoras (*features*)

Quando aplicar o modelo

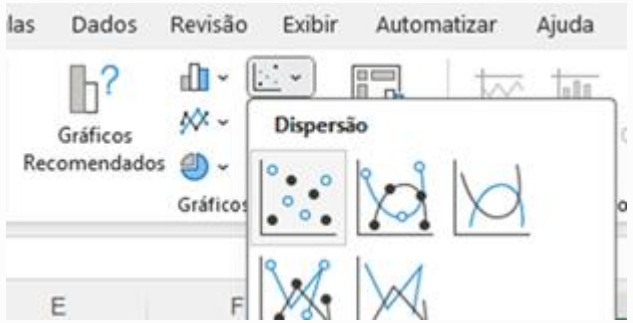
- A regressão linear é aplicada **quando a variável dependente é quantitativa**
  - O objetivo é explicar o comportamento de Y em função de um conjunto de X
  - Estabelece-se uma relação linear entre as variáveis
  - Regressão linear simples e múltipla:
    - A regressão linear simples contém apenas uma variável explicativa
    - A regressão linear múltipla contém mais de uma variável explicativa

Visualizando graficamente um modelo linear de Y = f(X)

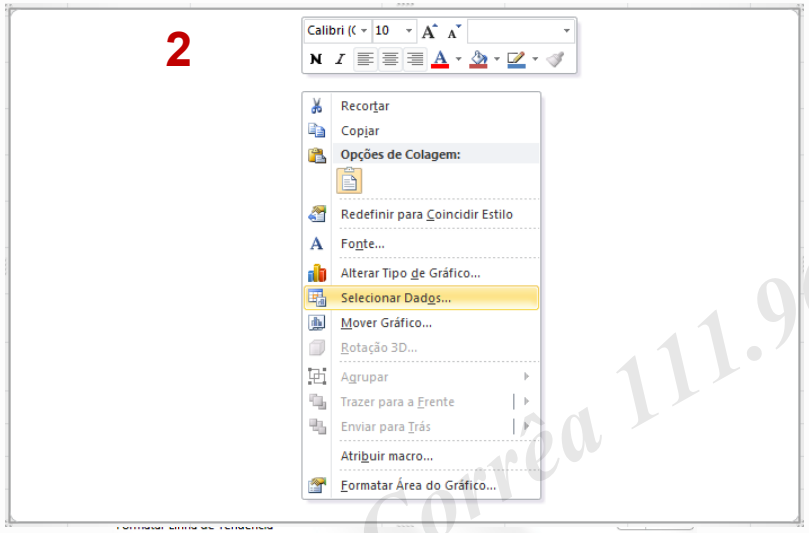


Qual é a equação que define o modelo?

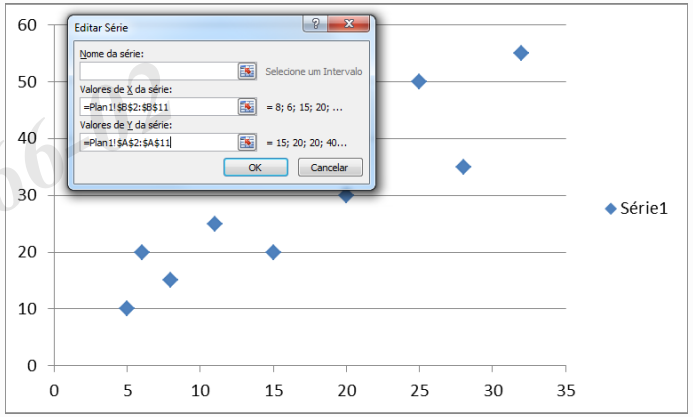
1



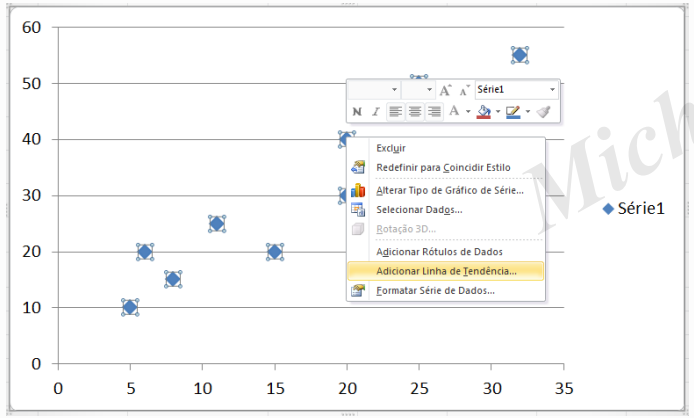
2



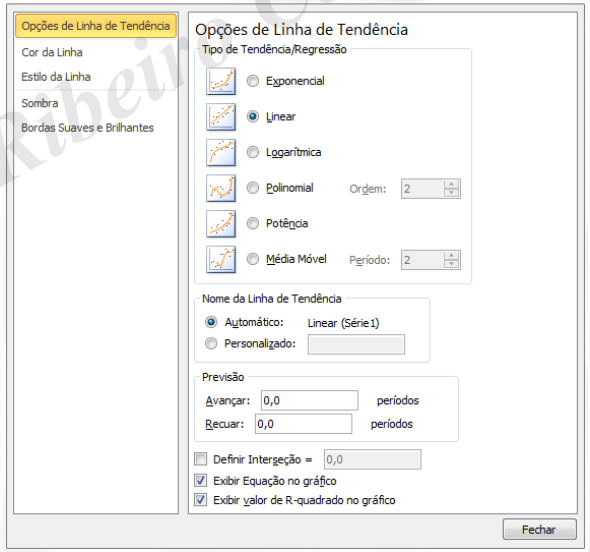
3

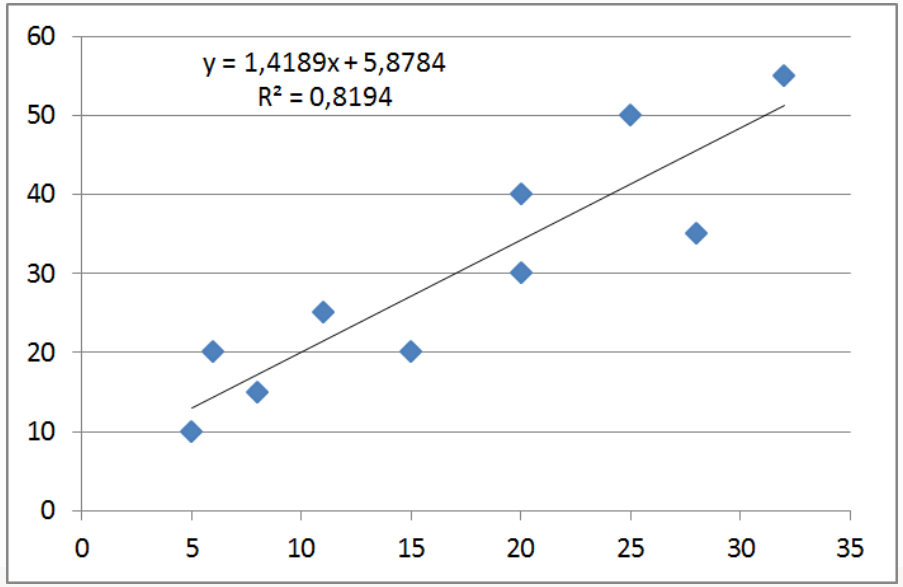


4

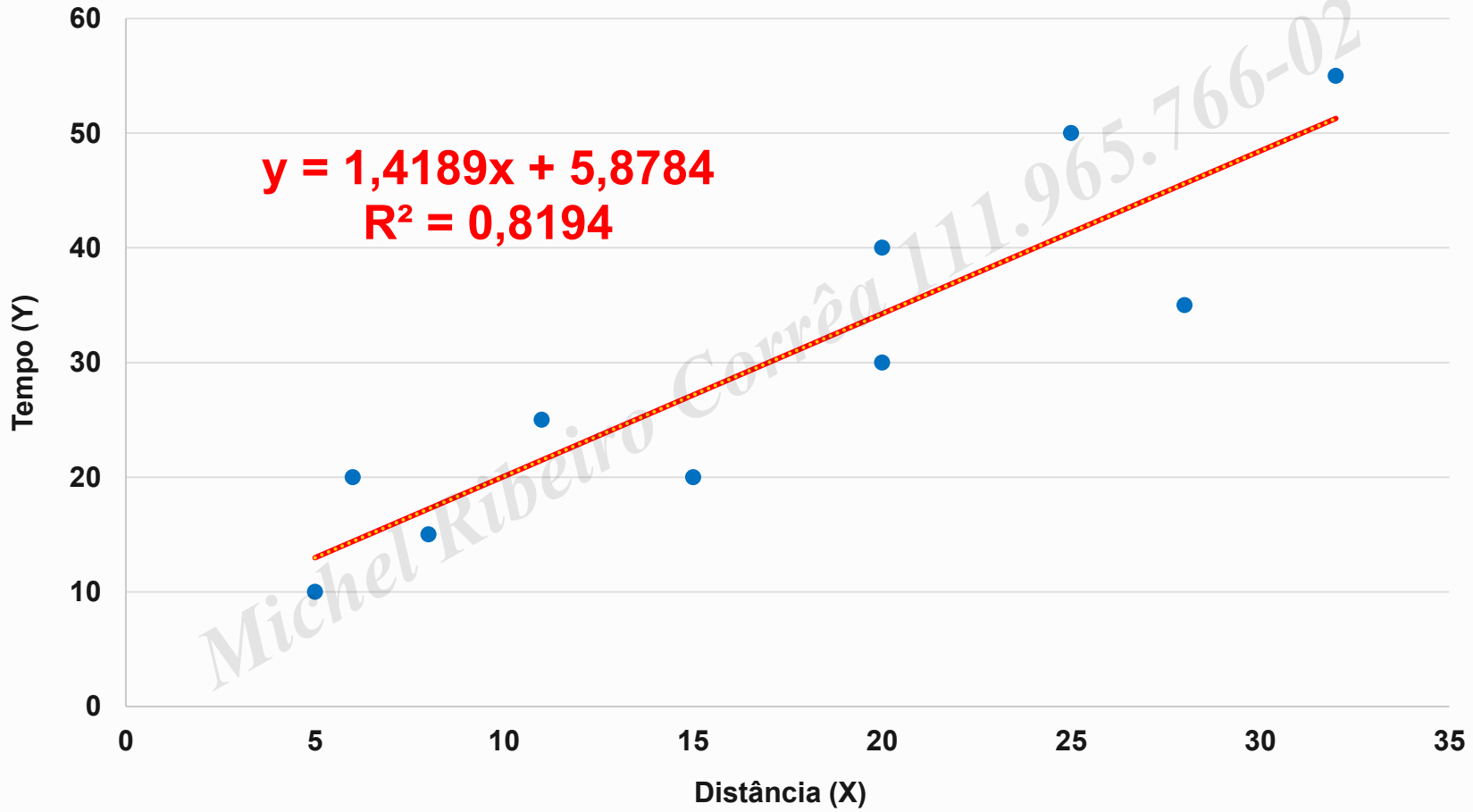


5





Qual é a equação que define o modelo?



Modelo geral de regressão linear

$$Y_i = a + b_1.X_{1i} + b_2.X_{2i} + ... + b_k.X_{ki} + u_i$$

- **Y** é a variável dependente quantitativa (fenômeno em estudo)
- **a** representa a constante (intercepto)
- $\mathbf{b_j}$ representam os coeficientes para cada variável explicativa
- $\mathbf{X_j}$ representam as variáveis explicativas do modelo
- $\mathbf{u_i}$ representa o termo de erro do modelo

  - **k** é o número de variáveis explicativas e **i** refere-se às observações em análise

  - **As variáveis explicativas (X) podem ser métricas ou categóricas**

Mínimos quadrados ordinários (MQO)

- Serão estimados os parâmetros $\boldsymbol{\alpha}$ e $\boldsymbol{\beta}$ do modelo, sendo $\widehat{\boldsymbol{Y}}_{\boldsymbol{i}}$ o valor previsto por observação

$$\widehat{Y}_i = \alpha + \beta_1 . X_{1i} + \beta_2 . X_{2i} + \cdots + \beta_k . X_{ki}$$

- Sendo assim, é possível definir o resíduo do modelo para dada observação ***i*** como:

$$u_i = Y_i - \widehat{Y}_i$$

- Condições para a estimação dos parâmetros do modelo (MQO)
  - **1. A somatória dos resíduos deve ser igual a zero**
  - **2. A somatória dos resíduos ao quadrado é a mínima possível**

Otimização de P.O. (Exemplo Solver Excel)

Elementos de um modelo

- Interpretaremos:

  - Coeficientes estimados
  - Significância geral do modelo (teste F – ANOVA)
  - Significância dos parâmetros (testes t)
  - Intervalos de confiança
  - Poder explicativo do modelo (R^2)

Parâmetros do modelo

- Interpretação dos parâmetros estimados ***α*** e ***β***

  - ***α*** é o coeficiente linear (o intercepto), ou seja, o valor de Y caso todas as X = 0

    - Muitas vezes, o ***α*** pode ser interpretado como a projeção da reta no eixo Y, uma vez que não encontram-se observações da amostra com todas as variáveis X = 0

  - ***β*** são os coeficientes angulares, ou seja, a inclinação da reta

    - Na regressão múltipla, os ***β*** são interpretados na condição *ceteris paribus*, ou seja, o efeito de certa variável X sobre Y mantidas todas as demais variáveis X constantes

    - A interpretação dos parâmetros do modelo deve ocorrer **sem a extrapolação** dos dados, isto é, são válidos dentro do limite de variação das variáveis X na amostra

Teste F (ANOVA)

- Significância geral do modelo: testa se pelo menos um dos $\boldsymbol{\beta}$ estimados é estatisticamente diferente de zero

$$F = \frac{\frac{SQR}{(k-1)}}{\frac{SQU}{(n-k)}}$$

SQR: Soma dos Quadrados da Regressão
SQU: Soma dos Quadrados dos Resíduos
k: nº de parâmetros do modelo (incluindo α)
n: tamanho da amostra

- H_0: $\beta_1 = \beta_2 = ... = \beta_k = 0$
- H_1: existe pelo menos um $\beta_j \neq 0$

- Normalmente, adota-se o nível de significância de 5% para o teste
- **Se o p-valor do teste F < 0.05, rejeita-se H_0**

Teste F (ANOVA)

SQT = SQR + SQU

- **Soma dos Quadrados Totais (SQT)**: variação de Y em torno de sua média
- **Soma dos Quadrados da Regressão (SQR)**: variação de Y explicada pelas variáveis X
- **Soma dos Quadrados dos Resíduos (SQU)**: variação de Y não explicada pelo modelo

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \overline{Y})^2}_{\text{SQT}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(\widehat{Y}_i - \overline{Y})^2}_{\text{SQR}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \widehat{Y}_i)^2}_{\text{SQU}}$$

Teste t

- Avalia a significância individual dos parâmetros estimados

$$t_{\alpha} = \frac{\alpha}{s.e.(\alpha)} \qquad t_{\beta_j} = \frac{\beta_j}{s.e.(\beta_j)}$$

  - H_0: $\alpha = 0$
  - H_1: $\alpha \neq 0$
  - H_0: $\beta_j = 0$
  - H_1: $\beta_j \neq 0$

- Comumente, adota-se o nível de significância de 5% para o teste
- **Se o p-valor do teste t < 0.05, rejeita-se H_0**
- **Mesmo que não tenha significância, o α não deve ser removido do modelo!**

Intervalos de confiança

- Para dado nível de confiança, é o intervalo de valores que contém o verdadeiro parâmetro populacional

$$\alpha \pm t \times s.e.(a)$$

$$\beta_j \pm t \times s.e.(\beta_j)$$

- t é o valor crítico bicaudal da distribuição t de Student para o nível de confiança escolhido na análise, com n – k graus de liberdade

- Normalmente, observa-se o nível de confiança de 95% (nível de significância de 5%)

Coeficiente de explicação (R^2)

- O R^2 apresenta o poder explicativo do modelo, ou seja, o percentual da variabilidade de Y que é explicado pela variação conjunta das variáveis X

$$R^2 = \frac{SQR}{SQR + SQU}$$

- **O R^2 varia de 0 a 1: valores mais próximos de 1 indicam maior capacidade preditiva**
  - O R^2 não deve ser analisado no sentido de validar ou não o modelo, pois, em muitos campos do conhecimento, é comum não obter valores muito elevados
  - R^2 ajustado para comparação entre modelos: $R^2_{ajust} = 1 - \frac{n-1}{n-k}(1 - R^2)$
  - Ajusta-se a quantidade k de parâmetros (incluindo o α) e o tamanho da amostra n

Variáveis explicativas categóricas

- Quando há variáveis X categóricas, é necessário transformá-las em ***dummies***

  - ***Dummy***: variável binária (1 ou 0) indicando a presença (1) ou ausência (0) do atributo

ID	Variável A		Variável B		
	Categ. 1	Categ. 2	Categ. 1	Categ. 2	Categ. 3
1	1	0	0	1	0
2	0	1	0	0	1
3	0	1	1	0	0
4	1	0	0	0	1
5	0	1	0	1	0
6	1	0	1	0	0

Na regressão, utiliza-se o procedimento de **n – 1 *dummies***, isto é, uma das categorias de cada variável categórica deve ficar como a referência de sua variável no intercepto

Referência / Sugestão de Leitura

- Fávero, Luiz Paulo; Belfiore, Patrícia. (2024). Manual de análise de dados: estatística e machine learning com Excel®, SPSS®, Stata®, R® e Python®. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC.

- Wooldridge, Jeffrey M. (2017). Introdução à Econometria: uma abordagem moderna. 3 ed. Editora Cengage.

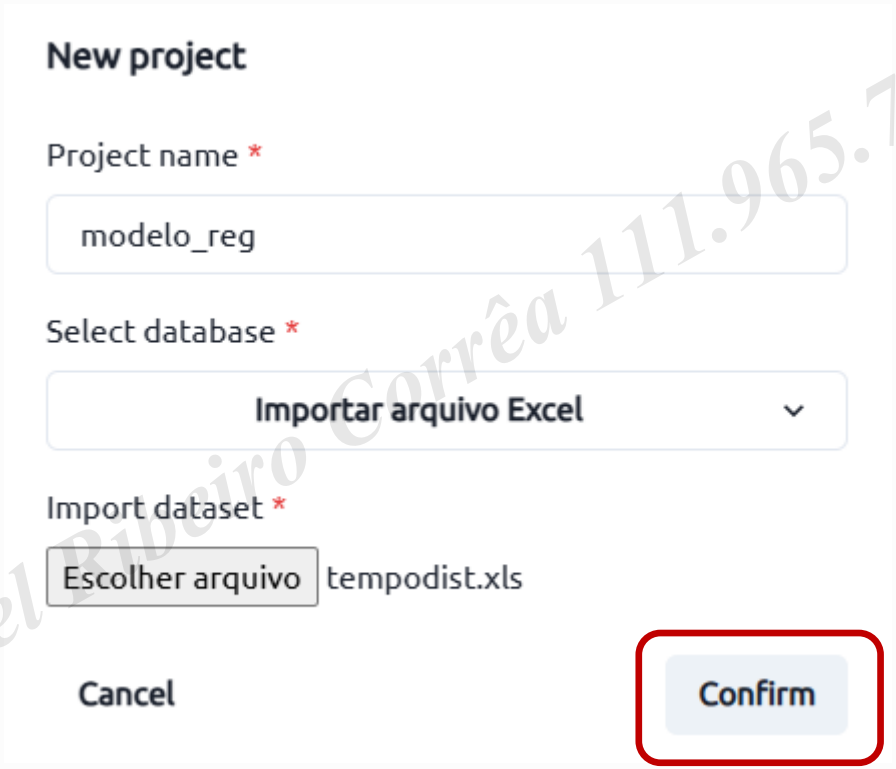
Stats Studio

Acesse: stats-studio.com

Clique em “Registrar”

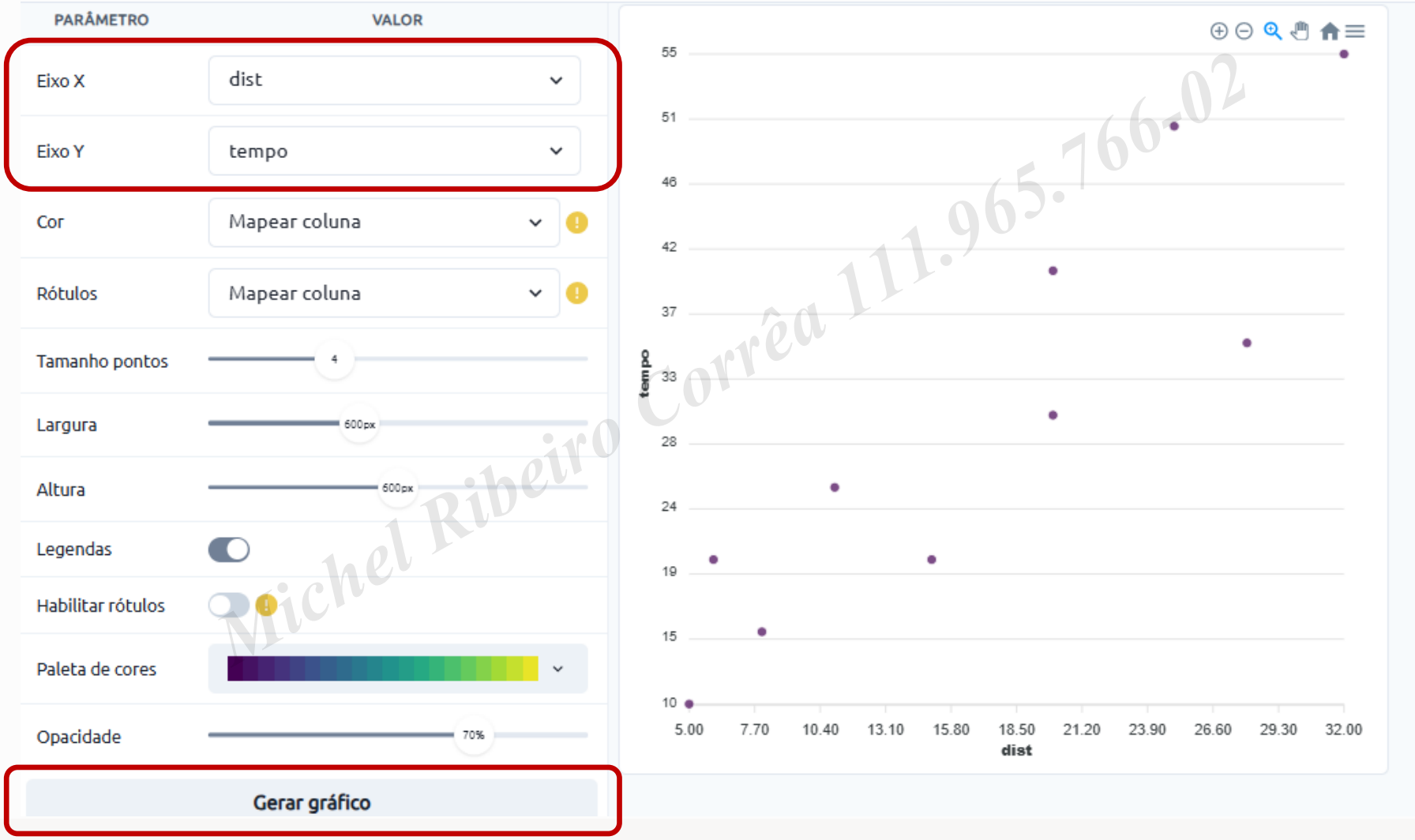
Criando um projeto: File → New project

Criando um projeto: nome, tipo de arquivo e importar

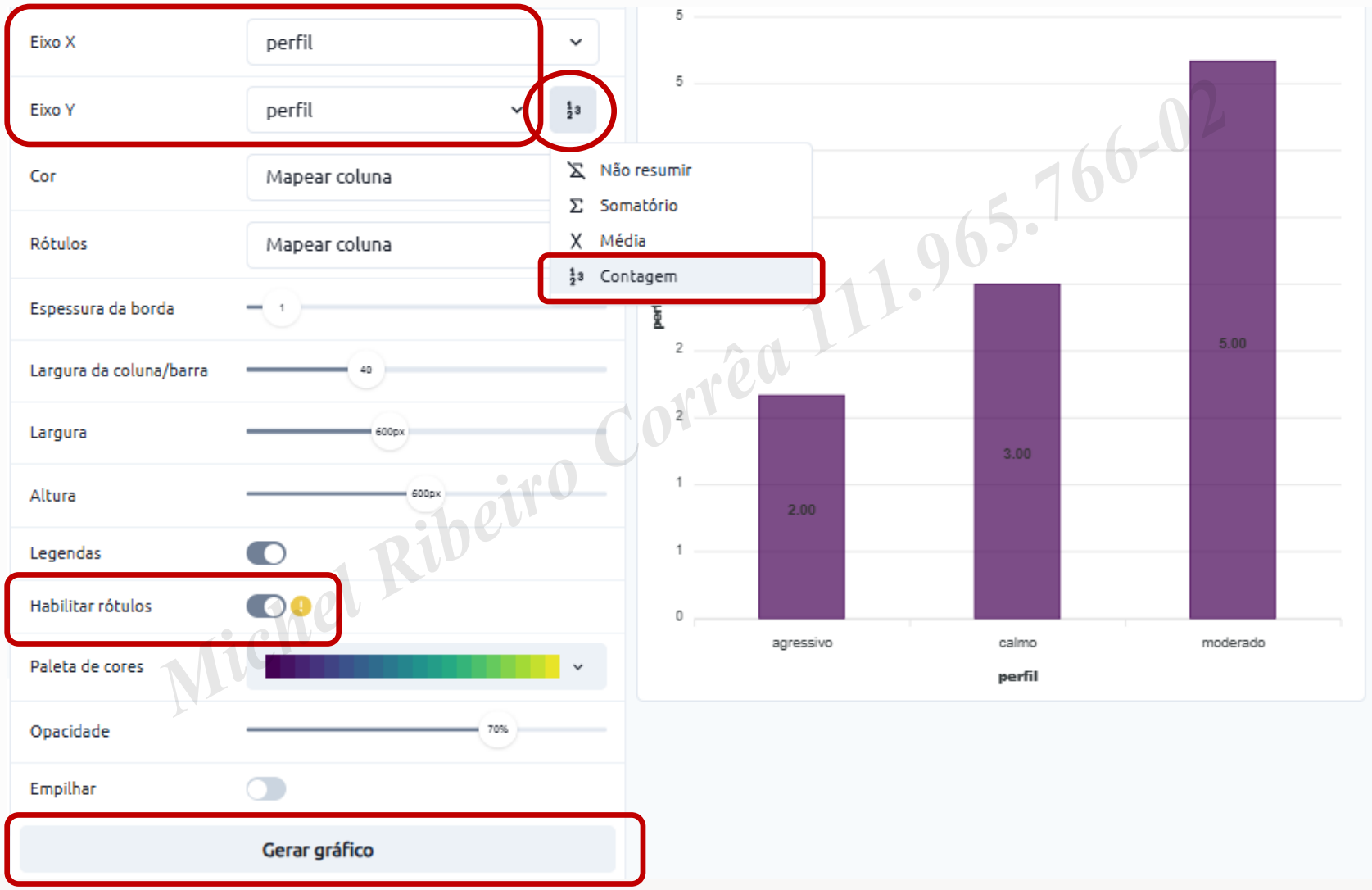


Estatísticas descritivas: Describe dataset e Correlation Matrix

Data visualization: Gráficos → Pontos

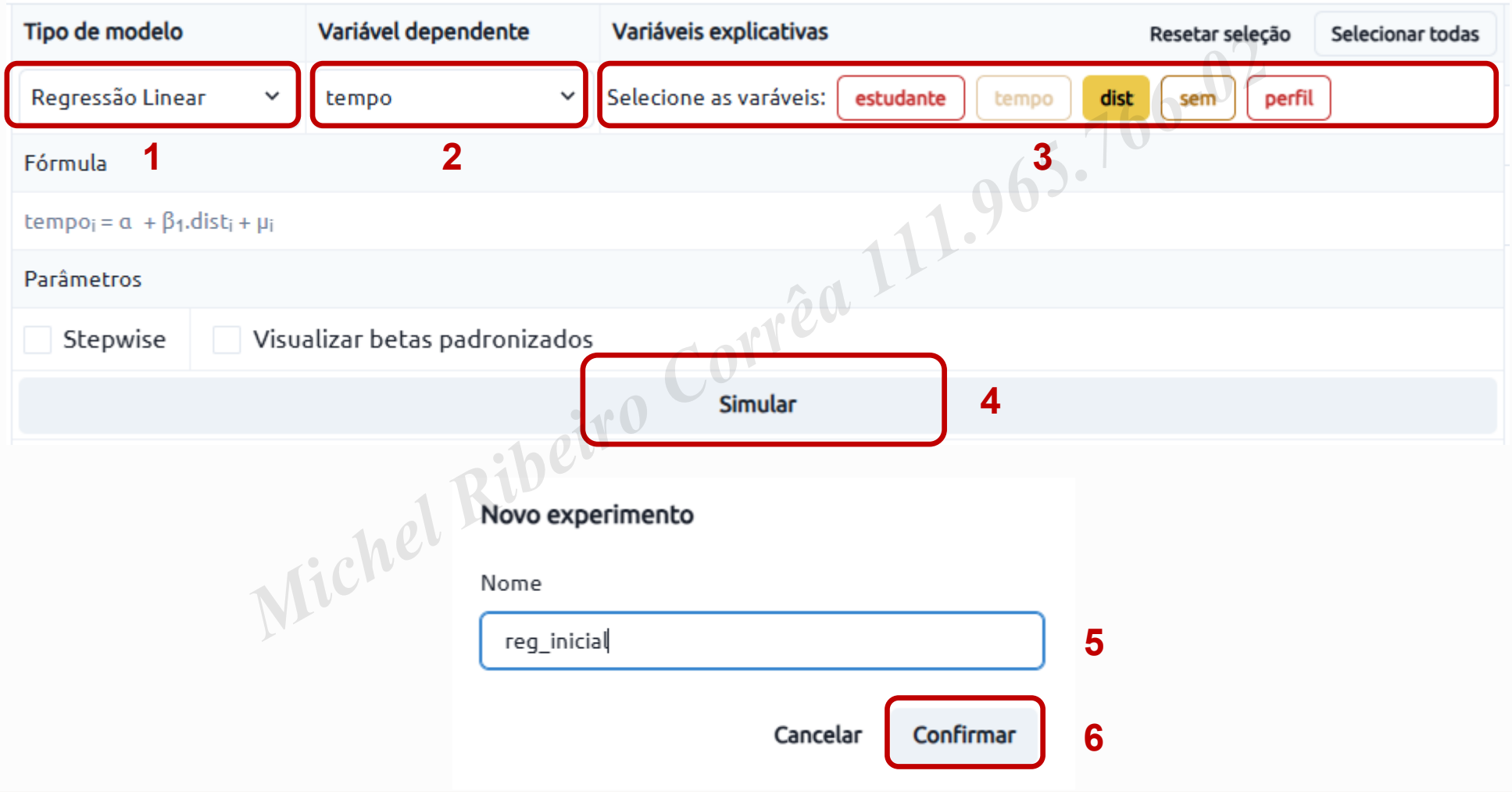


Realize data visualization: Gráficos → Coluna



Gere o modelo de regressão: Supervised

Gere o modelo de regressão: tipo de modelo e variáveis



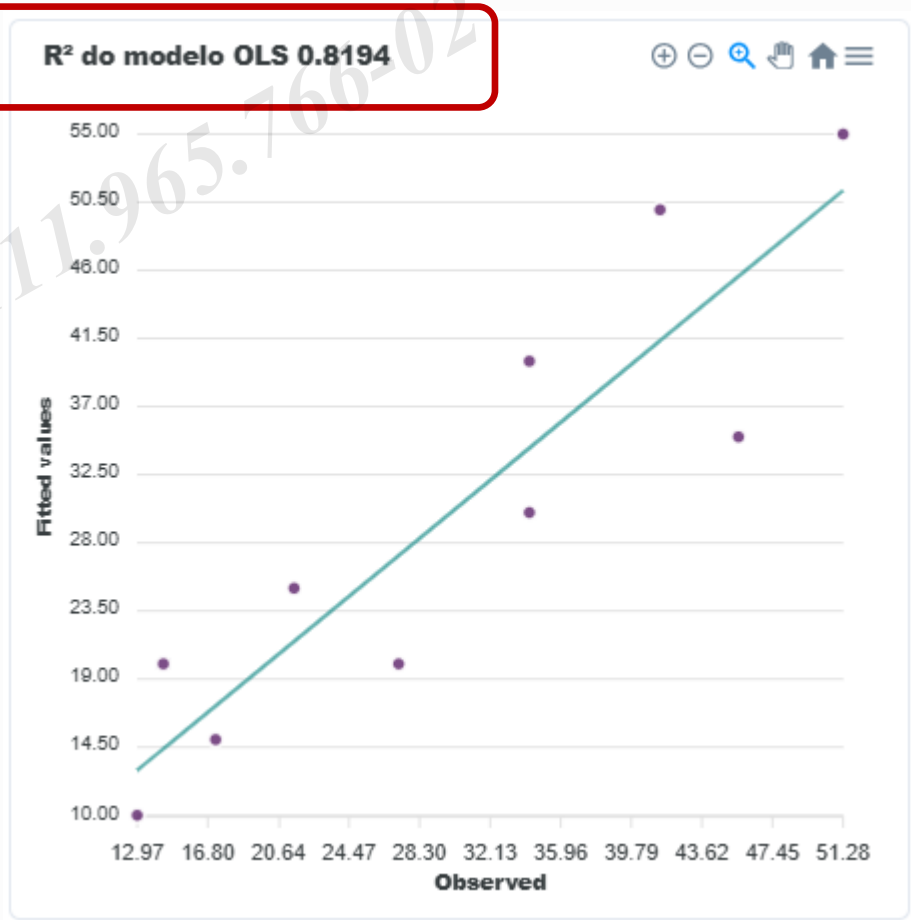
Interpretando os resultados do modelo

PARÂMETRO	VALOR	ERRO PADRÃO	t	P-VALUE	[2.5%	97.5%]
const	5.87838	4.53233	1.29699	0.23079	-4.57319	16.32994
dist	1.41892	0.23550	6.02520	0.00031 ***	0.87586	1.96198

alfa e beta

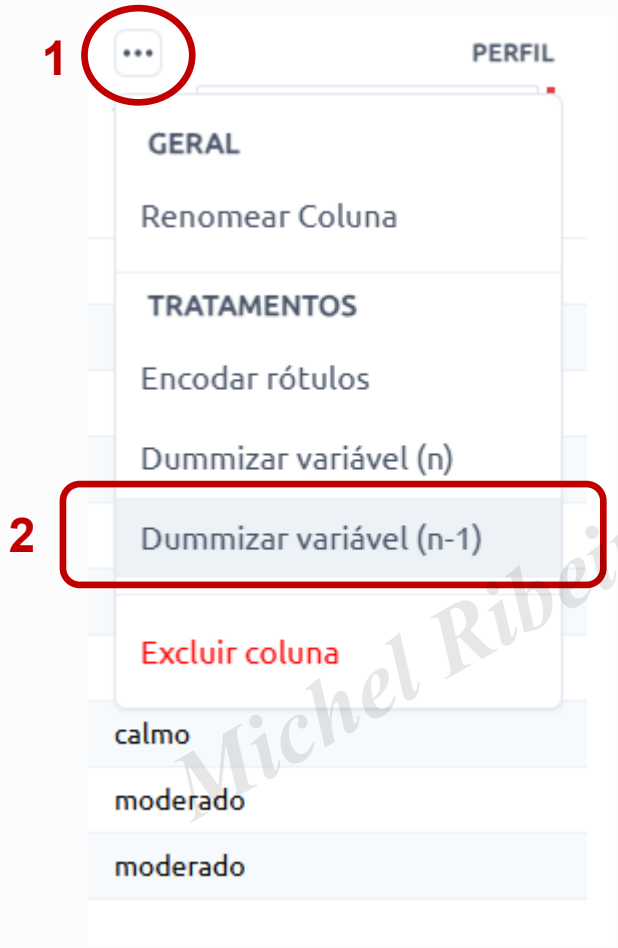
significância

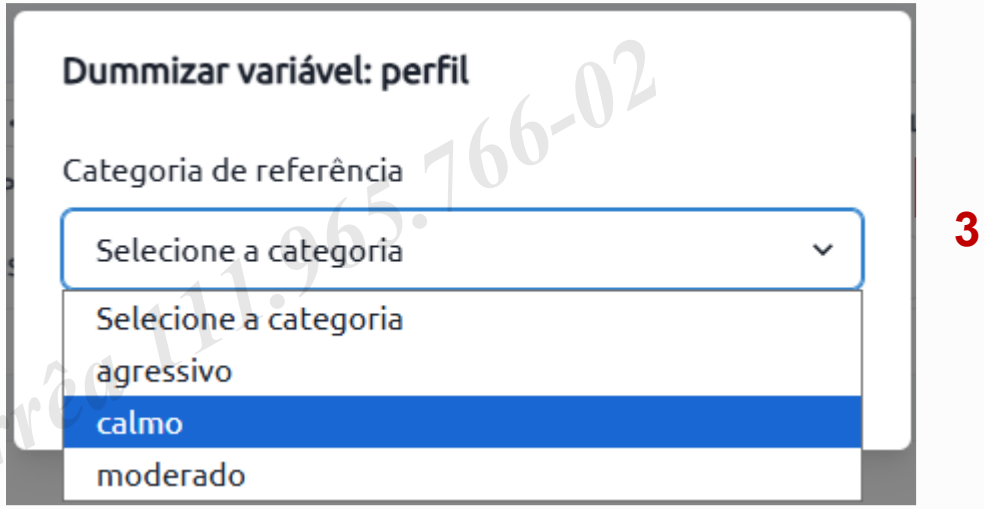
poder explicativo



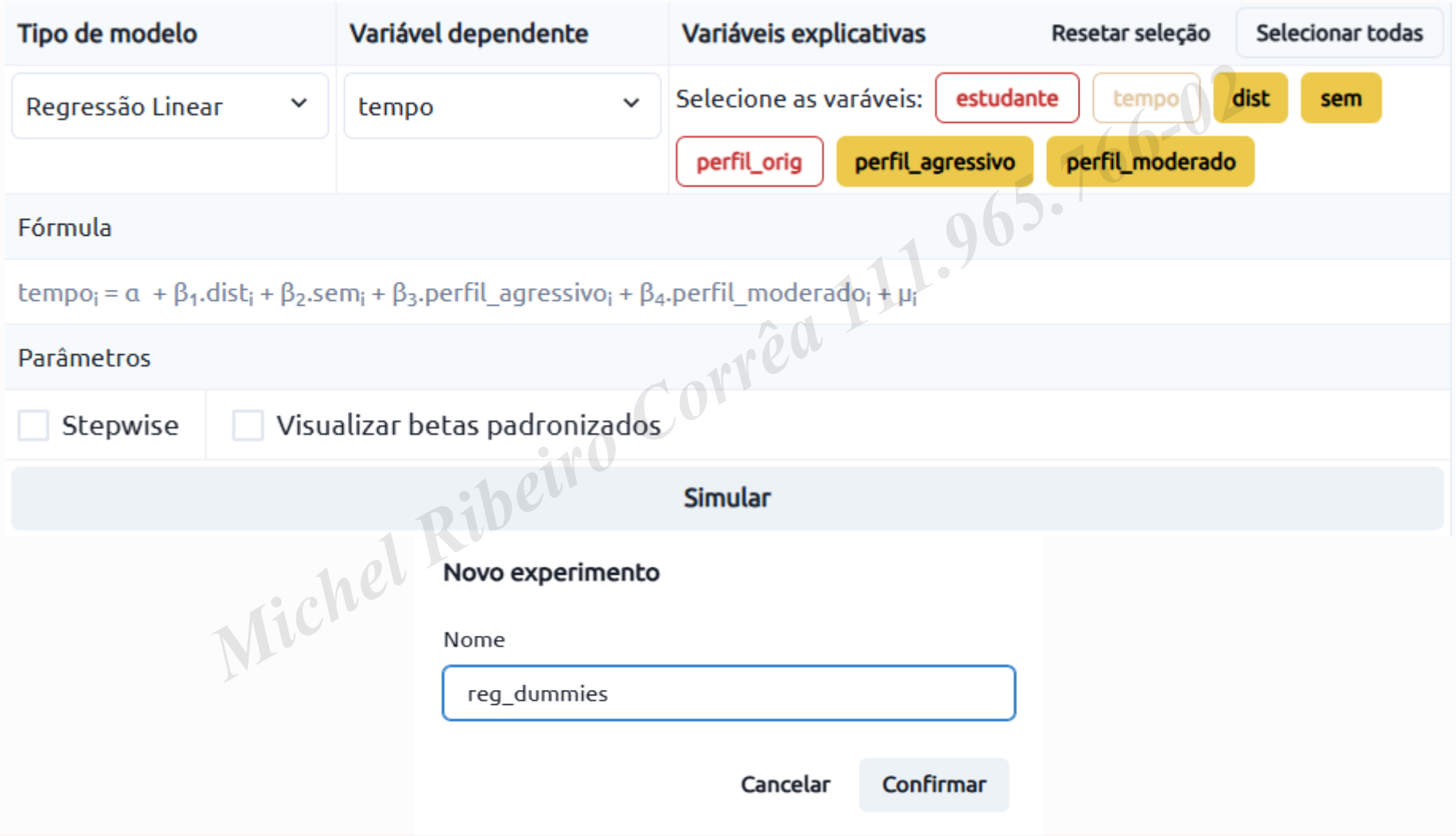
$$\widehat{tempo}_i = 5,87 + 1,41 \,.\, distância_i$$

Transforme variáveis categóricas para *dummies*





Gerando novo modelo com *dummies*



Interpretando os resultados do modelo

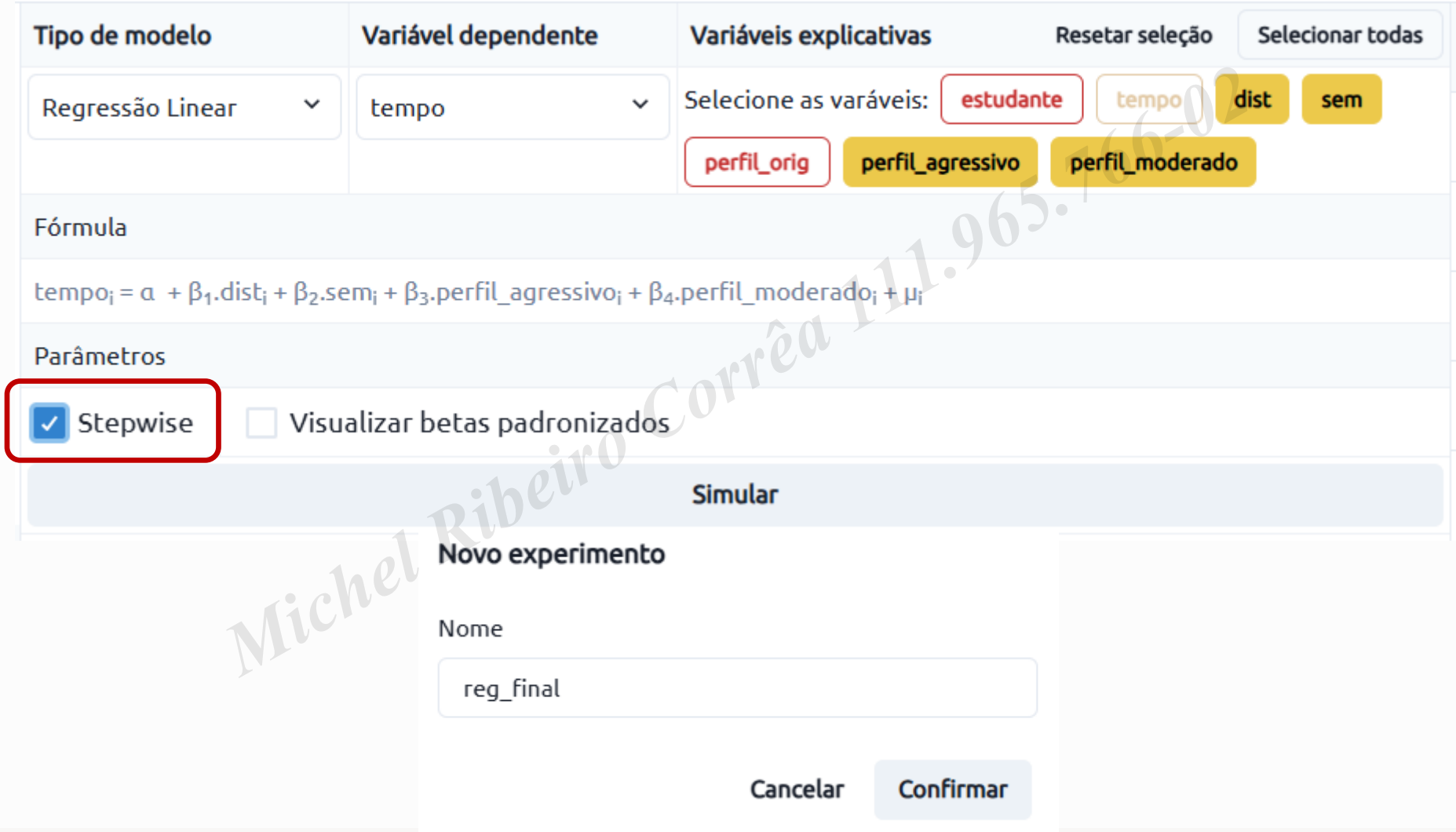
PARÂMETRO	VALOR	ERRO PADRÃO	t	P-VALUE	[2.5%	97.5%]
const	8.18358	1.08082	7.57162	0.00064 ***	5.40524	10.96193
dist	0.70775	0.07427	9.52973	0.00022 ***	0.51684	0.89867
sem	7.86676	0.74598	10.54554	0.00013 ***	5.94916	9.78436
perfil_agressivo	9.09179	1.28670	7.06596	0.00088 ***	5.78421	12.39937
perfil_moderado	0.19893	1.00692	0.19756	0.85117	-2.38944	2.78730

alfa e betas

significâncias

Seu modelo pode não ser estatísticamente significante!
Ele possui pelo menos um beta com p-value maior que 0.05

Gerando novo modelo com *Stepwise*



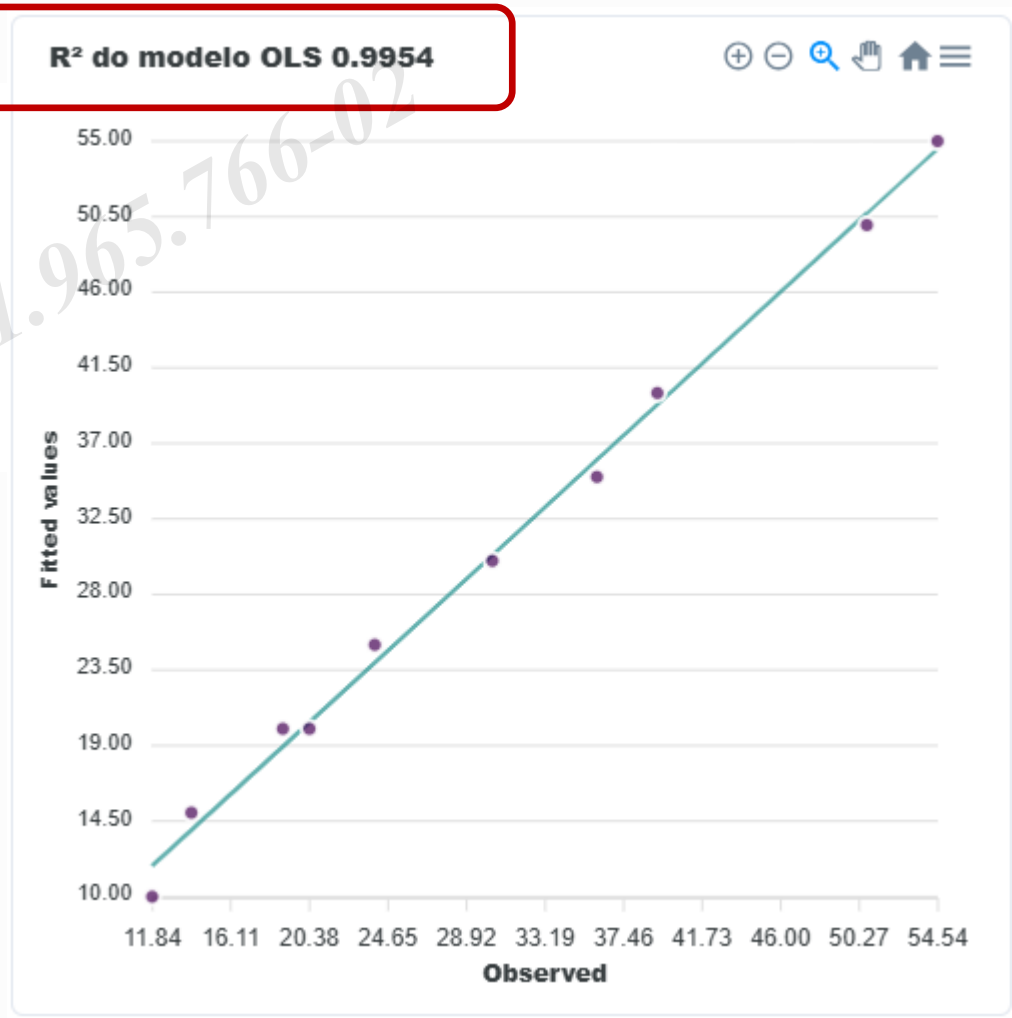
Interpretando os resultados do modelo

PARÂMETRO	VALOR	ERRO PADRÃO	t	P-VALUE	[2.5%	97.5%]
const	8.29193	0.85351	9.71512	0.00007 ***	6.20347	10.38039
dist	0.71045	0.06690	10.61953	0.00004 ***	0.54675	0.87415
sem	7.83684	0.66940	11.70721	0.00002 ***	6.19887	9.47481
perfil_agressivo	8.96761	1.02889	8.71580	0.00013 ***	6.45000	11.48521

alfa e betas

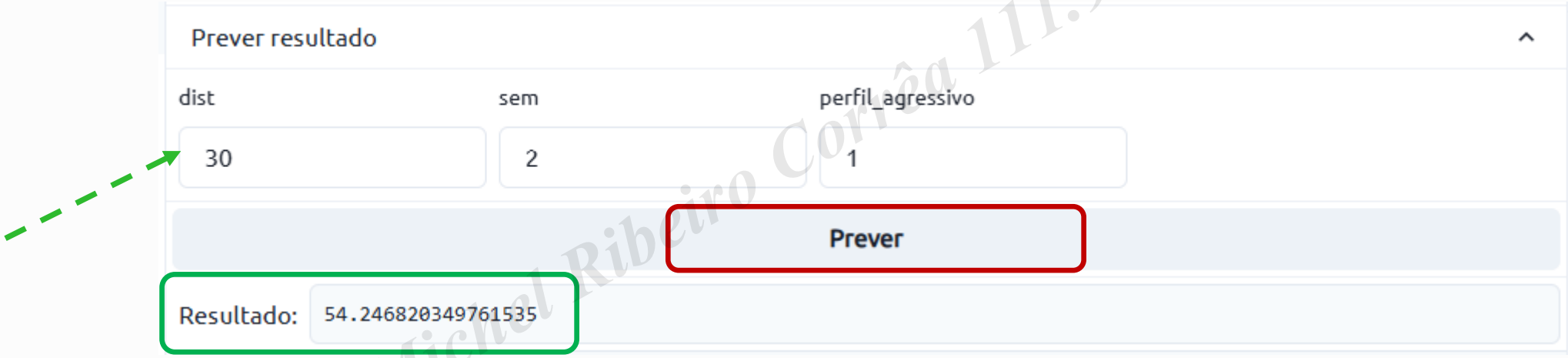
significâncias

poder explicativo



Modelo preditivo final: realizar previsões

$$\widehat{tempo}_i = 8,29 + 0,71 \,.\, dist_i + 7,83 \,.\, sem_i + 8,96 \,.\, perfil\_agressivo_i$$



Obrigado!

Prof. Wilson Tarantin Junior | linkedin.com/in/wilson-tarantin-junior-359476190

MBA USP ESALQ