# Aula 3b

James Hunter, Ph.D.

Professor, Retrovirologia, UNIFESP

28 de maio de 2020

# Resumo de Simulação

- Simulação é uma técnica central da ciência dos dados
- `for` loops
- números aleatórios em R: `runif()` e `rnorm()`
- mais usos para os verbos de `dplyr`

- Não vou repetir um curso de estatística
- Mas, só rever alguns conceitos básicos

- Probabilidade é um número sem unidade entre 0 e 1
- São limites absolutos

# Distribuições

- Queremos que as vendas camiseta variam entre .15 e .40 do publico
  - Como fazer?
  - Vendas tornará variável aleatória
- Distribuições formais dão um conceito de como as variáveis aleatórias são distribuídas em realidade
- Podemos usar uma distribuição para definir os valores das variáveis aleatórias

# Distribuições Contínuas Mais em Uso

1. Uniforme
2. Normal (Gaussiana)

# Distribuições Teoricas e Distribuições Empiricas

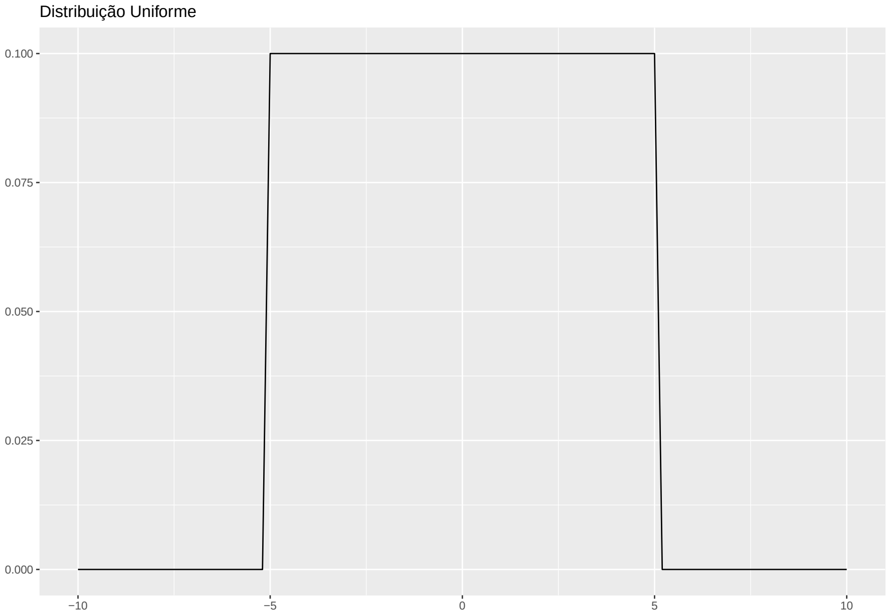
- A distribuição segue os dados
  - Os dados fazem uma distribuição
- Distribuições teóricas
  - Os valores de demanda vão seguir a equação da distribuição

# Distribuição Uniforme

- Todos os valores num intervalo tem chance igual de aparecer
- Intervalo definido por um limite inferior e limite superior
- Fora do intervalo, probabilidade de um número ser selecionado é 0

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \textit{para } a \leq x \leq b \\ 0 & \textit{para qualquer outro valor} \end{cases}$$

# Gráfico da Distribuição Uniforme



# Valores Aleatórios da Distribuição Uniforme

```r
set.seed(42)
runif(10, min = 0, max = 10)
```

```
##  [1] 9.148060 9.370754 2.861395 8.304476 6.417455 5.190959
##  [9] 6.569923 7.050648
```

# Não São Números Inteiros

- Para fazer esses números números inteiros
  - Precisa usar `floor` e modificar os limites para permitir a gama completa que quer
  - aqui min = 8, max = 12

```
set.seed(42)
floor(runif(10, min = 8, max = 12.999))
```

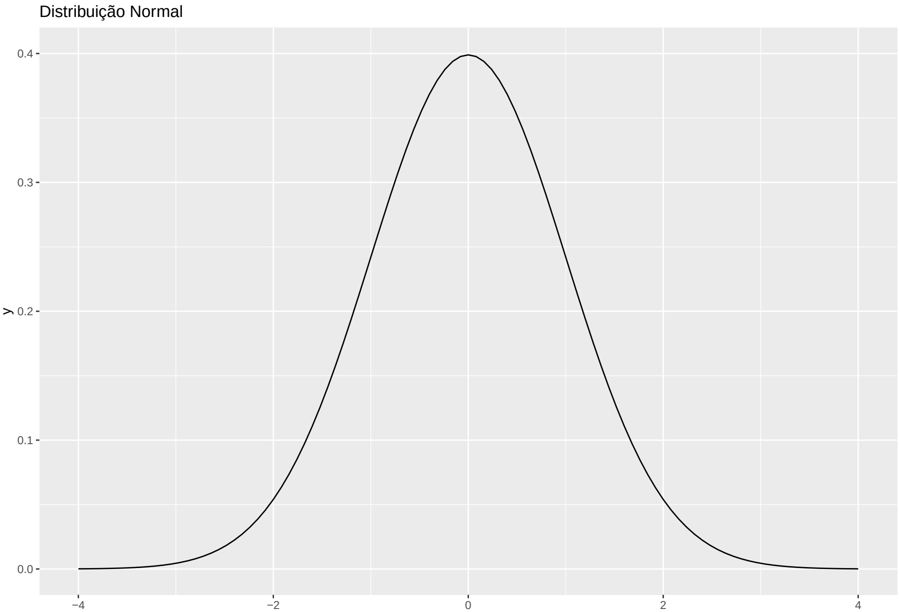
```
##  [1] 12 12  9 12 11 10 11  8 11 11
```

# Distribuição Normal

- A famosa curva de sino
- Teorema de Limite Central
- Especifica não com limites, mas com **parâmetros**
  - **média** ($\mu$)
  - **desvio padrão** ($\sigma$)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

# Gráfico da Distribuição Normal



# Números de Compras com a Distribuição Normal

- Compras em ano1 com público de 4.000 (10 amostras)

```
set.seed(42)
publico <- 4000
interval <- seq(from = 0.15, to = 0.4, by = 0.001)
floor(publico * rnorm(10, mean = mean(interval),
                      sd = sd(interval)))
```

```
##  [1] 1498  936 1205 1283 1217 1069 1538 1072 1686 1081
```

- Limites não são fixos

# Quando Usar Cada Um

- **Uniforme** (`unif`)
- Quando você quer que todos os números têm uma chance igual de ser selecionados
- **Normal** (`norm`)
  - Quando você sabe que os valores são distribuídos normalmente
  - Quando você tem um grande número de valores que não têm outra distribuição conhecida
- Teorema de Limite Centrale

# Duas Outras Distribuições Importantes

- Ambas *discretas*
- Famílias de distribuições

# Binomial

- Proabilidade de número de sucessos numa sequência de $n$ tentativas
- Ex., jogar uma moeda
- Quando você tem só dois resultados possíveis
- `TRUE/FALSE`
- Distribuição `binom` em R
- Testes de Proporção

# Poisson

- Probabilidade de uma série dos eventos ocorrer num certo período de tempo
- Pode geralizar o uso para a contagem dos eventos ou objetos
- Ex., você quer saber quantas vendas são feitas por hora
- Um parâmetro: lambda ($\lambda$) - Número esperado de ocorrências
- Distribuição `pois` em R

# Porque Distribuições São Importantes

- Descrevem curvas teóricas que usamos para comparar aos dados
- *"Machine Learning is Glorified Multidimensional Curve Fitting"* - Michael Levitt, Prêmio Nobel de Química
- Testes de estatística são a comparação dos dados amostrais às curvas das distribuições
- Avalia qual é a probabilidade ($p$) que os dados espelham perfeitamente a distribuição
- Se $p$ for abaixo de um certo valor $\alpha$, consideramos os dados significativos
- *Significativo* – não suportam uma hipótese arbitrária ("hipótese nula")

# Este Não É Uma Aula de Estatística

- Pulamos diretamente aos modelos

# Modelos

- Tirar conclusões sobre uma população baseado numa amostra
- Mesma ideia atrás de inferência em estatística
- Modelos de *machine learning* como grandes modelos estatísticos
- Também existem modelos de simulação
  - Replicar com matemática um processo cujas dimensões e regras são bem compreendidas

# Estatística vs. *Machine Learning*

- Testes estatísticos tendem de ser mais simples para aplicar e analisar
- Modelos de *machine learning* podem formar estruturas e previsões mais sofisticadas
- *Machine learning* mais certo que os modelos estatísticos?
  - Estudo de 2018 diz que não têm resultados melhores[1]
- Decisão para usar um modelo de *machine learning* depende de:
  - Necessidade
  - Sofisticação do modelo para estudo
  - Tamanho do amostra
  - Habilidade e experiência do pesquisador com o algoritmo de *machine learning*

[1] Makridakis S, Spiliotis E, Assimakopoulos V. Statistical and Machine Learning forecasting methods: Concerns and ways forward. PLoS ONE. 2018 Mar 27;13(3):e0194889.

# Sabores de *Machine Learning*

- Existe uma variável dependente
  - **Supervisionado**
    - Supervisão por causa que o resultado do modelo pode ser avaliado em termos da realidade dos resultados observados
  - 2 subtipos
    - **Classificação** - Colocar cada caso em um grupo baseado no valores das variáveis independentes
    - **Regressão** - Determinar um valor de uma combinação das variáveis independentes
- Não existe uma variável dependente
  - **Não-supervisionado**
    - Explorar a estrutura dos casos e tentar agrupar eles em *clusters* dos casos
    - **Análise dos Clusters**

# Regressão Linear Simples

# Regressão – Historia

- Termo vem de eugenismo (*eugenics*) de Sir Francis Galton.
- Estudou alturas de famílias
- Observou que crianças de pais altos tendiam de ser mais baixas de que os pais e crianças de pais baixos tendiam de ser mais altas
- Chamou a tendência **regressão à média**
- Usaremos esses dados clássicos

# Método de Mínimos Quadrados

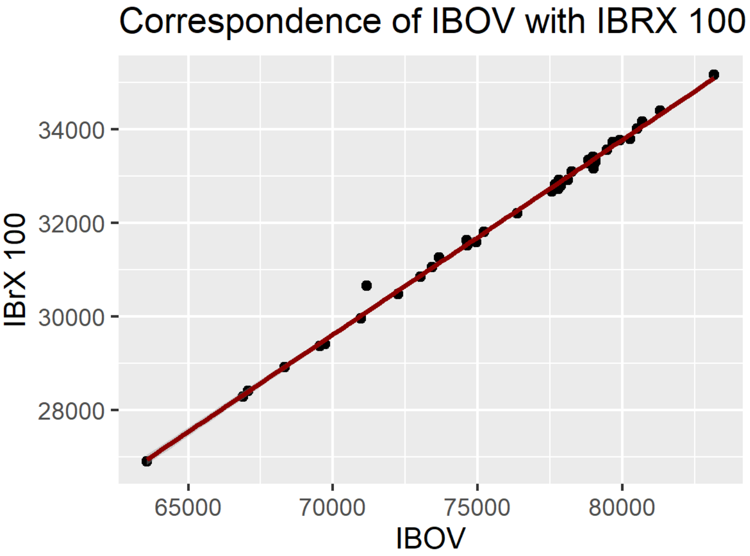
- Solucionamos com o método *Mínimos Quadrados*
  - Inventado por Carl Friedrich Gauss (1777 - 1855)
  - Método minimiza as divergências entre os valores lineares previstos e os valores dos dados
  - Consegue o melhor relação entre a variável de resultado e as variáveis prognosticas
- Por enquanto, vamos restringir o modelo para forma linear
  - Outras formas existem

# Proposito

*Prever um resultado numa variável dependente baseado em uma ou mais variáveis independentes*

- Uma – regressão linear *simples*
- Mais – regressão linear *múltipla*

# Visualização de Regressão



# Linha Reta

$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$

- $\beta_1$ = inclinação da linha (*slope*)
- $\beta_0$ = intercepto (onde cruza o eixo $y$)
- Os dois parâmetros da regressão
- Com estes parâmetros, Mínimos Quadrados acha a reta que melhor prevê o valor da variável dependente dado o valor de independente

# “Melhor” Quer Dizer “Bom”?

- Apesar de ser a melhor maneira de prever $y$, possível que não descreve bem $y$
- **Bom** depende dos dados
- **Melhor** depende do método

# Equação de Regressão

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i$$

- $Y_i$ = valor de variável dependente
- $\beta_0$ = intercepto
- $\beta_1$ = inclinação da reta de regressão
- $X_i$ = valor da variável independente
- $\epsilon_i$ = termo de erro de cada caso

# Equação de Regressão - Estimação

$$\hat{Y}_i = b_0 + b_1 X_i + e_i$$

- $\hat{Y}_i$ = valor de variável dependente (estimado)
- $b_0$ = intercepto
- $b_1$ = inclinação da reta de regressão
- $X_i$ = valor da variável independente
- $e_i$ = termo de erro de cada caso

# Termo de Erro ($\epsilon$)

- Também chamado **resíduo**
- Responsável pela variabilidade em $y$ que a reta não consegue explicar

# Mínimos Quadrados

- Faz o cálculo que minimiza o quadrado da soma dos erros
- Erros = resíduos = diferenças entre o valor *observado* e o valor *esperado*

$$min \sum (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- $y_i$ = valor observado da variável dependente
- $\hat{y}_i$ = valor estimado da variável dependente

## Basta de Teoria – Exemplo

- A base de dados de Galton sobre altura nas famílias
- Pergunta é se filhos/as são mais altos ou mais baixos de que os pais
- Mediu 898 filhos/as em 197 famílias
- Base de dados originais (em papel) fica na University College, London (UCL)

# Variáveis

```r
galton <- readRDS(here::here("galton.rds"))
str(galton)
```

```
## 'data.frame':    898 obs. of  6 variables:
##  $ family: Factor w/ 197 levels "1","10","100",..: 1 1 1 1
##  $ father: num  78.5 78.5 78.5 78.5 75.5 75.5 75.5 75.5 75
##  $ mother: num  67 67 67 67 66.5 66.5 66.5 66.5 64 64 ...
##  $ sex   : Factor w/ 2 levels "F","M": 2 1 1 1 2 2 1 1 2 1
##  $ height: num  73.2 69.2 69 69 73.5 72.5 65.5 65.5 71 68 .
##  $ nkids : int  4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 ...
```

- `height`, `father`, `mother` todos medem altura em polegadas

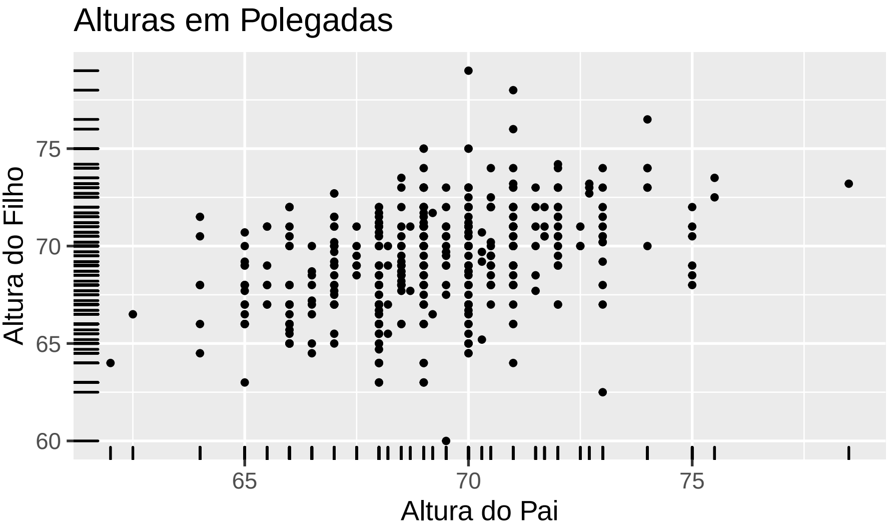
# Foco em Pais e Filhos

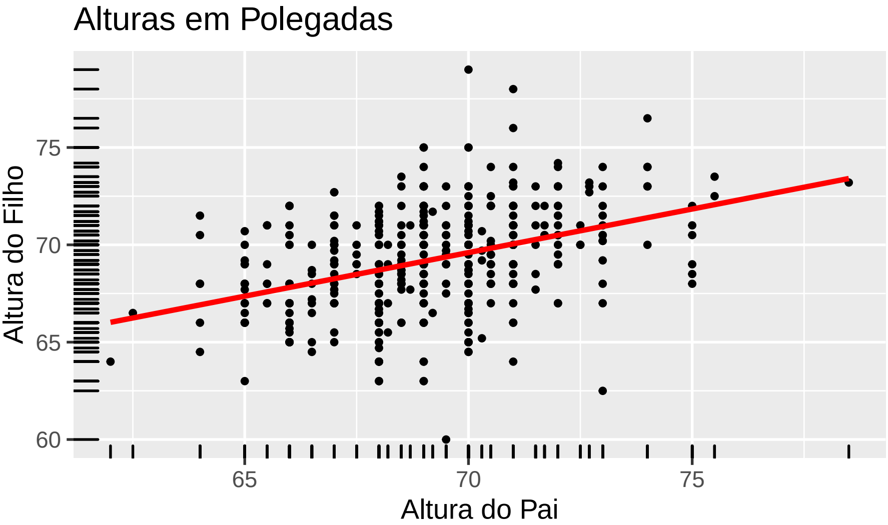
```
boys <- galton %>%
  filter(sex == "M") %>%
  select(-family, -mother, -sex, -nkids)
glimpse(boys)
```

```
## Rows: 465
## Columns: 2
## $ father <dbl> 78.5, 75.5, 75.5, 75.0, 75.0, 75.0, 75.0, 75
## $ height <dbl> 73.2, 73.5, 72.5, 71.0, 70.5, 68.5, 72.0, 69
```

- `father` é a variável independente
- `height` é a variável dependente
- Queremos ver se a altura do pai prevê a altura do filho

# Pai/Filho – Gráfico de Dispersão




Alturas em Polegadas
Altura do Filho
Altura do Pai
60
65
70
75
65
70
75

# O Que Podemos Dizer Agora?

- **Parece** que mais altos os pais, mais altos os filhos
- Vamos olhar nas estatísticas descritivas das 2 variáveis
  - mais correlação

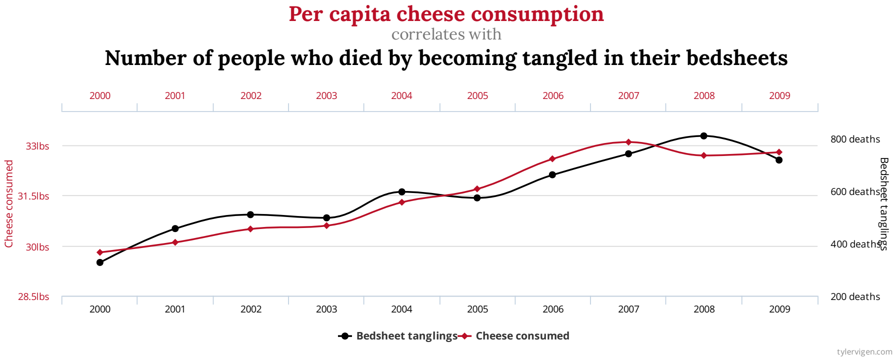
```
## Descriptive Statistics
## boys
## N: 465
##
##                        father    height
## ----------------- -------- --------
##              Mean     69.17     69.23
##           Std.Dev      2.30      2.63
##               Min     62.00     60.00
##                Q1     68.00     67.50
##            Median     69.00     69.20
##                Q3     70.50     71.00
##               Max     78.50     79.00
##               MAD      1.93      2.67
```

# O Que É a "Correlação"?

- *Coeficiente de Correlação* mede o grau da associação linear entre 2 variáveis
- Sempre cai entre -1 e $+1$
  - -1 significa uma relação perfeitamente inversa (quando $x$ sobe, $y$ desce pela mesma proporção)
  - 0 significa que não existe uma relação linear entre as 2 variáveis
  - $+1$ significa uma relação perfeitamente positiva (quando $x$ sobe, $y$ sobe pela mesma proporção)
- *V.S.S*: quando tem correlação positiva, tem inclinação da linha de tendência positiva, e vice versa

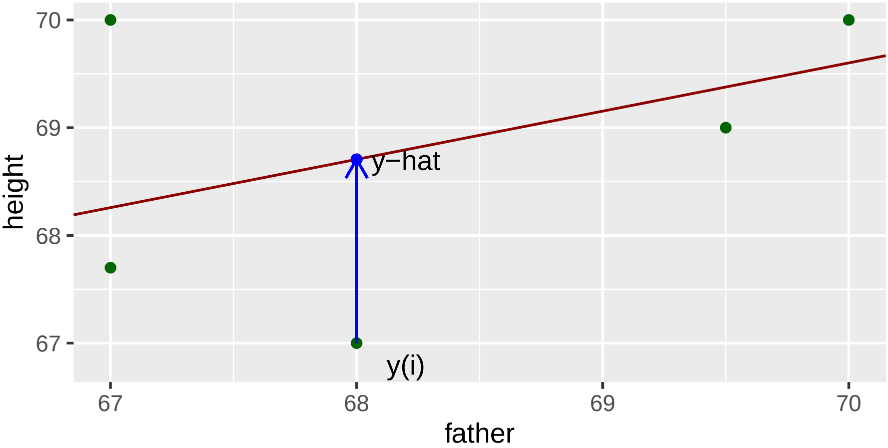
# Correlação x Causação

- Correlação: medida de associação ($y$ está associado positivamente com $x$)
- Causação: $y$ está causada por $x$
- Regressão permite julgar causação, mas correlação **só** mede associação
- Correlações espuriosas: associações entre variáveis que são fortes, mas não fazem sentido
  - Leia capítulo sobre Spurious Correlações
  - Exemplo: consumo de queijo nos EUA tem uma correlação positiva de 0.94 com número de pessoas que morreram ao se enroscarem nos lençóis
  - Fonte de viés nas análises dos dados


Per capita cheese consumption
correlates with
Number of people who died by becoming tangled in their bedsheets
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
Cheese consumed
33lbs
31.5lbs
30lbs
28.5lbs
800 deaths
600 deaths
400 deaths
200 deaths
Bedsheet tanglings
Bedsheet tanglings
Cheese consumed
tylervigen.com

# Para Calcular a Linha de Regressão – O Que Queremos?

- Uma linha que minimiza a diferença entre $y_i$ e $\hat{y}$
- Precisamos trabalhar com o quadrado da diferença
  - para não ter uma soma de 0

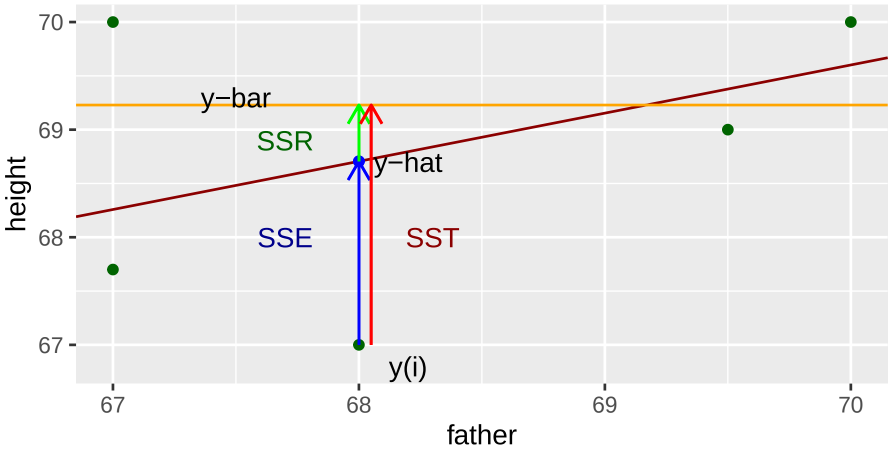


# SSE – Um Componente do Soma de Quadrados (SST)

- $SST = SSE + SSR$
- SST – Total
- SSE – Relacionados aos Erros/Resíduos
- SSR – Relacionados/Explicados pela regressão

# SST – O Que Representa?

- A variância total é a diferença entre o valor do modelo $(y_i)$ para cada valor de X e a média dos valores da variável dependente $(\bar{y})$



# Soma dos Quadrados

- Referimos a esse soma dos quadrados que queremos minimizar como **SSE**
  - Error sum of squares
- SSE como componente da soma dos quadrados total
  - SSE -– soma dos quadrados relacionados ao resíduo
  - SSR -– soma dos quadrados relacionados a regressão
- Expressão de SSE

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y})^2$$

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

# Para Determinar a Formula para $\beta_0$ e $\beta_1$

- Para minimizar a SSE (determinar a linha mais eficiente), precisamos usar cálculo
- Fazer a derivativo parcial com respeito a $\beta_0$ e $\beta_1$

$$\frac{\partial}{\partial \beta_0} SSE = \frac{\partial}{\partial \beta_1} SSE = 0$$

- Chamadas as equações normais
- Confiamos nos softwares para calcular os parâmetros da equação

# Função em R

- Função `lm` ("linear model")
- `lm(formula, data, subset, weights, na.action, method = "qr", model = TRUE, x = FALSE, y = FALSE, qr = TRUE, singular.ok = TRUE, contrasts = NULL, offset, ...)`
- Os importantes são `formula`, `data`, `subset`, `weights`, `na.action`
- `formula`: onde mostra quais variáveis você está modelando
  - Variável dependente vem primeiro
  - Separada da independente(s) por " $\sim$ "
  - Para os boys: `height ~ father`
  - `data`: data frame ou tibble que contem as variáveis
  - `subset`, `weights`: parâmetros que permitem que você customizar tratamento das variáveis
  - `na.action`: como vai tratar os dados missing na base de dados

# Função Aplicada aos Pais e Filhos

- Função `lm` produz uma lista de 12 itens em um formato especial

```
fit1 <- lm(height ~ father, data = boys)
summary(fit1)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = height ~ father, data = boys)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -9.3774 -1.4968  0.0181  1.6375  9.3987
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 38.25891    3.38663   11.30   <2e-16 ***
## father       0.44775    0.04894    9.15   <2e-16 ***
## ---
```

# O Que Diz o Modelo

$$\hat{y} = 38.259 + 0.448x$$

- Se o pai tivesse 0 altura, o filho teria 38.259 polegadas de altura
  - Não faz sentido prático, mas estabelece a base para calculo de altura
  - Para cada polegada incremental da altura do pai, o filho seria 0.448 polegadas mais alto

# Extrair os Valores dos Coeficientes

1. Usar `broom::tidy`

```
broom::tidy(fit1) %>% knitr::kable()
```

| term | estimate | std.error | statistic | p.value |
|---|---|---|---|---|
| (Intercept) | 38.2589122 | 3.3866340 | 11.297032 | 0 |
| father | 0.4477479 | 0.0489353 | 9.149788 | 0 |

2. Usar `coef`

```
coef(fit1)
```

```
## (Intercept)      father
##  38.2589122   0.4477479
```

# Previsões de Novos Valores

- Pode usar o modelo para prever novos valores da altura dos filhos
- Usar `broom::augment`

```
fit1 %>% broom::augment(newdata = tibble(father = 72))
```

```
## # A tibble: 1 x 3
##   father .fitted .se.fit
##    <dbl>   <dbl>   <dbl>
## 1     72    70.5   0.178
```