Regresssão Linear Multivariada

Mini-curso de Introdução a ML e AI

Mário Olímpio de Menezes

Maio/2020

Regressão Linear Multivariada

Regressão Linear Multivariada ou *Múltipla*

- Quando temos mais do que uma variável preditora (explicativa), a regressão linear simples se transforma em **regressão linear multivariada**.
  - Uma regressão quadrática tem duas preditoras (X e X^2).
  - A regressão cúbica tem três preditoras ($X, X^2,$ eX^3).
  - Uma regressão polinomial é um caso especial de uma regressão múltipla

Impacto da Multicolinearidade

- A habilidade de uma variável independente **adicional** melhorar o modelo de regressão está relacionada não somente à sua correlação com a variável dependente, mas também às correlações da variável independente adicional com as outras variáveis independentes já presentes no modelo.
  - **Colinearidade** é a associação, medida como correlação, entre duas variáveis independentes.
  - **Multicolinearidade** se refere à correlação entre três ou mais variáveis independentes, (evidenciada quando uma é *regredida* em relação às outras).

O impacto da multicolinearidade é reduzir qualquer poder preditivo de uma variável independente única pela extensão a qual ela está associada com outra variável independente.

Impacto da Multicolinearidade

- Conforme a colinearidade aumenta, a variância única explicada por cada variável independente diminui e o percentual de predição compartilhada aumenta.
  - Como esta predição compartilhada somente conta uma vez, a predição total *aumenta* muito mais lentamente quando variáveis altamente correlacionadas são adicionadas ao modelo.
- Para maximizar a predição de um dado número de variáveis independentes, devemos procurar aquelas que tenham baixa multicolinearidade com outras variáveis independentes mas que **também** tenham alta correlações com a variável dependente.

Criando Variáveis Adicionais

- O relacionamento básico representado na regressão múltipla é a associação *linear* entre a variável dependente (métrica) e as variáveis independentes (também métricas).
- Um problema frequentemente encontrado é a incorporação de dados não-métricos, tais como gênero, ocupação, etc., na equação de regressão.
    - A regressão múltipla é limitada a dados métricos (numéricos).
- Outro problema é a inabilidade de se representar diretamente relacionamentos não lineares.
- Quando temos estas situações, novas variáveis devem ser criadas por **transformações**:
    - Esta é a maneira de incorporarmos variáveis não-métricas ou para representar quaisquer outros efeitos além de relacionamentos não lineares.
    - Outro uso de *transformações* é para acertar violações de alguma das premissas (hipóteses) estatísticas.
- Duas razões básicas para transformarmos variáveis:
    - Melhorar ou modificar o relacionamento entre as variáveis dependente e independentes.
    - Habilitar o uso de variáveis não métricas na equação de regressão.

Exemplo 1

Montgomery, Peck e Vining - Pacoate `MPV`

A variável resposta é o calor liberado por grama de cimento, e as variáveis explicativas quanto tem de cada componente; são elas:

- Y = heat evolved in calories per gram of cement
- X1 = tricalcium aluminate
- X2 = tricalcium silicate
- X3 = tetracalcium alumino ferrite
- X4 = dicalcium silicate

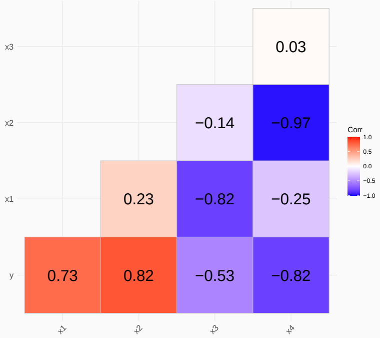
Obtendo os dados

```
> library(MPV)
```

```
> cimento <- MPV::cement
> names(cimento)
[1] "y"  "x1" "x2" "x3" "x4"
```

```
> str(cimento)
'data.frame':   13 obs. of  5 variables:
 $ y : num  78.5 74.3 104.3 87.6 95.9 ...
 $ x1: num  7 1 11 11 7 11 3 1 2 21 ...
 $ x2: num  26 29 56 31 52 55 71 31 54 47 ...
 $ x3: num  6 15 8 8 6 9 17 22 18 4 ...
 $ x4: num  60 52 20 47 33 22 6 44 22 26 ...
```

```
> library(ggcorrplot)
> ggcorrplot(cor(cimento), type = "lower", lab = TRUE,
     colors = c("blue", "white", "red"))
```



- Olhando a matriz de correlação identificamos dois pares de variáveis com correlações significativas entre si: $(x1, x3)$ correlação -0.82 e $(x2, x4)$ correlação de -0.97
- Estas variáveis, quando as adicionarmos todas ao modelo, vão *bagunçar* o algoritmo e os resultados serão comprometidos.

Construindo o Modelo

```
> modcim <- lm(y ~ x1 + x2 + x3 + x4, data = cimento)
> summary(modcim)

Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2 + x3 + x4, data = cimento)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-3.1750 -1.6709  0.2508  1.3783  3.9254

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  62.4054    70.0710   0.891   0.3991
x1            1.5511     0.7448   2.083   0.0708 .
x2            0.5102     0.7238   0.705   0.5009
x3            0.1019     0.7547   0.135   0.8959
x4           -0.1441     0.7091  -0.203   0.8441
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.446 on 8 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9824,    Adjusted R-squared:  0.9736
F-statistic: 111.5 on 4 and 8 DF,  p-value: 4.756e-07
```

- Olhando o modelo, vemos que **todos** os parâmetros estão sem significância estatística, *como tínhamos previsto* a partir dos dados da matriz de correlação: **multicolinearidade**
- Apesar disto, o modelo tem um R^2 ajustado *maravilhoso*, de 0.9736
- Mas, precisamos acertar o modelo, removendo as variáveis que não têm significância estatística.
- Começamos pela última variável, $x4$

Atualizando o Modelo

```
> modcim <- update(modcim, . ~ . - x4)
> summary(modcim)

Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2 + x3, data = cimento)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-3.2543 -1.4726  0.1755  1.5409  3.9711 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) 48.19363    3.91330  12.315 6.17e-07 ***
x1           1.69589    0.20458   8.290 1.66e-05 ***
x2           0.65691    0.04423  14.851 1.23e-07 ***
x3           0.25002    0.18471   1.354    0.209    
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.312 on 9 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9823,    Adjusted R-squared:  0.9764 
F-statistic: 166.3 on 3 and 9 DF,  p-value: 3.367e-08
```

- Usando a função update vamos *atualizar* o nosso modelo, removendo a variável $x4$
- Fazendo sumário do modelo atualizado, já identificamos uma melhora significativa nos parâmetros.
- Apenas a variável $x3$ continua sem significância estatística, e portanto, vamos removê-la do modelo.

Atualizando o Modelo

```
> modcim <- update(modcim, . ~ . - x3)
> summary(modcim)

Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2, data = cimento)

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max 
-2.893 -1.574 -1.302  1.363  4.048 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) 52.57735    2.28617   23.00 5.46e-10 ***
x1           1.46831    0.12130   12.11 2.69e-07 ***
x2           0.66225    0.04585   14.44 5.03e-08 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.406 on 10 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9787,    Adjusted R-squared:  0.9744 
F-statistic: 229.5 on 2 and 10 DF,  p-value: 4.407e-09
```

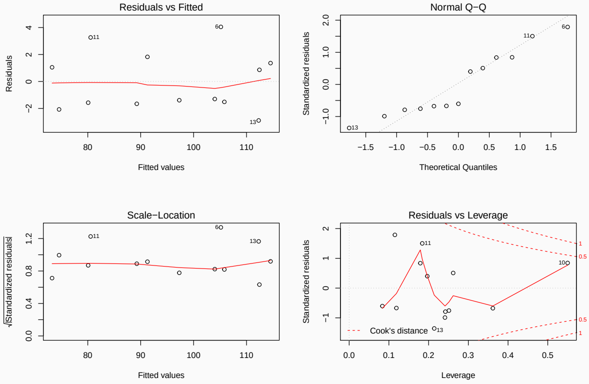
- Vemos agora que todos os parâmetros têm significância estatística, e o R^2 ajustado do modelo está *muito bom*, 0.9744.
- E também vemos que o p-value do modelo é muito bom (4.407×10^{-9}), ou seja, praticamente zero.
- Isso significa que este modelo é estatísticamente diferente do modelo nulo, ou seja, somente a aleatoriedade (sem nenhum parâmetro) **não** consegue explicar a variabilidade de y – nossa variável resposta.
- O teste com a ANOVA mostra exatamente isso. Veja o `Pr(>F)` com valor **zero** (arredondamento do $4.407 \cdot 10^{-9}$)

```
> modelonulo <- lm(y ~ 1, data = cimento)
> anova(modelonulo, modcim)
```

Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
12	2715.76308	NA	NA	NA	NA
10	57.90448	2	2657.859	229.5037	0

Diagnóstico do Modelo

```
> par(mfrow = c(2, 2))
> plot(modcim)
```



- Analisaremos os dois gráficos superiores: *Residuals vs Fitted* e *Normal Q-Q*.
- O Gráficos dos *Residuals vs Fitted values* é onde analisamos se a variabilidade dos resíduos tem dependência com os valores ajustados, se aumenta ou diminui, se demonstra algum padrão, etc. No gráfico ao lado, não conseguimos identificar este tipo de comportamento, a amplitude de variação dos resíduos é basicamente a mesma ao longo de todos os valores ajustados.
- O Gráfico *Normal Q-Q* analisamos se os resíduos têm distribuição normal. Quando isso acontece, os pontos do gráfico (topo, à direita), devem permanecer sobre a linha tracejada, sem grandes desvios, principalmente nas extremidades, o que parece acontecer.
- O Gráfico *Scale-Location* tem basicamente a mesma informação do *Residuals vs Fitted*, mas com valores absolutos dos resíduos padronizados; serve também para identificarmos dependência em relação aos valores ajustados.
- O Gráfico *Residuals vs Leverage* aponta observações que podem precisar de atenção por serem *outliers*, pontos de alta alavancagem, etc., que distorcem o ajuste, prejudicando sua qualidade. Não vamos analisar este último gráfico neste material.

Diagnóstico do Modelo

```
> library(gvlma)
> display.gvlmatests(gvlma(modcim))

ASSESSMENT OF THE LINEAR MODEL ASSUMPTIONS
USING THE GLOBAL TEST ON 4 DEGREES-OF-FREEDOM:
Level of Significance =  0.05

Call:
 gvlma(x = modcim)

                       Value p-value                   Decision
Global Stat        1.5244265  0.8223 Assumptions acceptable.
Skewness           0.5484212  0.4590 Assumptions acceptable.
Kurtosis           0.5559113  0.4559 Assumptions acceptable.
Link Function      0.0004057  0.9839 Assumptions acceptable.
Heteroscedasticity 0.4196883  0.5171 Assumptions acceptable.
```

- Apesar de os gráficos diagnósticos permitirem uma rápida inspeção visual se o modelo atende às premissas do Método dos Mínimos Quadrados (MMQ), esta análise tem um aspecto subjetivo que depende da habilidade do observador.
- Para tornar o diagnóstico mais objetivo, o pacote `gvlma` oferece uma função que faz uma avaliação global do modelo com relação ao atendimento às premissas do MMQ.
- Olhando os resultados ao lado vemos que nosso modelo atendeu a todas as premissas. Os testes estatísticos tem a hipótese nula de que o modelo atende as premissas. Pelos `p-values` maiores do que o nível de significância (0.05), todos os critérios indicam a aceitação da hipótese nula.

Exemplo 2 - Dataset hipotético

Este segundo exemplo utiliza um *dataset* hipotético com duas variáveis explicativas ($x1$ e $x2$).

Como já fiz no exemplo anterior as análises das etapas de construção e análise do modelo, comentarei apenas rapidamente a interpretação dos parâmetros do modelo – a última parte.

```r
> library(readr)
> novodf <- read_csv("datasets/dadoshipot.csv")
```

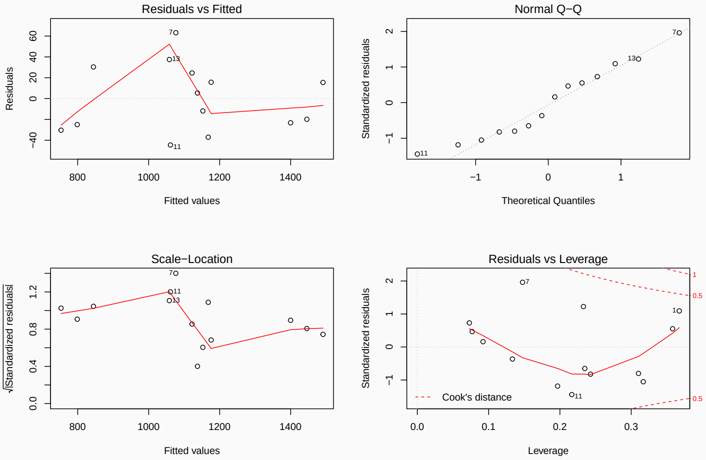
```r
> cor(novodf)
              x1          y           x2
x1  1.000000000  0.9737924 -0.002647846
y   0.973792432  1.0000000 -0.180223309
x2 -0.002647846 -0.1802233  1.000000000
```

Modelo Exemplo II

```
> summary(modhipot <- lm(y ~ x1 + x2, data = novodf))

Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2, data = novodf)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-44.584 -24.565  -3.266  22.330  63.201

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1665.9399   220.2398  -7.564 1.11e-05 ***
x1             10.7812     0.4743  22.730 1.35e-10 ***
x2            -15.6050     3.7616  -4.149  0.00162 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 34.93 on 11 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9798,	Adjusted R-squared:  0.9762
F-statistic: 267.2 on 2 and 11 DF,  p-value: 4.742e-10
```

Diagnóstico do Modelo

```
> par(mfrow = c(2, 2))
> plot(modhipot)
```



Diagnóstico do Modelo

```
> display.gvlmatests(gvlma(modhipot))

ASSESSMENT OF THE LINEAR MODEL ASSUMPTIONS
USING THE GLOBAL TEST ON 4 DEGREES-OF-FREEDOM:
Level of Significance =  0.05

Call:
 gvlma(x = modhipot)

                    Value p-value                Decision
Global Stat        1.9038  0.7535 Assumptions acceptable.
Skewness           0.3045  0.5811 Assumptions acceptable.
Kurtosis           0.4901  0.4839 Assumptions acceptable.
Link Function      0.9673  0.3254 Assumptions acceptable.
Heteroscedasticity 0.1419  0.7064 Assumptions acceptable.
```

Interpretando os resultados do modelo

```
> summary(modhipot)

Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2, data = novodf)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-44.584 -24.565  -3.266  22.330  63.201

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1665.9399   220.2398  -7.564 1.11e-05 ***
x1             10.7812     0.4743  22.730 1.35e-10 ***
x2            -15.6050     3.7616  -4.149  0.00162 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 34.93 on 11 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9798,    Adjusted R-squared:  0.9762
F-statistic: 267.2 on 2 and 11 DF,  p-value: 4.742e-10
```

```
> summary(novodf)
       x1              y                x2
 Min.   :289.3   Min.   : 722.8   Min.   :39.00
 1st Qu.:319.3   1st Qu.:1036.5   1st Qu.:40.22
 Median :319.3   Median :1140.3   Median :41.92
 Mean   :319.7   Mean   :1120.4   Mean   :42.29
 3rd Qu.:323.1   3rd Qu.:1180.5   3rd Qu.:44.85
 Max.   :349.3   Max.   :1506.8   Max.   :46.02
```

Interpretando os resultados do modelo

- O nosso modelo final tem os coeficientes -1665.9398661, 10.7811579, -15.6050128 e podemos então escrevê-lo na forma

$$y = -1665.9399 + 10.7812 \times x1 - 15.6050 \times x2$$

- Vemos que $x1$ tem um impacto de 10.7812 no valor de y para cada variação de uma unidade, mantendo-se o valor de $x2$ constante. Por outro lado, $x2$ tem um impacto negativo de -15.6050 no valor de y para cada unidade de variação, mantendo-se o valor de $x1$ constante.

Próximo Bloco

Regressão Logística