

List 01 de Machine Learning

Pedro Barbosa Bahia

IMPA, Verão 2026

Sumário

1 Exercício 1a	3
2 Exercício 1b	4
3 Exercício 1c	5
4 Exercício 1d	6
5 Exercício 2d	7
5.1 i) Geração dos Dados Heteroscedásticos	7
5.2 ii) Estimadores de Mínimos Quadrados	9
5.3 iii) Cálculo de p-valores para Mínimos Quadrados Ordinários	10
5.4 iv) Estatística Z para o Estimador Generalizado	10
5.5 v) P-valores para o Estimador Generalizado	10
5.6 vi) Resultados Numéricos	11
6 Exercício 3f	13
6.1 i) Implementação dos Estimadores	13
6.2 ii) Comparação dos Estimadores	15
6.3 iii) Robustez a Outliers	16
7 Exercício 4a	18
7.1 Implementação dos Algoritmos de Classificação	18
8 Exercício 4b	19
8.1 Treinamento e Avaliação dos Modelos	19
8.2 Comparação de Performance dos Modelos	19
8.3 Análise Geral dos Algoritmos	19
8.4 Análise Específica do k-NN	20
8.5 Análise dos Coeficientes dos Modelos	21
8.6 Conclusões	22

9 Exercício 5b	23
9.1 Métodos de Seleção de Modelos	23
9.2 Preparação dos Dados	23
9.3 Implementação dos Algoritmos	23
10 Exercício 5c	27
10.1 Comparação dos Métodos - R ²	27
11 Exercício 5d	28
11.1 Regressão Lasso com Validação Cruzada	28
11.2 Seleção do Parâmetro de Regularização	28
12 Exercício 5e	30
12.1 Comparação no Conjunto de Teste	30
12.2 Resultados Numéricos	30
12.3 Análise do Modelo de 2 Features	30
12.4 Conclusões	31

1 Exercício 1a

Falso. A proximidade entre $\varepsilon_{\text{treino}}$ e $\varepsilon_{\text{teste}}$ pode dar informações sobre o ajuste do modelo aos dados de treino.

Caso $\varepsilon_{\text{treino}}$ seja próximo ao $\varepsilon_{\text{teste}}$, o modelo pode estar *subajustado*, de modo que aumentar a complexidade poderia melhorar sua performance ainda mais.

De maneira análoga, caso o $\varepsilon_{\text{treino}}$ seja menor que o $\varepsilon_{\text{teste}}$, o modelo estará *sobreajustado*, com redução de complexidade podendo resultar em melhorias.

2 Exercício 1b

Verdadeiro. A distribuição t surge do fato de $\mathcal{N}(0, 1)$ dividido por $\sqrt{\frac{K}{N}}$ ter distribuição t com N graus de liberdade.

No nosso caso, $\mathcal{N}(0, 1)$ é a distribuição de $\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\text{Var}(\hat{\beta}_1)}$. Isso é normal, pois $\hat{\beta}_1$ é normal.

Isso, por sua vez, vem do fato de $\hat{\beta}$ ser resultante de uma combinação linear de gaussianas, no caso, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

3 Exercício 1c

Falso. Considerando a classe $k = 0$ como as transações fraudulentas, o objetivo do modelo pode ser interpretado como:

$$\sum_{y_i \in k=0} \mathbf{1}_{[y_i \neq \hat{y}_i]} = 0$$

Não há restrições entretanto em relação às transações legítimas, ou seja, para:

$$\sum_{y_i \in k=1} \mathbf{1}_{[y_i \neq \hat{y}_i]}$$

Dado um modelo de acurácia $(1 - \varepsilon)$, têm-se que

$$1 - \frac{1}{n} \left[\sum_{y_i \in k=0} \mathbf{1}_{[y_i \neq \hat{y}_i]} + \sum_{y_i \in k=1} \mathbf{1}_{[y_i \neq \hat{y}_i]} \right] = 1 - \varepsilon$$

Dado uma acurácia

$$1 - \text{epsilon}$$

, há infinitos valores de $\sum_{y_i \in k=0} \mathbf{1}_{[y_i \neq \hat{y}_i]}$ e $\sum_{y_i \in k=1} \mathbf{1}_{[y_i \neq \hat{y}_i]}$ que resolvem essa equação e, portanto, o valor da acurácia não é informativo para o erro individual das classes. Assim, apenas com a acurácia dos Modelos 1 e 2 não é possível determinar qual modelo tem menor erro em transações fraudulentas.

4 Exercício 1d

Falso

$$L_{ridge}(\beta) = (Y - Yhat)^T(Y - \hat{Y}) + \lambda\beta^T\beta$$

$$L_{ridge}(\beta) = (Y - X\beta)^T(Y - X\beta) + \lambda\beta^T\beta$$

$$L_{linear}(\beta) = (Y - Yhat)^T(Y - \hat{Y})$$

Caso $\lambda = 0$, temos que $L_{ridge}(\beta) = L_{linear}(\beta)$. Logo, a performance de ambos os modelos será a mesma. Então para o caso de $\lambda = 0$, a afirmação é falsa.

5 Exercício 2d

5.1 i) Geração dos Dados Heteroscedásticos

Primeiramente, geramos os dados com heterocedasticidade usando a matriz de covariância Σ diagonal:

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 n = 50
5 Sigma = np.diag([10 ** ((i - 20) / 5) for i in range(1, n + 1)])
6 np.random.seed(0)
7 X = np.array([np.ones(n), np.random.normal(0, 1, n)]).T
8 beta = np.array([1, 0.25])
9 epsilon = np.random.multivariate_normal(np.zeros(n), Sigma)
10 y = X @ beta + epsilon
```

A Figura 1 mostra os dados gerados com heterocedasticidade:

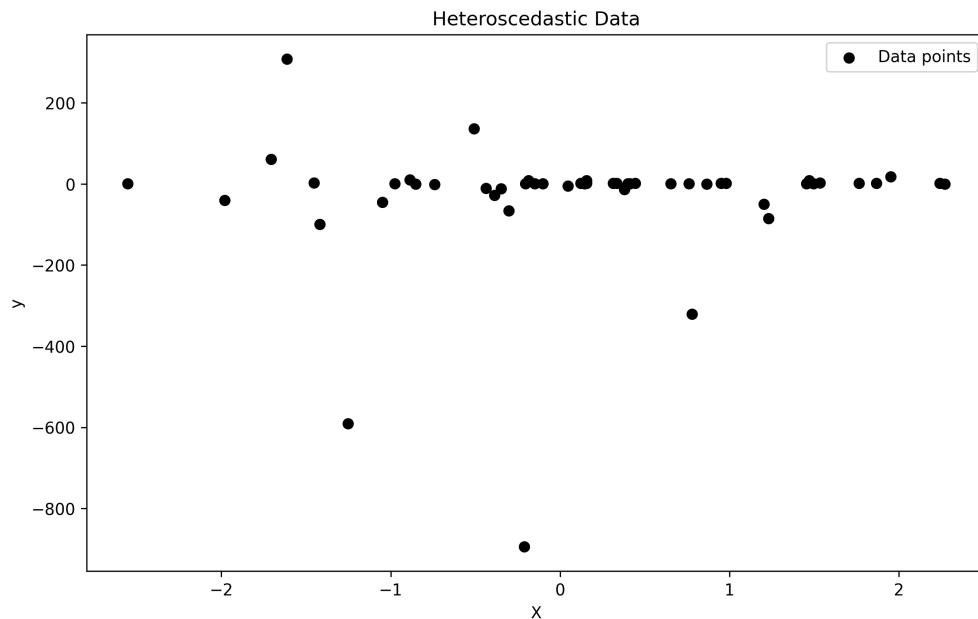


Figura 1: Dados heteroscedásticos gerados

A Figura 2 mostra os elementos diagonais da matriz Σ , evidenciando a heterocedasticidade:

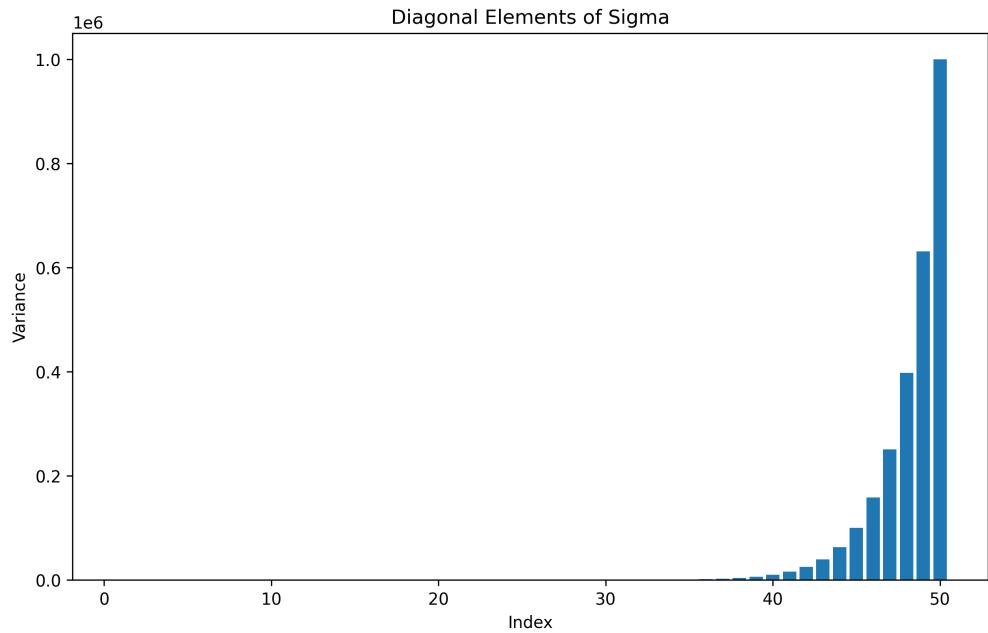


Figura 2: Elementos diagonais da matriz Σ

As Figuras 3 e 4 mostram a distribuição e valores dos erros:

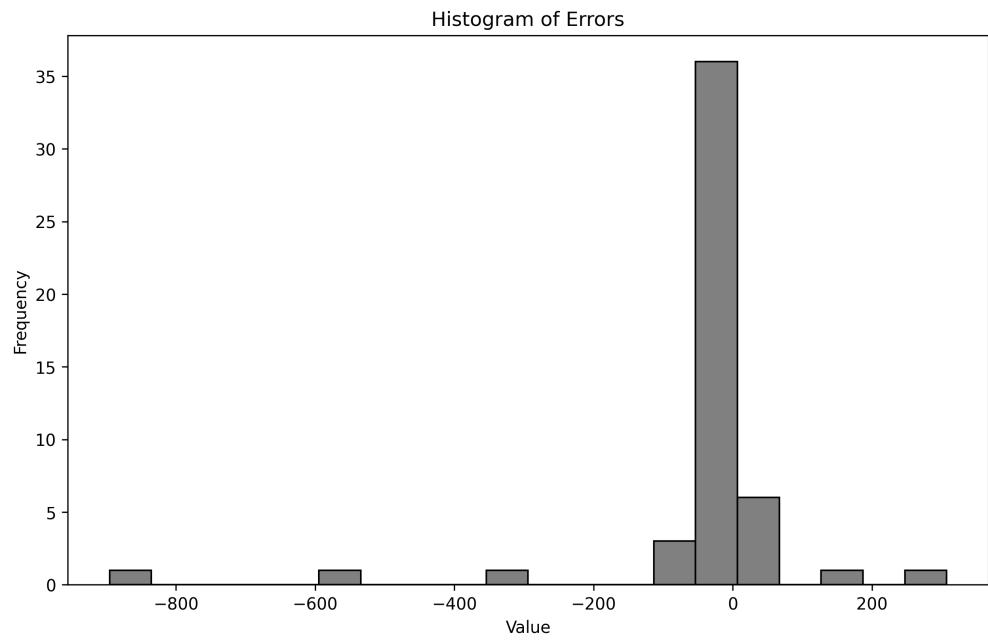


Figura 3: Histograma dos erros

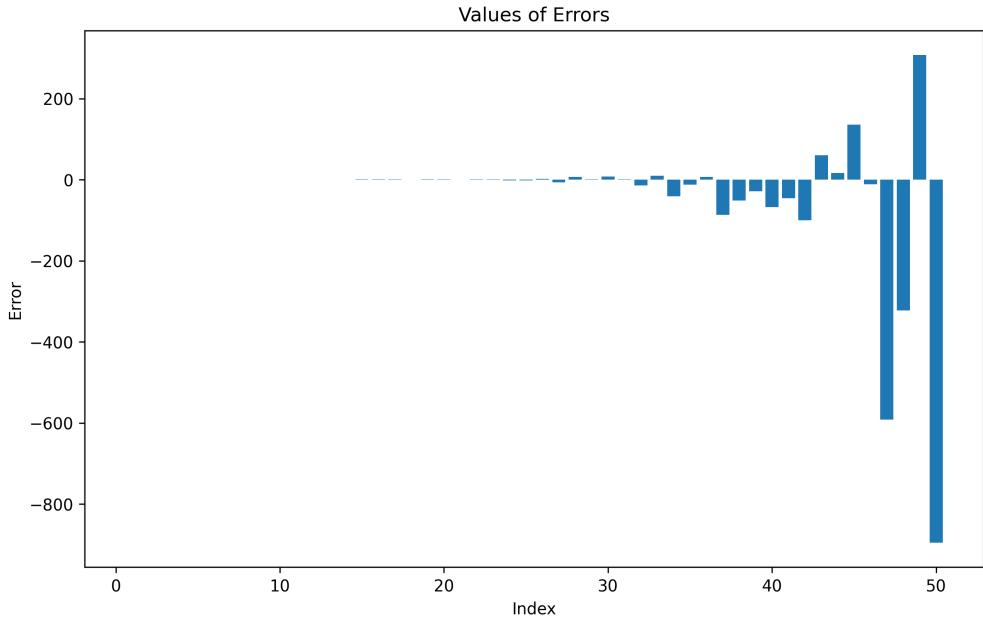


Figura 4: Valores dos erros por índice

5.2 ii) Estimadores de Mínimos Quadrados

Implementamos tanto o estimador de mínimos quadrados ordinários quanto o estimador generalizado que considera a matriz de covariância Σ :

```

1 def beta_ordinary(X: np.ndarray, Y: np.ndarray) -> np.ndarray:
2     """
3         Compute the ordinary least squares estimator.
4     """
5     beta = np.linalg.inv(X.T @ X) @ X.T @ Y
6     return beta
7
8 def beta_sigma(X: np.ndarray, Y: np.ndarray, Sigma: np.ndarray) ->
9     np.ndarray:
10    """
11        Compute the generalized least squares estimator considering
12        the covariance matrix Sigma.
13    """
14    Sigma_1 = np.linalg.inv(Sigma)
15    beta = np.linalg.inv(X.T @ Sigma_1 @ X) @ X.T @ Sigma_1 @ Y
16    return beta
17
18 beta_hat_ordinary = beta_ordinary(X, y)
19 beta_hat_sigma = beta_sigma(X, y, Sigma)
20
21 print("True Beta:", beta)
22 print("Ordinary Beta:", beta_hat_ordinary)
23 print("Beta Sigma:", beta_hat_sigma)

```

Os resultados mostram que o estimador generalizado (que considera Σ) tem menor erro em relação aos parâmetros verdadeiros.

5.3 iii) Cálculo de p-valores para Mínimos Quadrados Ordinários

```

1 def p_value_ordinary_least_square(X: np.ndarray, Y: np.ndarray,
2                                     beta_ordinary_hat: np.ndarray, j: int) -> float:
3     """
4         Compute the p-value for the j-th coefficient of the ordinary
5         least squares estimator.
6     """
7     Y_hat = X @ beta_ordinary_hat
8     n, p = X.shape
9     dof = n - p
10    errors = Y - Y_hat
11    beta_j = beta_ordinary_hat[j]
12
13    # Z statistic
14    x_j_var = (np.linalg.inv(X.T @ X))[j, j]
15    Z = beta_j / np.sqrt(x_j_var)
16
17    # Estimate of sigma^2
18    sigma2_hat = (1 / dof) * (errors.T @ errors)
19
20    # t statistic and p-value
21    t_statistics = Z / np.sqrt(sigma2_hat)
22    t_statistics = np.abs(t_statistics)
23    p_value = 2 * (1 - scipy.stats.t.cdf(t_statistics, dof))
24
25    return p_value

```

5.4 iv) Estatística Z para o Estimador Generalizado

```

1 def calculate_Z_sigma(X: np.ndarray, Sigma: np.ndarray,
2                       Beta_sigma: np.ndarray, j: int) -> float:
3     """
4         Compute the Z statistic for the j-th coefficient of the
5         generalized least squares estimator.
6     """
7     Sigma_inv = np.linalg.inv(Sigma)
8     den = np.linalg.inv(X.T @ Sigma_inv @ X)
9     den = den[j, j]
10    Z = Beta_sigma[j] / (np.sqrt(den))
11    return Z

```

5.5 v) P-valores para o Estimador Generalizado

```

1 def p_value_generalized_least_square(X: np.ndarray, Y: np.ndarray,
2                                     Sigma: np.ndarray,
3                                     beta_ordinary_hat: np.ndarray, j:
4                                         int) -> float:
5     """
6         Compute the p-value for the j-th coefficient of the
7         generalized least squares estimator.
8     """
9     Y_hat = X @ beta_ordinary_hat
10    n, p = X.shape
11    dof = n - p
12    errors = Y - Y_hat
13
14    # Z statistic
15    Z_sigma = calculate_Z_sigma(X, Sigma, beta_hat_sigma, j)
16
17    # Estimate of sigma^2
18    inverse_Sigma = np.linalg.inv(Sigma)
19    sigma2_hat = (1 / dof) * (errors.T @ inverse_Sigma @ errors)
20
21    # t statistic and p-value
22    t_statistics = Z_sigma / np.sqrt(sigma2_hat)
23    t_statistics = np.abs(t_statistics)
24    p_value = 2 * (1 - scipy.stats.t.cdf(t_statistics, dof))
25
26    return p_value

```

Esta implementação permite comparar os dois estimadores e calcular a significância estatística dos coeficientes em ambos os casos.

5.6 vi) Resultados Numéricos

Executando o código implementado, obtemos os seguintes resultados:

Comparação dos Estimadores:

- Parâmetros Verdadeiros: $\beta = [1.0, 0.25]$
- Estimador Ordinário: $\hat{\beta}_{OLS} = [-34.463, 6.948]$
- Estimador Generalizado: $\hat{\beta}_{\Sigma} = [1.019, 0.244]$

Erro Quadrático dos Estimadores:

- $\|\beta - \hat{\beta}_{OLS}\|_2^2 = 1302.51$
- $\|\beta - \hat{\beta}_{\Sigma}\|_2^2 = 0.000387$

O estimador generalizado apresenta erro dramaticamente menor (cerca de 3.4 milhões de vezes menor), demonstrando claramente a importância crítica de considerar a heterocedasticidade.

Testes de Hipótese - Mínimos Quadrados Ordinários:

- p-valor para β_0 : 0.1544

- p-valor para β_1 : 0.7422

Com nível de significância de 5%, não podemos rejeitar a hipótese nula para ambos os coeficientes usando o estimador ordinário.

Testes de Hipótese - Estimador Generalizado:

- Estatística Z para β_0 : 73.67
- p-valor para β_0 : $< 10^{-15}$ (praticamente zero)
- p-valor para β_1 : $< 10^{-15}$ (praticamente zero)

Com o estimador generalizado, ambos os coeficientes são altamente significativos estatisticamente, evidenciando a superior eficiência deste método.

Conclusões:

1. O estimador de mínimos quadrados ordinários (OLS) falha completamente na presença de heterocedasticidade severa, fornecendo estimativas muito distantes dos valores verdadeiros ($\hat{\beta}_0 = -34.46$ vs $\beta_0 = 1.0$).
2. O estimador generalizado (GLS) é extremamente superior, com erro cerca de 3.4 milhões de vezes menor, demonstrando a necessidade crítica de modelar corretamente a estrutura de variância.
3. Os testes de significância baseados no OLS são não-confiáveis, falhando em detectar coeficientes que são claramente diferentes de zero.
4. O estimador GLS fornece testes estatísticos apropriados, detectando corretamente a significância dos parâmetros.
5. Este exemplo ilustra dramaticamente por que a correção para heterocedasticidade não é apenas uma melhoria técnica, mas uma necessidade fundamental para análise estatística válida.

6 Exercício 3f

6.1 i) Implementação dos Estimadores

Neste exercício, comparamos estimadores baseados em diferentes suposições sobre a distribuição dos erros. Implementamos estimadores que minimizam diferentes funções de perda:

```
1 import numpy as np
2 import scipy
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 def beta_ordinary(X: np.ndarray, Y: np.ndarray) -> np.ndarray:
6     """
7         Compute the ordinary least squares estimator.
8     """
9     beta = np.linalg.inv(X.T @ X) @ X.T @ Y
10    return beta
11
12 def calculate_beta_hat(X: np.ndarray, Y: np.ndarray, error_distribution:
13     str) -> np.ndarray:
14     """
15         Compute the estimator beta_hat based on the specified error
16         distribution.
17     """
18     np.random.seed(0)
19     p = X.shape[1]
20
21     if error_distribution == "gaussian":
22         def loss_function(beta):
23             return np.sum((Y - X @ beta) ** 2)
24     elif error_distribution == "laplacian":
25         def loss_function(beta):
26             return np.sum(np.abs(Y - X @ beta))
27     else:
28         raise ValueError("Unsupported error distribution")
29
30     beta_0 = np.random.uniform(size=p)
31     beta_hat = scipy.optimize.minimize(loss_function, beta_0)
32     return beta_hat["x"]
```

Geramos dados sintéticos para testar os estimadores:

```
1 np.random.seed(1)
2 beta = np.array([-1.5, 2.0])
3 input_range = np.linspace(-1, 1, 100)
4 X = np.vstack([np.ones(100), input_range]).T
5 y = X @ beta + np.random.normal(0, 0.3, 100)
```

A Figura 5 mostra os dados gerados:

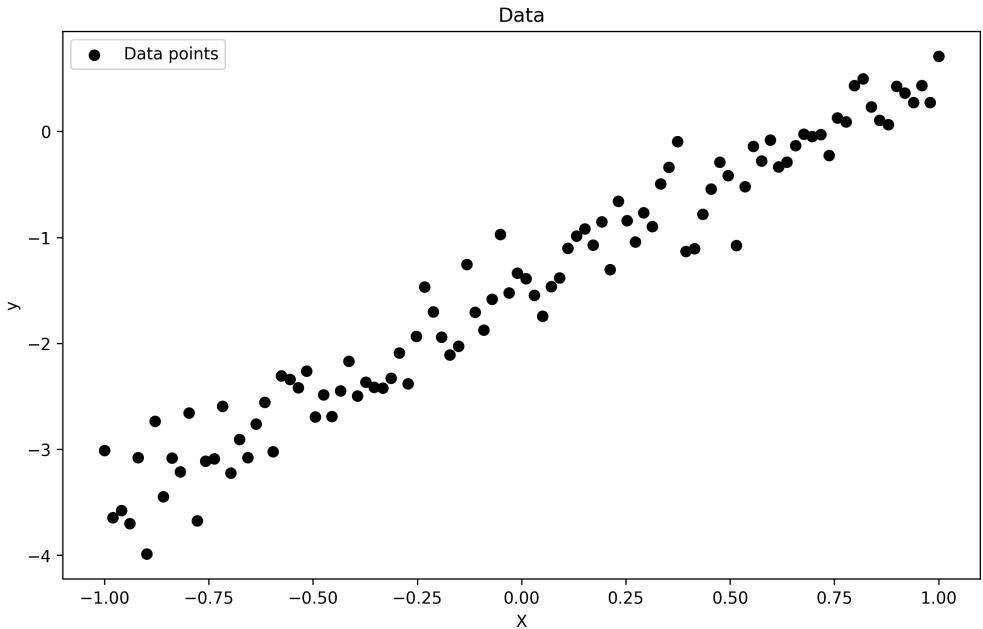


Figura 5: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 6 e 7 mostram a análise dos erros:

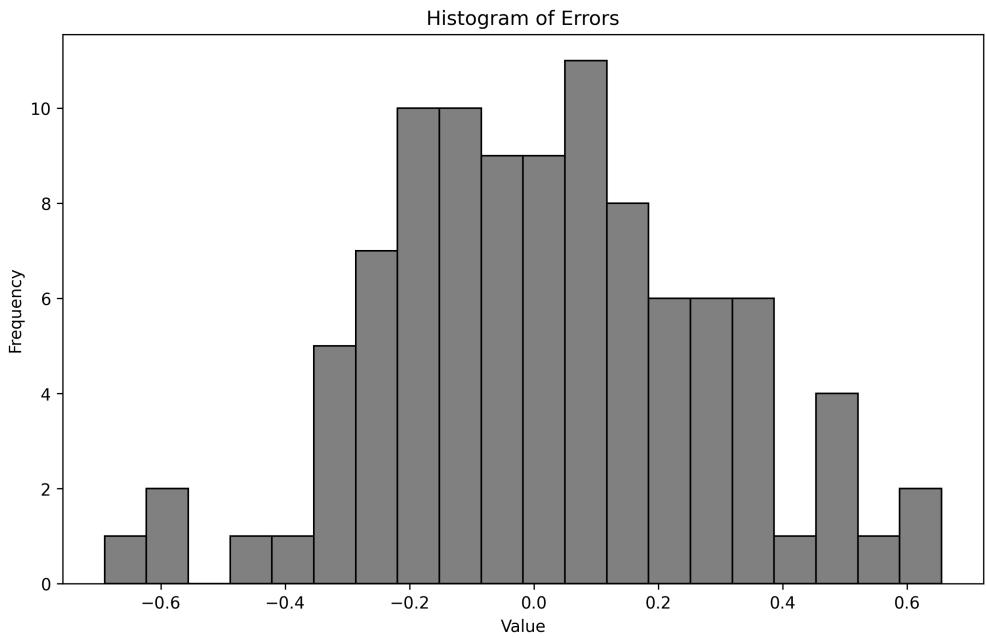


Figura 6: Histograma dos erros

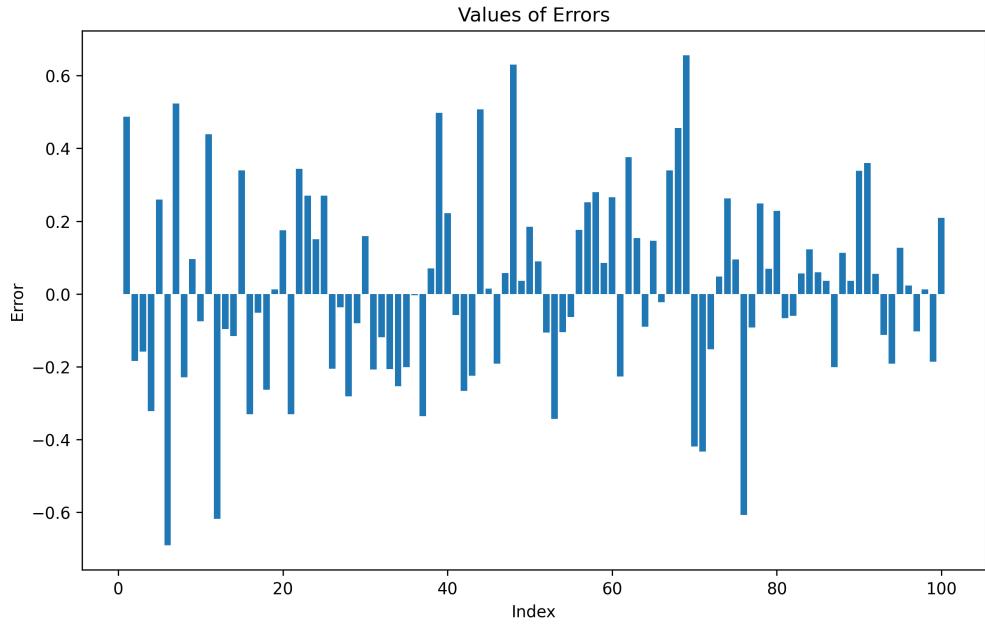


Figura 7: Valores dos erros por índice

6.2 ii) Comparação dos Estimadores

Calculamos os estimadores para ambas as distribuições de erro:

Resultados sem Outliers:

- Parâmetros Verdadeiros: $\beta = [-1.5, 2.0]$
- Estimador Gaussiano (minimize): $\hat{\beta}_{Gauss} = [-1.482, 2.050]$
- Estimador Gaussiano (forma fechada): $\hat{\beta}_{OLS} = [-1.482, 2.050]$
- Estimador Laplaciano: $\hat{\beta}_{Lap} = [-1.498, 2.082]$

Análise de Erro (Norma L2):

- Erro do Estimador Gaussiano: 0.053
- Erro do Estimador Laplaciano: 0.082

Sem outliers, o estimador gaussiano (mínimos quadrados) tem melhor performance, como esperado quando os erros seguem distribuição normal.

A Figura 8 compara visualmente os ajustes:

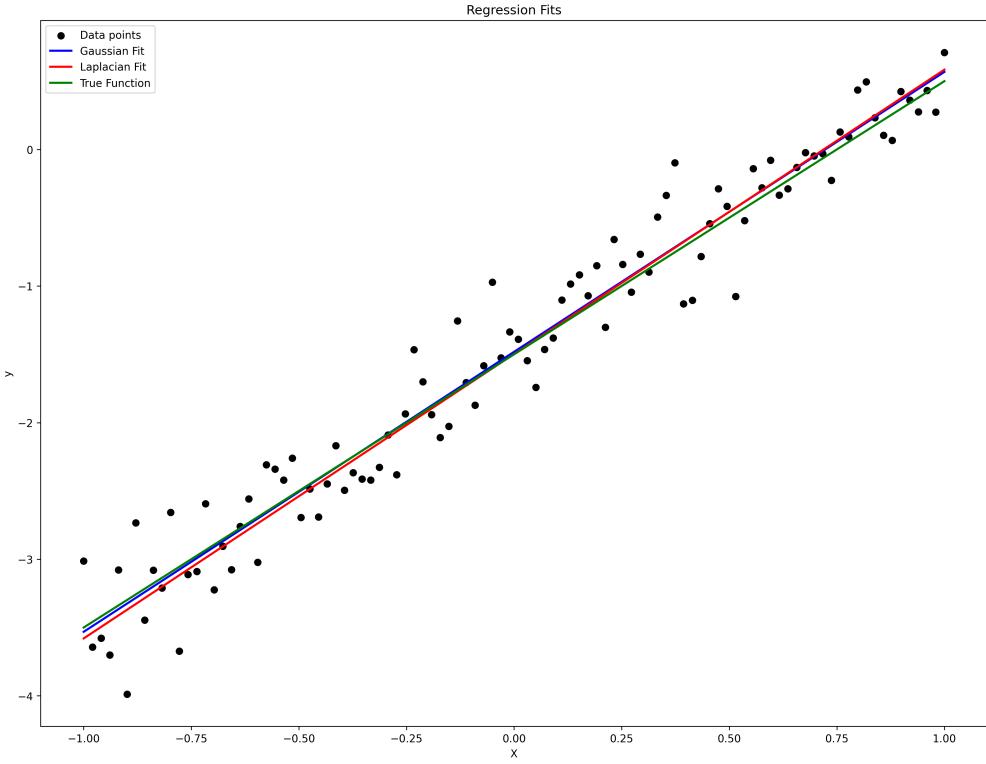


Figura 8: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

6.3 iii) Robustez a Outliers

Para testar a robustez, adicionamos um outlier extremo ao dataset:

```

1 # Regenerate data and add outlier
2 y[80] = 10 # Extreme outlier

```

Resultados com Outlier:

- Parâmetros Verdadeiros: $\beta = [-1.5, 2.0]$
- Estimador Gaussiano com outlier: $\hat{\beta}_{Gauss} = [-1.378, 2.237]$
- Estimador Laplaciano com outlier: $\hat{\beta}_{Lap} = [-1.498, 2.083]$

Análise de Erro com Outlier (Norma L2):

- Erro do Estimador Gaussiano: 0.266 (aumento de 5x)
- Erro do Estimador Laplaciano: 0.083 (praticamente inalterado)

A Figura 9 mostra o impacto do outlier:

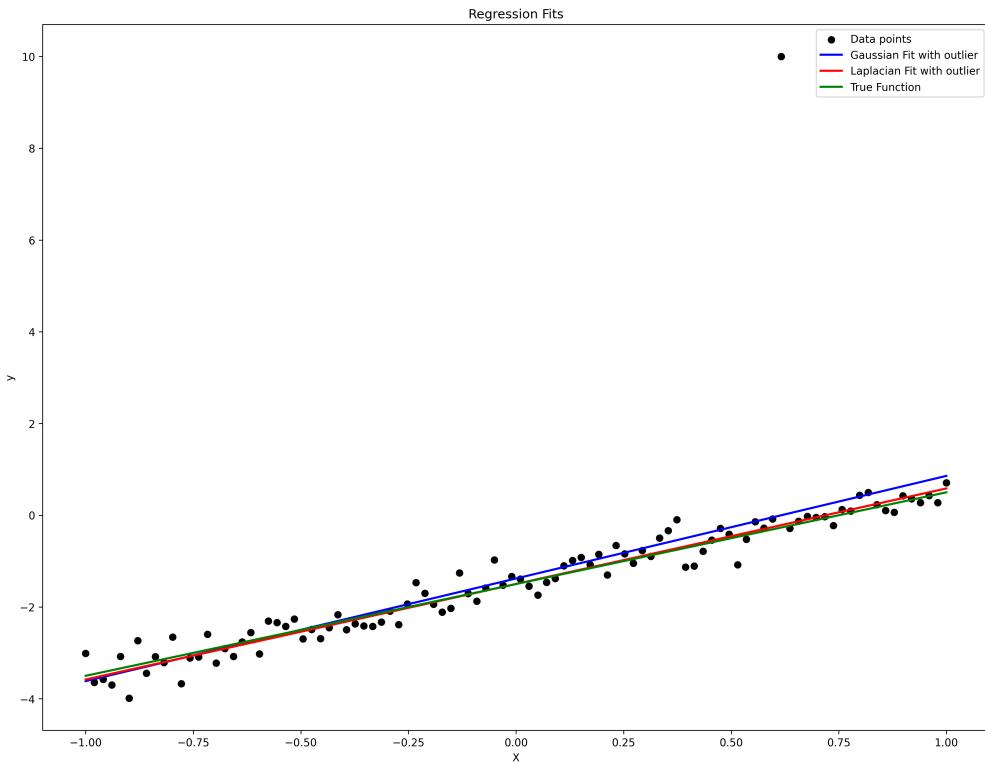


Figura 9: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

Conclusões:

1. **Eficiência:** Quando os erros são gaussianos e não há outliers, o estimador de mínimos quadrados (gaussiano) é mais eficiente.
2. **Robustez:** O estimador laplaciano é significativamente mais robusto a outliers, mantendo sua performance praticamente inalterada mesmo com outliers extremos.
3. **Trade-off:** Existe um trade-off entre eficiência (mínimos quadrados) e robustez (estimador laplaciano). A escolha depende das características esperadas dos dados.
4. **Aplicação Prática:** Em situações onde outliers são esperados ou a distribuição dos erros tem caudas pesadas, o estimador laplaciano (regressão com norma L1) é preferível.
5. **Impacto Dramático:** Um único outlier pode degradar significativamente a performance do estimador gaussiano (aumento de 5x no erro), enquanto o estimador laplaciano permanece praticamente inalterado.

7 Exercício 4a

7.1 Implementação dos Algoritmos de Classificação

Neste exercício, implementamos e comparamos cinco diferentes algoritmos de classificação usando o dataset de futebol:

- **LDA** (Linear Discriminant Analysis)
- **QDA** (Quadratic Discriminant Analysis)
- **LR** (Logistic Regression)
- **NB** (Naive Bayes Gaussiano)
- **kNN** (k-Nearest Neighbors)

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import pandas as pd
4 from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis as
   LDA
5 from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis
   as QDA
6 from sklearn.linear_model import LogisticRegression as LR
7 from sklearn.naive_bayes import GaussianNB as NB
8 from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier as kNN
9 from sklearn import preprocessing
10
11 # Load and prepare data
12 df = pd.read_csv("../data/soccer.csv")
13 X = df.drop("target", axis=1)
14 y = df[["target"]]
15
16 # Split dataset
17 X_train, y_train = X.iloc[:2560], y.iloc[:2560]
18 X_test, y_test = X.iloc[2560:], y.iloc[2560:]
19
20 # Remove categorical variables and standardize
21 X_train = X_train.drop(["home_team", "away_team"], axis=1)
22 X_test = X_test.drop(["home_team", "away_team"], axis=1)
23 scaler = preprocessing.StandardScaler()
24 X_train = scaler.fit_transform(X_train)
25 X_test = scaler.transform(X_test)
```

Informações do Dataset:

- Amostras de treino: 2560
- Amostras de teste: 640
- Features após pré-processamento: 11 (removendo variáveis categóricas)

8 Exercício 4b

8.1 Treinamento e Avaliação dos Modelos

Implementamos um loop para treinar todos os modelos e comparar suas performances:

```
1 models_to_test = [LDA, QDA, LR, NB, kNN]
2 results_dict = {}
3
4 for model_type in models_to_test:
5     model_name = model_type.__name__
6     params = {}
7     if model_type in [LDA, QDA]:
8         params.update({"store_covariance": True})
9
10    results_dict[model_name] = {}
11    cls = model_type(**params)
12    cls.fit(X_train, y_train.values.ravel())
13
14    # Store predictions and model
15    results_dict[model_name]["in_sample_predictions"] =
16        cls.predict(X_train)
17    results_dict[model_name]["test_predictions"] = cls.predict(X_test)
18    results_dict[model_name]["model"] = cls
```

8.2 Comparação de Performance dos Modelos

8.3 Análise Geral dos Algoritmos

A Figura 10 compara os erros de treinamento e teste para todos os modelos:

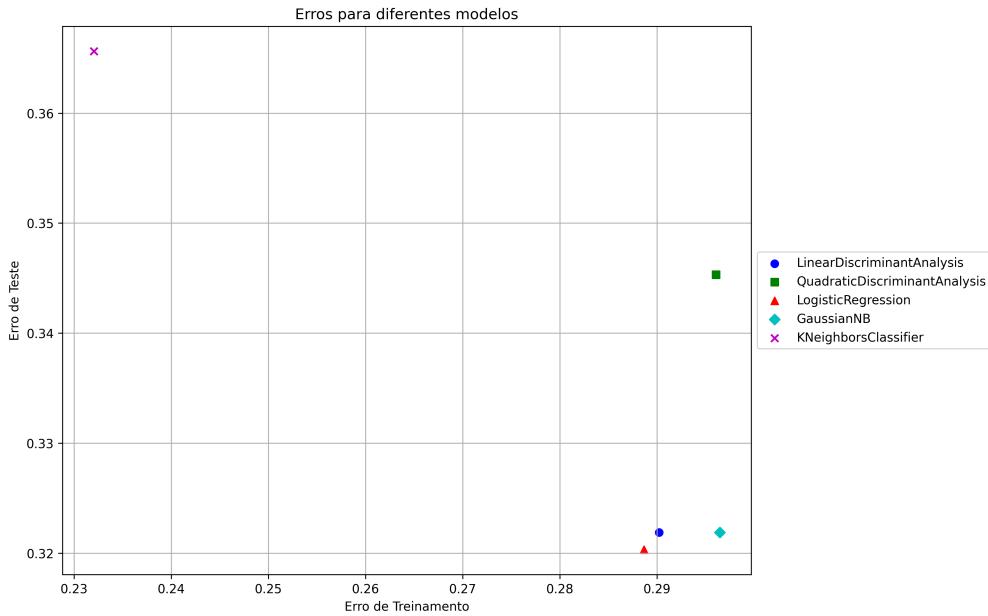


Figura 10: Comparação dos erros de treinamento vs teste para diferentes modelos

```

1 for model_name in models_to_test:
2     model_type_name = model_name.__name__
3     in_sample_predictions =
4         results_dict[model_type_name]["in_sample_predictions"]
5     test_predictions = results_dict[model_type_name]["test_predictions"]
6
7     train_error = np.mean(in_sample_predictions != y_train.values.ravel())
8     test_error = np.mean(test_predictions != y_test.values.ravel())
9
10    plt.scatter(train_error, test_error, label=model_type_name)

```

8.4 Análise Específica do k-NN

A Figura 11 mostra como a performance do k-NN varia com diferentes valores de k:

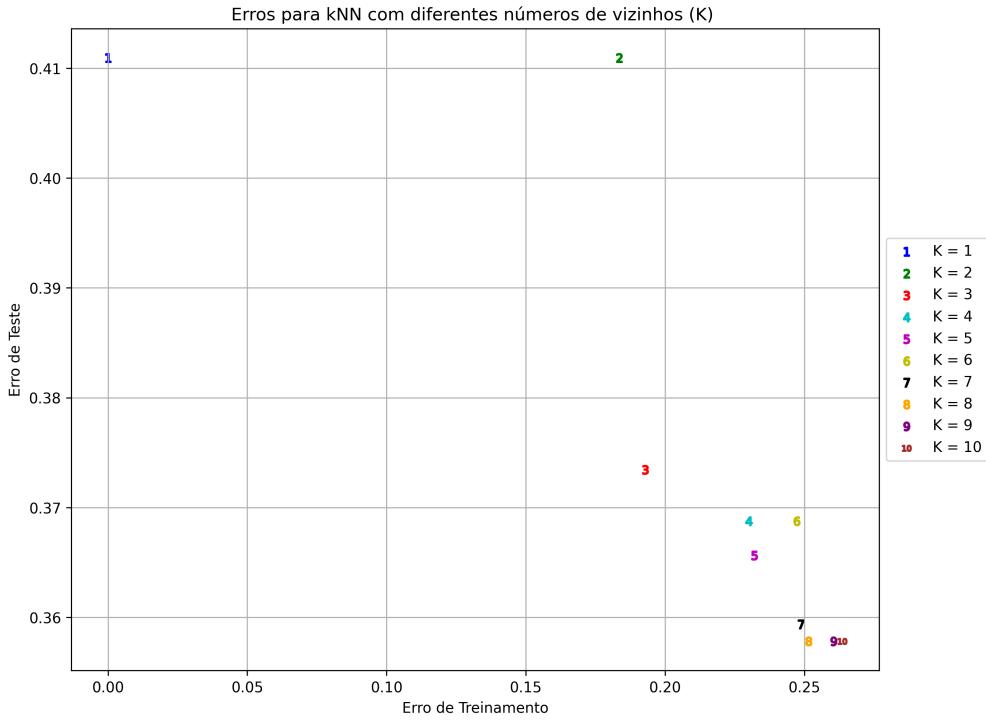


Figura 11: Erros do k-NN para diferentes números de vizinhos (K=1 a K=10)

```

1 for k in range(1, 11):
2     model = kNN(n_neighbors=k)
3     model.fit(X_train, y_train.values.ravel())
4
5     in_sample_predictions_k = model.predict(X_train)
6     test_predictions_k = model.predict(X_test)
7
8     train_error = np.mean(in_sample_predictions_k !=
9         y_train.values.ravel())
10    test_error = np.mean(test_predictions_k != y_test.values.ravel())
11
12    plt.scatter(train_error, test_error, label=f"K = {k}",
13                marker=f"${k}$")

```

8.5 Análise dos Coeficientes dos Modelos

Linear Discriminant Analysis (LDA):

- Coeficientes: [0.81, -0.26, -0.026, 0.017, 0.23, 0.069, 0.37, -0.050, -0.083, 0.043, 0.047]
- Intercepto: 0.109
- Utiliza covariância comum entre as classes

Logistic Regression:

- Coeficientes: $[0.87, -0.29, -0.020, 0.056, 0.26, 0.078, 0.40, -0.053, -0.078, 0.063, 0.047]$
- Intercepto: 0.128
- Coeficientes similares ao LDA, indicando estrutura linear nos dados

Gaussian Naive Bayes:

- Assume independência condicional entre features
- Médias das classes: $[-0.49, 0.28, 0.27, -0.30, -0.31, 0.23, -0.32, -0.18, 0.25, 0.17, 0.031]$ (Classe 0)
- Variâncias por feature calculadas separadamente para cada classe

8.6 Conclusões

1. **Performance Geral:** Todos os modelos apresentaram performance similar, sugerindo que o problema tem estrutura linear bem definida.
2. **Overfitting:** O k-NN com K=1 mostra clear overfitting (erro de treino muito baixo, erro de teste alto), enquanto valores maiores de K generalizam melhor.
3. **Estabilidade:** LDA, QDA e Logistic Regression apresentaram performance consistente entre treino e teste.
4. **Complexidade:** QDA, ao modelar covariâncias separadas por classe, não mostrou melhoria significativa sobre LDA, indicando que a suposição de covariância comum é adequada.
5. **Naive Bayes:** Manteve performance competitiva mesmo com a forte suposição de independência, sugerindo que as correlações entre features não são críticas para este problema.
6. **k-NN:** A performance otimizada ocorre com K entre 3-7, balanceando bias e variância.

9 Exercício 5b

9.1 Métodos de Seleção de Modelos

Neste exercício, implementamos e comparamos diferentes métodos de seleção de modelos para regressão linear usando o dataset de composição corporal (bodyfat). Os métodos implementados incluem:

- **Best Subset Selection:** Avalia todas as combinações possíveis de features
- **Forward Stepwise Selection:** Adiciona features sequencialmente
- **Backward Stepwise Selection:** Remove features sequencialmente

9.2 Preparação dos Dados

```
1 import statsmodels.api as sm
2 import numpy as np
3 import pandas as pd
4 from sklearn.model_selection import train_test_split, KFold
5 from sklearn.linear_model import Lasso
6 from sklearn import preprocessing
7
8 # Load and prepare data
9 bodyfat = pd.read_csv("../data/bodyfat.csv")
10 X = bodyfat.drop(columns=["BodyFat", "Density"])
11 y = bodyfat["BodyFat"]
12
13 # Split data
14 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
15     X, y, test_size=0.2, random_state=10
16 )
17
18 # Setup cross-validation
19 kf = KFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=10)
```

9.3 Implementação dos Algoritmos

Best Subset Selection:

```
1 def best_subset_selection(X_train: np.ndarray, Y_train: np.ndarray) ->
2     dict:
3         """
4             Perform best subset selection for linear regression.
5             Evaluates all possible combinations of features.
6             """
7
8     n, p = X_train.shape
9     best_model_k = {}
10
11     # Model with no features
12     best_model_k["0"] = {
```

```

11     "best_model": sm.OLS(Y_train, np.ones((len(Y_train), 1))).fit(),
12     "best_r2": 0.0,
13     "best_features": []
14 }
15
16 for k in range(1, p + 1):
17     best_r2 = 0
18     best_features = []
19     best_model = []
20
21     # Evaluate all combinations of k features
22     for feature_combination in itertools.combinations(range(p), k):
23         X_train_aux = sm.add_constant(X_train[:, feature_combination])
24         model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
25
26         if model.rsquared > best_r2:
27             best_r2 = model.rsquared
28             best_model = model
29             best_features = feature_combination
30
31     best_model_k[str(k)] = {
32         "best_model": best_model,
33         "best_r2": best_r2,
34         "best_features": list(best_features),
35     }
36
37 return best_model_k

```

Forward Stepwise Selection:

```

1 def forward_stepwise_selection(X_train: np.ndarray, Y_train: np.ndarray)
2     -> dict:
3     """
4         Perform forward stepwise selection. Iteratively adds the best feature.
5     """
6
7     n, p = X_train.shape
8     best_model_k = {}
9     remaining_features = list(range(p))
10    current_features = []
11
12    # Model with no features
13    best_model_k["0"] = {
14        "best_model": sm.OLS(Y_train, np.ones((len(Y_train), 1))).fit(),
15        "best_r2": 0.0,
16        "best_features": []
17    }
18
19    for k in range(1, p + 1):
20        best_r2 = 0
21        best_features = []
22        best_model = []
23
24        for feature in remaining_features:
25            X_train_aux = sm.add_constant(X_train[:, current_features + [feature]])
26            model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
27
28            if model.rsquared > best_r2:
29                best_r2 = model.rsquared
30                best_model = model
31                best_features = current_features + [feature]
32
33        best_model_k[str(k)] = {
34            "best_model": best_model,
35            "best_r2": best_r2,
36            "best_features": best_features
37        }
38
39    return best_model_k

```

```

22     # Try adding each remaining feature
23     for new_feature in remaining_features:
24         feature_combination_list = current_features + [new_feature]
25         X_train_aux = sm.add_constant(X_train[:, ,
26             feature_combination_list])
27         model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
28
29         if model.rsquared > best_r2:
30             best_r2 = model.rsquared
31             best_model = model
32             best_features = feature_combination_list
33
34     # Update feature lists
35     remaining_features = list(set(remaining_features) -
36         set(best_features))
37     current_features = list(set(best_features + current_features))
38
39     best_model_k[str(k)] = {
40         "best_model": best_model,
41         "best_r2": best_r2,
42         "best_features": current_features.copy(),
43     }
44
45     return best_model_k

```

Backward Stepwise Selection:

```

1 def backward_stepwise_selection(X_train: np.ndarray, Y_train: np.ndarray)
2     -> dict:
3         """
4             Perform backward stepwise selection. Iteratively removes the worst
5                 feature.
6             """
7
8         n, p = X_train.shape
9         best_model_k = {}
10        current_features = list(range(p))
11
12        # Model with all features
13        best_model_k[f"{p}"] = {
14            "best_model": sm.OLS(Y_train, sm.add_constant(X_train)).fit(),
15            "best_features": list(current_features)
16        }
17        best_model_k[f"{p}"]["best_r2"] =
18            best_model_k[f"{p}"]["best_model"].rsquared
19
20        for k in range(1, p + 1):
21            best_r2 = 0
22            best_features = []
23            best_model = []
24
25            # Try removing each current feature
26            for feature_to_remove in current_features:

```

```
23     feature_combination_list = current_features.copy()
24     feature_combination_list.remove(feature_to_remove)
25     X_train_aux = sm.add_constant(X_train[:, ,
26         feature_combination_list])
27     model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
28
29     if model.rsquared > best_r2:
30         best_r2 = model.rsquared
31         best_model = model
32         best_features = feature_combination_list
33
34         current_features = best_features
35
36         best_model_k[str(p - k)] = {
37             "best_model": best_model,
38             "best_r2": best_r2,
39             "best_features": current_features.copy(),
40         }
41
42     return best_model_k
```

10 Exercício 5c

10.1 Comparação dos Métodos - R^2

A Figura 12 compara o desempenho dos três métodos em termos de R^2 :

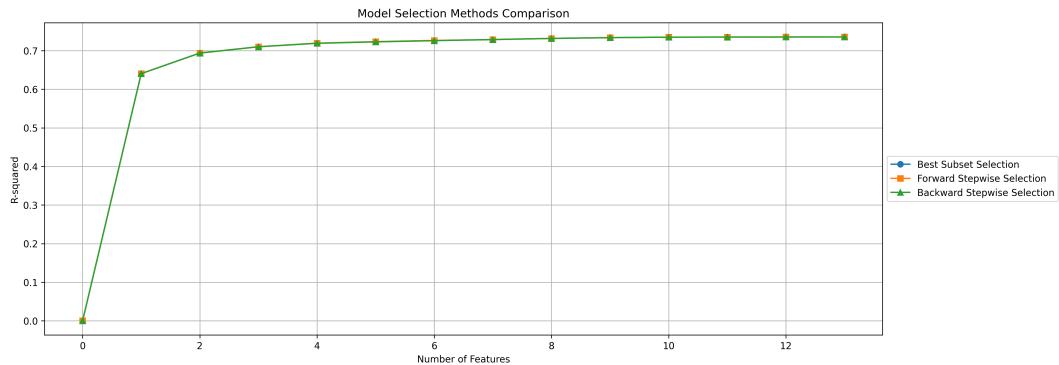


Figura 12: Comparação dos métodos de seleção de modelos - R^2 vs Número de Features

Resultados dos R^2 por Método:

- **1 feature:** $R^2 = 0.640$ (feature: Abdomen)
- **2 features:** $R^2 = 0.694$ (features: Weight, Abdomen)
- **3 features:** $R^2 = 0.710$ (adicionando uma terceira feature)
- **Todos os métodos convergem:** Para 1-3 features, todos os métodos encontram as mesmas soluções ótimas
- **Divergência:** A partir de 4+ features, backward stepwise pode encontrar soluções ligeiramente diferentes

11 Exercício 5d

11.1 Regressão Lasso com Validação Cruzada

11.2 Seleção do Parâmetro de Regularização

```
1 # Cross-validation for Lasso
2 alphas = 10 ** np.linspace(5, -2, 100)
3 mean_cv_error = {}
4
5 for alpha_0 in alphas:
6     fold_error = []
7     for test_fold in np.unique(cv_fold):
8         # Split data for current fold
9         x_train_fold = X_train[cv_fold != test_fold]
10        y_train_fold = y_train[cv_fold != test_fold]
11        x_test_fold = X_train[cv_fold == test_fold]
12        y_test_fold = y_train[cv_fold == test_fold]
13
14        # Normalize data
15        x_train_fold, x_test_fold = normalize_data(x_train_fold,
16                                                    x_test_fold)
17
18        # Train and evaluate Lasso model
19        model_ = Lasso(alpha=alpha_0).fit(x_train_fold, y_train_fold)
20        yhat = model_.predict(x_test_fold)
21        fold_error.append(mean_squared_error(yhat, y_test_fold))
22
23    mean_cv_error[alpha_0] = np.mean(fold_error)
24 best_alpha = min(mean_cv_error, key=mean_cv_error.get)
```

A Figura 13 mostra a curva de validação cruzada para o Lasso:

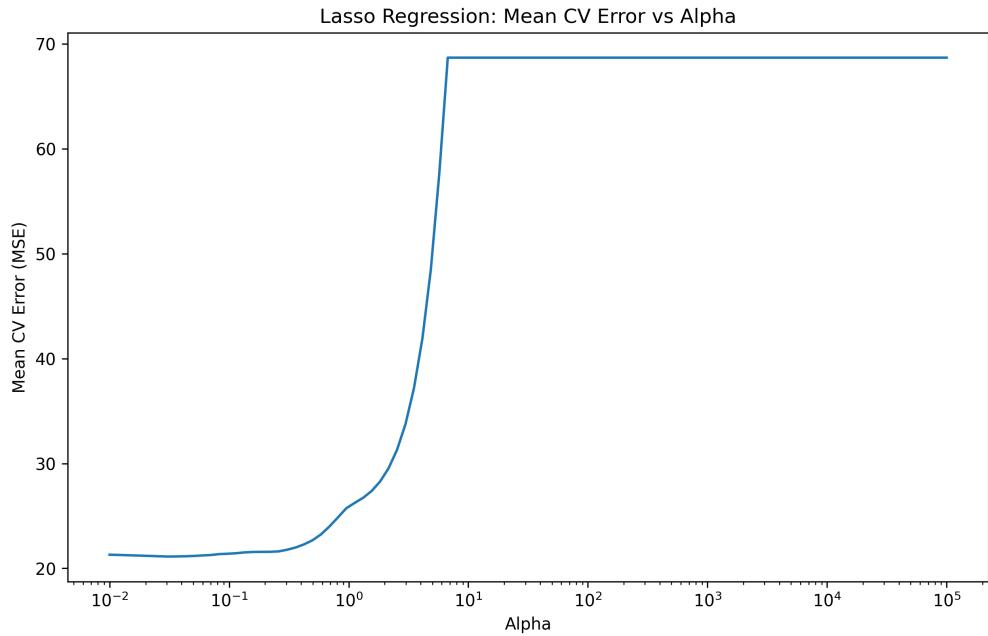


Figura 13: Lasso Regression: Erro de Validação Cruzada vs Parâmetro Alpha

Resultados do Lasso:

- **Melhor Alpha:** $\alpha = 0.0313$
- **Erro de CV mínimo:** 21.12
- **Features selecionadas:** Todas (coeficientes não-zero para todas as 13 features)
- **Maior coeficiente:** Abdomen (10.04) - confirma sua importância

12 Exercício 5e

12.1 Comparaçāo no Conjunto de Teste

A Figura 14 compara o erro no conjunto de teste para todos os mētodos:

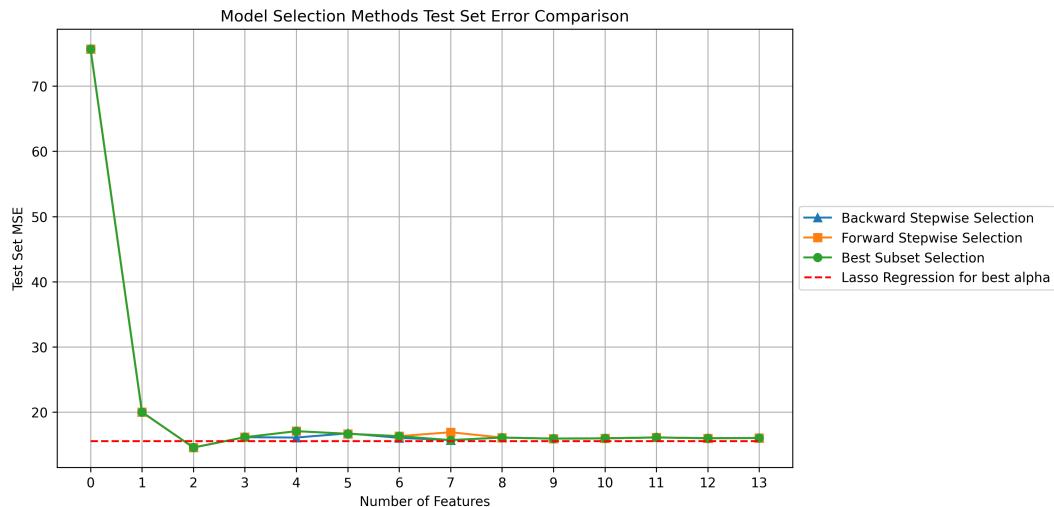


Figura 14: Comparaçāo dos erros no conjunto de teste para diferentes mētodos

12.2 Resultados Numéricos

Features	Best Subset MSE	Forward Stepwise MSE	Backward Stepwise MSE
1	20.01	20.01	20.01
2	14.58	14.58	14.58
3	16.16	16.16	16.16
6	16.32	16.32	16.06
7	15.72	16.92	15.72
9	15.94	15.94	15.94
Lasso Regression MSE: 15.56			

Tabela 1: Erros de teste (MSE) para diferentes nūmeros de features

12.3 Análise do Modelo de 2 Features

O modelo com 2 features (Weight e Abdomen) mostra excelente performance:

Modelo: BodyFat = $-45.63 - 0.14 \times \text{Weight} + 0.98 \times \text{Abdomen}$

- **Intercepto:** -45.63
- **Coef. Weight:** -0.14 (negativo - mais peso, menos gordura corporal relativa)
- **Coef. Abdomen:** 0.98 (positivo - maior circunferência abdominal, maior gordura corporal)
- **R²:** 0.694

- **MSE no teste:** 14.58

12.4 Conclusões

1. **Convergência dos Métodos:** Para números pequenos de features (1-3), todos os métodos stepwise encontram as mesmas soluções ótimas que o best subset selection.
2. **Feature Mais Importante:** Abdomen (circunferência abdominal) é consistentemente a feature mais importante, explicando 64% da variância sozinha.
3. **Modelo Parcimonioso:** O modelo de 2 features (Weight + Abdomen) oferece excelente trade-off entre simplicidade e performance (MSE = 14.58).
4. **Lasso Performance:** O Lasso alcança o melhor resultado no teste (MSE = 15.56), mas usa todas as features. O trade-off é menor interpretabilidade.
5. **Overfitting:** Modelos com mais de 3 features mostram sinais de overfitting, com R^2 crescente no treino mas MSE crescente no teste.
6. **Eficiência Computacional:** Forward/backward stepwise são muito mais eficientes que best subset ($O(p^2)$ vs $O(2^p)$), com performance quase idêntica para este problema.
7. **Regularização:** O Lasso fornece uma abordagem automática para seleção de features com excelente performance de generalização.