

# Lista 01 - Machine Learning IMPA

Pedro Bahia

23 de janeiro de 2026

## Conteúdo

<b>1</b>	<b>Exercício 1a</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Exercício 1b</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Exercício 1c</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Exercício 1d</b>	<b>6</b>
<b>5</b>	<b>Exercício 1e</b>	<b>7</b>
<b>6</b>	<b>Exercício 2a</b>	<b>8</b>
<b>7</b>	<b>Exercício 2b</b>	<b>9</b>
7.1	i . . . . .	9
7.2	ii . . . . .	9
7.3	iii . . . . .	9
7.4	iv . . . . .	10
<b>8</b>	<b>Exercício 2c</b>	<b>11</b>
8.1	i . . . . .	11
8.2	ii . . . . .	11
8.3	iii . . . . .	12
<b>9</b>	<b>Exercício 2d</b>	<b>13</b>
9.1	i . . . . .	13
9.2	ii . . . . .	15
9.3	iii . . . . .	16
9.4	iv . . . . .	17
9.5	v . . . . .	17
<b>10</b>	<b>Exercício 3a</b>	<b>19</b>

<b>11 Exercício 3b</b>	<b>20</b>
<b>12 Exercício 3c</b>	<b>21</b>
<b>13 Exercício 3d</b>	<b>22</b>
<b>14 Exercício 3e</b>	<b>23</b>
14.1 i . . . . .	23
14.2 ii . . . . .	23
14.3 iii . . . . .	23
<b>15 Exercício 3f</b>	<b>24</b>
15.1 i) Implementação dos Estimadores . . . . .	24
15.2 ii) Comparação dos Estimadores . . . . .	26
15.3 iii) Robustez a Outliers . . . . .	27
<b>16 Exercício 4a</b>	<b>29</b>
<b>17 Exercício 4b</b>	<b>30</b>
17.1 Implementação dos Algoritmos de Classificação . . . . .	30
17.2 Treinamento e Avaliação dos Modelos . . . . .	31
<b>18 Exercício 4c</b>	<b>32</b>
<b>19 Exercício 4d</b>	<b>33</b>
19.1 Análise Específica do k-NN . . . . .	33
<b>20 Exercício 5a</b>	<b>34</b>
<b>21 Exercício 5b</b>	<b>35</b>
21.1 Métodos de Seleção de Modelos . . . . .	35
21.2 Implementação dos Algoritmos . . . . .	35
<b>22 Exercício 5c</b>	<b>44</b>
22.1 Comparação dos Métodos - $R^2$ . . . . .	44
<b>23 Exercício 5d</b>	<b>45</b>
23.1 Regressão Lasso com Validação Cruzada . . . . .	45
23.2 Seleção do Parâmetro de Regularização . . . . .	45
<b>24 Exercício 5e</b>	<b>47</b>
24.1 Comparação de Erros de Teste . . . . .	47
24.2 Ranking dos Métodos . . . . .	47
24.3 Análise dos Resultados . . . . .	48
<b>25 Exercício 5f</b>	<b>49</b>

## 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 melhoras.

## 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

$$1 - \epsilon$$

, 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 acurácias dos Modelos 1 e 2 não é possível determinar qual modelo tem menor erro em transações fraudulentas.

## 4 Exercício 1d

Verdadeiro

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

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

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

## 5 Exercício 1e

### Verdadeira

A equação dada pela fórmula do intervalo de confiança:

$$\left[ \hat{\beta}_j - 2\sqrt{\hat{\sigma}^2[(X^T X)^{-1}]_{jj}}, \hat{\beta}_j + 2\sqrt{\hat{\sigma}^2[(X^T X)^{-1}]_{jj}} \right]$$

é derivada do fato de  $\hat{\beta}$  ter uma distribuição normal. Isso vem do fato da hipótese de que o erro é normal.

Caso ela não seja feita, os intervalos de confiança gerados via *bootstrap* são mais adequados, pois são derivados a partir da distribuição inferida diretamente dos dados. Neste caso, a hipótese não-paramétrica é mais geral e preferível.

### Justificativa:

- **Abordagem paramétrica:** Assume que os erros seguem distribuição normal, permitindo o uso da distribuição t de Student para construir intervalos de confiança analíticos.
- **Abordagem não-paramétrica (bootstrap):** Não assume distribuição específica dos erros, utilizando reamostragem dos dados para estimar a distribuição empírica dos parâmetros.
- **Vantagem do bootstrap:** Mais robusto quando as suposições paramétricas são violadas, especialmente em casos de não-normalidade dos erros.

## 6 Exercício 2a

Dado que a variância de  $\varepsilon$  é:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \text{Cov}(\varepsilon_1, \varepsilon_1) & \text{Cov}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) & \cdots & \text{Cov}(\varepsilon_1, \varepsilon_n) \\ \text{Cov}(\varepsilon_2, \varepsilon_1) & \text{Cov}(\varepsilon_2, \varepsilon_2) & \cdots & \text{Cov}(\varepsilon_2, \varepsilon_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(\varepsilon_n, \varepsilon_1) & \text{Cov}(\varepsilon_n, \varepsilon_2) & \cdots & \text{Cov}(\varepsilon_n, \varepsilon_n) \end{pmatrix}$$

Tal que  $\text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = \mathbb{E}[(\varepsilon_i - \mu_i)(\varepsilon_j - \mu_j)]$ .

Assumir a independência dos erros implica que  $\text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$  para  $i \neq j$ . Isso resulta em uma matriz de covariância diagonal, os elementos fora da diagonal são todos zero.

Já assumir a homocedasticidade implica que a variância dos erros é constante, ou seja,

$$\text{Var}(\varepsilon_i) = \text{Var}(\varepsilon_j) = \sigma^2, \text{ para todo } i, j$$

Ou seja,  $\text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$  para todo  $i$ . Assim, os elementos na diagonal da matriz de covariância são todos iguais a  $\sigma^2$ .

Portanto, sob as suposições de independência e homocedasticidade dos erros, a matriz de covariância  $\Sigma$  assume a forma:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma^2 \end{pmatrix} = \sigma^2 I_n$$

onde  $I_n$  é a matriz identidade de ordem  $n$ .



## 7 Exercício 2b

### 7.1 i

A função de perda ponderada pela matriz de covariância dos erros é dada por:

$$\hat{\beta}_{\Sigma} = \arg \min_{\beta} (Y - X\beta)^T \Sigma^{-1} (Y - X\beta)$$

Esta função é convexa em relação a  $\beta$ , pois, sendo  $\Sigma^{-1}$  é uma matriz positiva definida e a função quadrática  $(Y - X\beta)^T (Y - X\beta)$  estritamente convexa, seu produto também é estritamente convexo.

Assim, para encontrar o estimador  $\hat{\beta}_{\Sigma}$ , derivamos a função de perda em relação a  $\beta$  e igualamos a zero a derivada:

$$\frac{d\hat{\beta}_{\Sigma}}{d\beta} (Y - X\beta)^T \Sigma^{-1} (Y - X\beta) = [-2X^T \Sigma^{-1} (Y - X\beta)] = 0$$

Resolvendo para  $\beta$ , obtemos:

$$X^T \Sigma^{-1} Y = X^T \Sigma^{-1} X \beta$$

$$\hat{\beta}_{\Sigma} = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Y$$

### 7.2 ii

Como  $(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1}$  é uma constante em relação a  $Y$ , e sabemos que  $Y = X\beta + \varepsilon$ , onde  $\mathbb{E}[\varepsilon] = 0$  e  $\mathbb{E}[Y] = X\beta$ , temos:

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}_{\Sigma}] = \mathbb{E}[(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Y]$$

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}_{\Sigma}] = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} \mathbb{E}[Y]$$

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}_{\Sigma}] = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} X \beta$$

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}_{\Sigma}] = \beta$$

### 7.3 iii

$(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1}$  é uma constante em relação a  $Y$  e pode ser fatorado para fora da operação de variância como sua transposta multiplicando pela direita. Além disso, sabemos que  $\mathbb{V}(Y) = \Sigma$ , temos:

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}_{\Sigma}) = \mathbb{V}((X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Y)$$

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}_{\Sigma}) = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} \mathbb{V}(Y) \Sigma^{-1} X (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1}$$

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}_{\Sigma}) = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} \Sigma \Sigma^{-1} X (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1}$$

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}_{\Sigma}) = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1}$$

#### 7.4 iv

Sendo o  $\varepsilon$  uma variável aleatória distribuída  $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ ,  $Y$  uma i.i.d com  $Y \sim \mathcal{N}(X\beta, \Sigma)$  e  $\Sigma$  e  $X$  fixos, o estimador  $\hat{\beta}_\Sigma$  é uma combinação linear de variáveis aleatórias normais. Portanto,  $\hat{\beta}_\Sigma$  também é uma variável aleatória normal. Assim, temos que:

$$\hat{\beta}_\Sigma \sim \mathcal{N}(\mathbb{E}[\hat{\beta}_\Sigma], \mathbb{V}(\hat{\beta}_\Sigma))$$

$$\hat{\beta}_\Sigma \sim \mathcal{N}(\beta, (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1})$$

## 8 Exercício 2c

### 8.1 i

Como  $\Sigma$  é uma matriz diagonal e positiva definida, sua inversa  $\Sigma^{-1}$  também será uma matriz diagonal, cujo elementos são os inversos dos elementos diagonais de  $\Sigma$ . Sua fatoração  $\Sigma^{-1/2}$  também será uma matriz diagonal, cujos elementos são as raízes quadradas dos elementos de  $\Sigma^{-1}$ . Por fim, a transposta de  $\Sigma^{-1/2}$  será igual a  $\Sigma^{-1/2}$ .

Assim, podemos reescrever a função de perda ponderada como:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= (y - X\beta)^T \Sigma^{-1} (y - X\beta) \\ &= (y - X\beta)^T \Sigma^{-1/2} \Sigma^{-1/2} (y - X\beta) \\ &= (\Sigma^{-1/2} y - \Sigma^{-1/2} X\beta)^T (\Sigma^{-1/2} y - \Sigma^{-1/2} X\beta)\end{aligned}$$

Novamente, como  $\Sigma^{-1/2}$  é uma matriz diagonal, cada elemento é dos vetores é multiplicado pelo respectivo elemento diagonal de  $\Sigma^{-1/2}$ . Enfim, expandindo a soma temos:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \sum_{i=1}^n \left( \frac{1}{\sigma_{ii}} y_i - \frac{1}{\sigma_{ii}} X_i \beta \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_{ii}^2} (y_i - X_i \beta)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n w_i^2 (y_i - X_i \beta)^2 \quad \text{onde } w_i = \frac{1}{\sigma_{ii}} \\ &= \sum_{i=1}^n w_i^2 \left( y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p X_{ij} \beta_j \right)^2\end{aligned}$$

### 8.2 ii

Os pesos da função de perda  $w_i = \frac{1}{\sqrt{\Sigma_{ii}}}$  ponderam a amostra  $i$  pelo inverso da variância do erro, de modo a normalizar as contribuições das amostras para a função de perda total. Assim, amostras com maior variância, ou seja, com maior incerteza e dificuldade de ajuste, terão menor impacto na função de perda, enquanto amostras com menor variância terão mais.

### 8.3 iii

De modo análogo à seção i), dado que  $\Sigma$  é positiva definida, podemos reescrever a função de perda ponderada pela matriz de covariância dos erros

$$\mathcal{L} = (\Sigma^{-1/2}y - \Sigma^{-1/2}X\beta)^T(\Sigma^{-1/2}y - \Sigma^{-1/2}X\beta) = (\tilde{Y} - \tilde{X}\beta)^T(\tilde{Y} - \tilde{X}\beta)$$

onde  $\tilde{Y} = \Sigma^{-1/2}y$  e  $\tilde{X} = \Sigma^{-1/2}X$ .

Entretanto, como os elementos fora das diagonais não são nulos, o somatório é expandido como

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij}(y_i - X_i\beta)^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij}(y_i - \beta_0 - \sum_{k=1}^p X_{ik}\beta_k)^2$$

## 9 Exercício 2d

### 9.1 i

Os dados com heterocedasticidade usando a matriz de covariância  $\Sigma$  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 +
6     1)])
7 np.random.seed(0)
8 X = np.array([np.ones(n), np.random.normal(0, 1, n)]).T
9 beta = np.array([1, 0.25])
10 epsilon = np.random.multivariate_normal(np.zeros(n), Sigma)
11 y = X @ beta + epsilon
```

A Figura 1 mostra os dados gerados com heterocedasticidade:

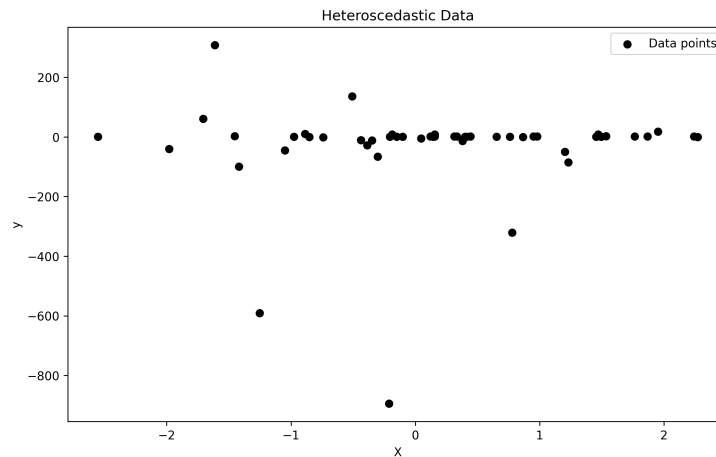


Figura 1: Dados heteroscedásticos gerados

A Figura 2 mostra os elementos diagonais da matriz  $\Sigma$ , evidenciando a heterocedasticidade:

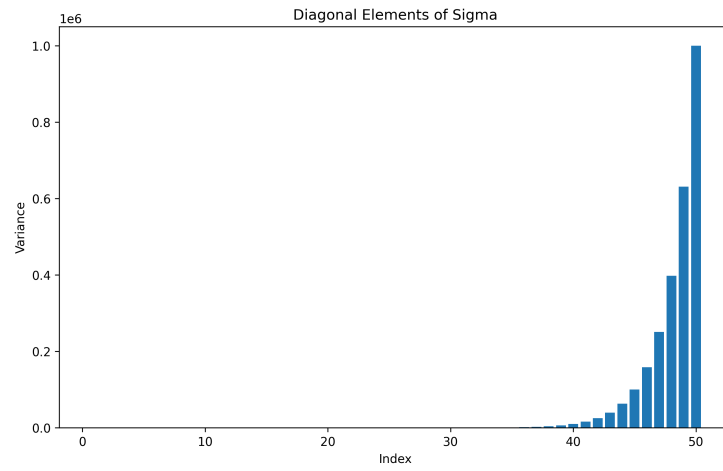


Figura 2: Elementos diagonais da matriz  $\Sigma$

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

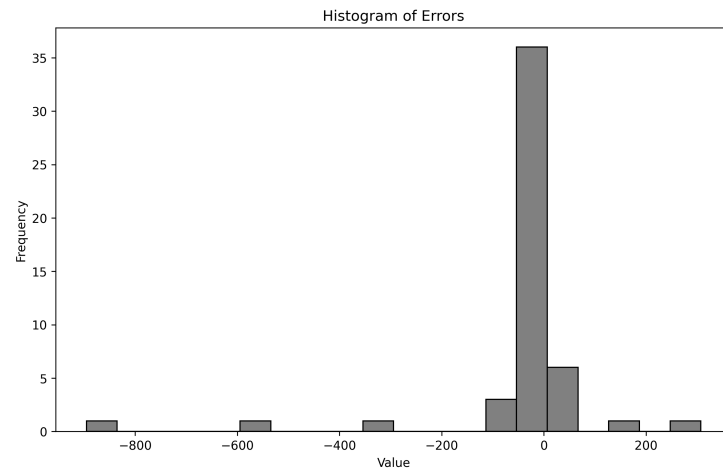


Figura 3: Histograma dos erros

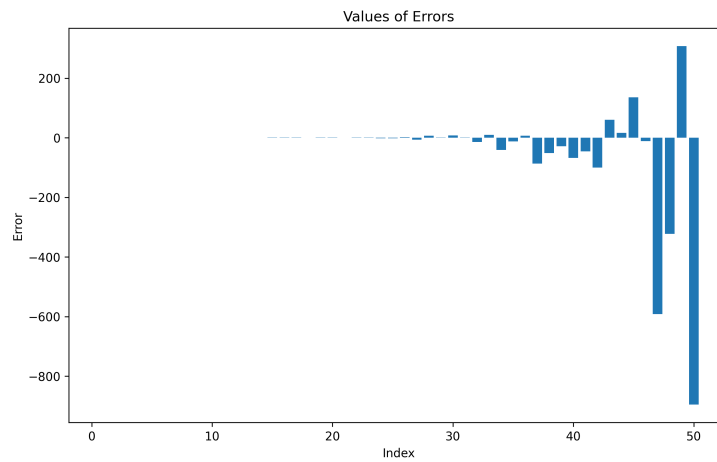


Figura 4: Valores dos erros por índice

## 9.2 ii

Tanto estimador de mínimos quadrados ordinários quanto o estimador generalizado que considera a matriz de covariância  $\Sigma$  foram implementados com o código à seguir:

```

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) -> np.ndarray:
9     """
10    Compute the generalized least squares estimator
11    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
16    @ Y
17    return beta
18
19 beta_hat_ordinary = beta_ordinary(X, y)
20 beta_hat_sigma = beta_sigma(X, y, Sigma)

```

### 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:

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

### 9.3 iii

```

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

```

#### Testes de Hipótese - Mínimos Quadrados Ordinários:

- p-valor para  $\beta_0$ : 0.1544
- p-valor para  $\beta_1$ : 0.7422

Não podemos descartar a hipótese nula para ambos os coeficientes ao nível de significância de 5%.



## 9.4 iv

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

- Estatística  $Z_{\Sigma}$  para  $\beta_0$ : 73.67

## 9.5 v

Condicionado em  $X$ , o termo da diagonal  $i$  do denominador de  $Z$  é a raiz quadrada da variância do estimador generalizado  $\hat{\beta}_{\Sigma}$ .

$$\text{Variância de } \hat{\beta} = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} = \begin{pmatrix} \text{Var}(\beta_0) & \text{Cov}(\beta_0, \beta_1) \\ \text{Cov}(\beta_0, \beta_1) & \text{Var}(\beta_1) \end{pmatrix}$$

Na hipótese  $H_0$  de  $\beta_0 = 0$ , temos que  $\hat{\beta}_{\Sigma} \sim \mathcal{N}(\beta_0, \text{Var}(\beta_0))$ . Assim, a estatística  $Z$  é dada por:

$$Z_{\Sigma} = \frac{\hat{\beta}_{\Sigma}}{\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta}_{\Sigma})}}$$

Para obtermos o p-valor, fazemos  $Z/\sqrt{\sigma^2}$ , onde  $\sigma^2 = \frac{1}{n-p-1} \varepsilon^T \Sigma^{-1} \varepsilon$

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\beta}_{\Sigma}) &= \text{Var}((X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Y) \\ &= (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} \text{Var}(Y) \Sigma^{-1} X (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} \\ &= (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} \Sigma \Sigma^{-1} X (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} \\ &= (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} \end{aligned}$$

Calculando o p-valor com o código abaixo:

```
1 def p_value_generalized_least_square(X: np.ndarray, Y: np.
2                                     ndarray,
3                                     Sigma: np.ndarray,
```

```

3                                     beta_ordinary_hat: np.
ndarray, j: int) -> float:
4     """
5     Compute the p-value for the j-th coefficient of the
6     generalized least squares estimator.
7     """
8     Y_hat = X @ beta_ordinary_hat
9     n, p = X.shape
10    dof = n - p
11    errors = Y - Y_hat
12
13    # Z statistic
14    Z_sigma = calculate_Z_sigma(X, Sigma, beta_hat_sigma, j)
15
16    # Estimate of sigma^2
17    inverse_Sigma = np.linalg.inv(Sigma)
18    sigma2_hat = (1 / dof) * (errors.T @ inverse_Sigma @
19    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.

#### Testes de Hipótese - Estimador Generalizado:

- p-valor para  $\beta_0$ : 0.0
- p-valor para  $\beta_1$ : 0.0

## 10 Exercício 3a

$$Y_i|X_i \sim \text{Laplace}(\beta^T x_i, b)$$

$$\epsilon \sim \text{Laplace}(0, b)$$

$$Y_i|X_i = Y = \beta^T X + \epsilon$$

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(Y) &= \mathbb{E}(\beta^T X + \epsilon) = \mathbb{E}(\beta^T X) + \mathbb{E}(\epsilon) \\ &= \beta^T X + 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Var}(Y) &= \text{Var}(\beta^T X + \epsilon) = \text{Var}(\beta^T X) + \text{Var}(\epsilon) \\ &= 0 + b = b\end{aligned}$$

Como toda combinação linear de variáveis aleatórias com distribuição de Laplace resulta em uma distribuição de Laplace,  $Y$  é uma variável aleatória de Laplace com parâmetros  $\text{Laplace}(\beta^T X, b)$ .

Função de perda (likelihood):

Dado que  $Y$  é iid, temos que:

$$P(Y|X, \beta) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{2b} \exp\left(-\frac{|Y_i - \beta^T X_i|}{b}\right)$$

## 11 Exercício 3b

$$\begin{aligned}\log P(Y|X, \beta) &= \log \prod_{i=1}^n \frac{1}{2b} \exp \left( -\frac{|Y_i - \beta^T X_i|}{b} \right) \\&= \sum_{i=1}^n \log \left( \frac{1}{2b} \exp \left( -\frac{|Y_i - \beta^T X_i|}{b} \right) \right) \\&= \sum_{i=1}^n \left( \log \frac{1}{2b} - \frac{|Y_i - \beta^T X_i|}{b} \right) \\&= n \log \frac{1}{2b} - \frac{1}{b} \sum_{i=1}^n |Y_i - \beta^T X_i|\end{aligned}$$

Como  $n \log \frac{1}{2b}$  é constante em relação a  $\beta$ , é possível retirar essa parte da função de perda para otimização. O mesmo pode ser dito para o fator  $\frac{1}{b}$ .

## 12 Exercício 3c

$$\begin{aligned}\epsilon &\stackrel{iid}{\sim} \mathcal{N}(0, 1) \\ Y &= X\beta + \epsilon\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\ell(y|X\beta, \sigma^2) &= \prod_i^n \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i - X_i\beta}{\sigma}\right)^2} \\ &= \frac{1}{\sigma^n(\sqrt{2\pi})^n} \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum (y_i - X_i\beta)^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(y|\mu, \sigma^2) &= -\log(\ell(y|\mu, \sigma^2)) \\ &= -\log \left[ \frac{1}{\sigma^n(\sqrt{2\pi})^n} \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i^n (y_i - X_i\beta)^2} \right] \\ &= \log(\sigma^n(\sqrt{2\pi})^n) + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_i^n (y_i - X_i\beta)^2 \\ \mathcal{L}(y|\mu, \sigma^2) &\approx \sum_i^n (y_i - X_i\beta)^2\end{aligned}$$

**Vantagem:** em caso de outliers, em que o erro do valor estimado muito alto, o termo associado à será elevado ao quadrado, resultando em maiores impactos na função de perda. Isso não acontece com a função de perda da distribuição Laplace, onde o erro é considerado linearmente. Assim, a função de perda baseada na distribuição Laplace é mais robusta a outliers.

### 13 Exercício 3d

A regra de atualização do gradiente descendente para a função de perda baseada na distribuição Laplace é dada por:

$$\begin{aligned}\beta^{(t+1)} &= \beta^{(t)} - \eta \nabla_{\beta} \mathcal{L}(\beta^{(t)}) \\ &= \beta^{(t)} - \eta \left( \sum_{i=1}^n \text{sign}(Y_i - X_i^T \beta^{(t)}) X_i \right) \\ &= \beta^{(t)} + \eta \sum_{i=1}^n \text{sign}(Y_i - X_i^T \beta^{(t)}) X_i\end{aligned}$$

## 14 Exercício 3e

### 14.1 i

O modelo com maior passo será o Laplaciano pois o gradiente da função gaussiana é proporcional ao erro, enquanto o gradiente da função Laplaciana não é. Para ela, o erro define apenas o sinal do gradiente, e não sua magnitude.

### 14.2 ii

Para um mesmo  $\beta$  e uma amostra de treino, a direção de ambos os gradientes será a mesma, já que ambos os gradientes **dependem apenas do sinal do erro**.

Já para novas iterações, a direção pode ser diferente já que ambos os gradientes terão magnitude diferente e resultarão em atualizações diferentes de  $\beta$ .

### 14.3 iii

Para o caso com mais de uma amostra, a direção do gradiente gaussiano será dada pela soma ponderada de cada erro, enquanto a direção do gradiente Laplaciano será dada pela soma dos sinais de cada erro. Assim, a direção do gradiente pode divergir entre os dois modelos, dependendo dos erros de cada amostra. Por exemplo, se uma amostra tiver um erro muito alto para uma direção enquanto outras duas tiverem erros baixos na direção oposta, o gradiente gaussiano tenderá a seguir a direção da amostra com maior erro, enquanto o gradiente Laplaciano tenderá a seguir a direção das duas amostras com erros menores.

## 15 Exercício 3f

### 15.1 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: str) -> np.ndarray:
13    """
14    Compute the estimator beta_hat based on the specified
  error distribution.
15    """
16    np.random.seed(0)
17    p = X.shape[1]
18
19    if error_distribution == "gaussian":
20        def loss_function(beta):
21            return np.sum((Y - X @ beta) ** 2)
22    elif error_distribution == "laplacian":
23        def loss_function(beta):
24            return np.sum(np.abs(Y - X @ beta))
25    else:
26        raise ValueError("Unsupported error distribution")
27
28    beta_0 = np.random.uniform(size=p)
29    beta_hat = scipy.optimize.minimize(loss_function, beta_0
  )
30    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:



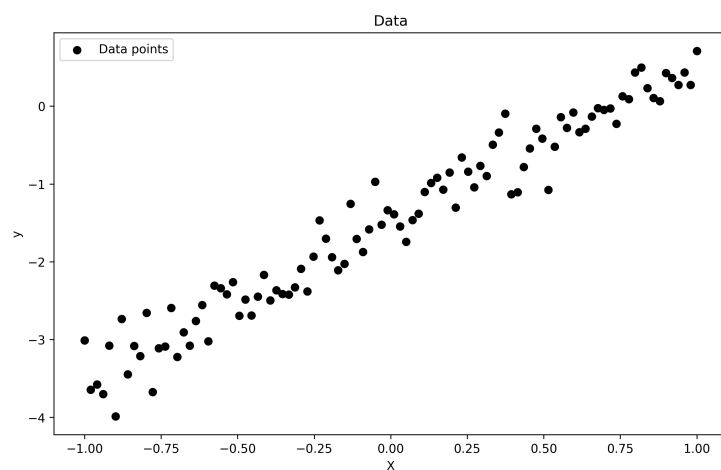


Figura 5: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 6 e 7 mostram a análise dos erros:

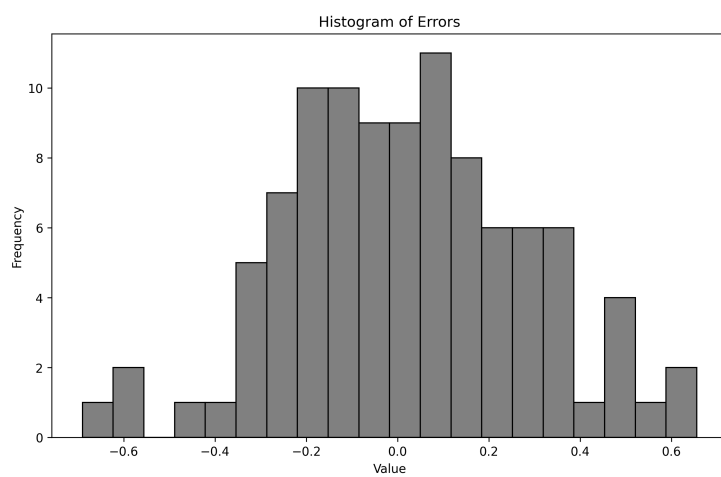


Figura 6: Histograma dos erros



Figura 7: Valores dos erros por índice

## 15.2 **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:

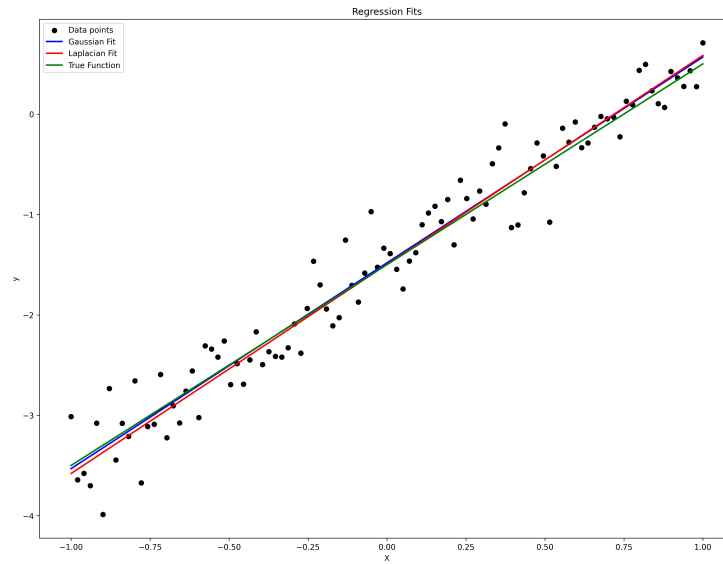


Figura 8: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

### 15.3 **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:

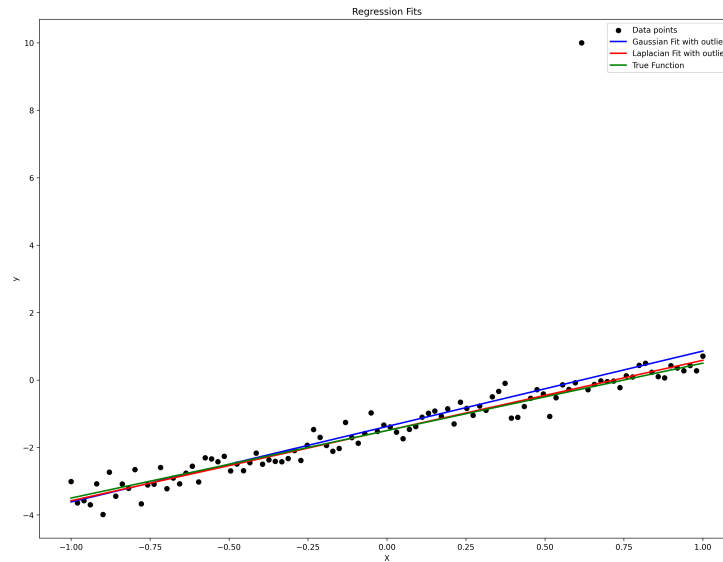


Figura 9: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

#### 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.

## 16 **Exercício 4a**

O modelo knn necessita que as features sejam normalizadas pois ele usa uma métrica de distância para encontrar os vizinhos mais próximos. Se as features não forem normalizadas, aquelas com escalas maiores podem dominar a métrica de distância, fazendo com que o algoritmo não funcione corretamente.

## 17 Exercício 4b

### 17.1 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)

## 17.2 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"] = cls.
predict(X_train)
16    results_dict[model_name]["test_predictions"] = cls.
predict(X_test)
17    results_dict[model_name]["model"] = cls
```

### 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

## 18 Exercício 4c

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

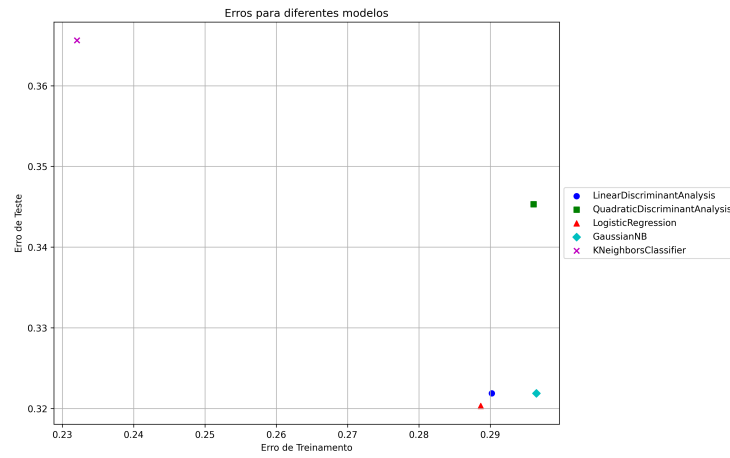


Figura 10: Comparação dos erros de treinamento vs teste para diferentes modelos



## 19 Exercício 4d

### 19.1 Análise Específica do k-NN

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

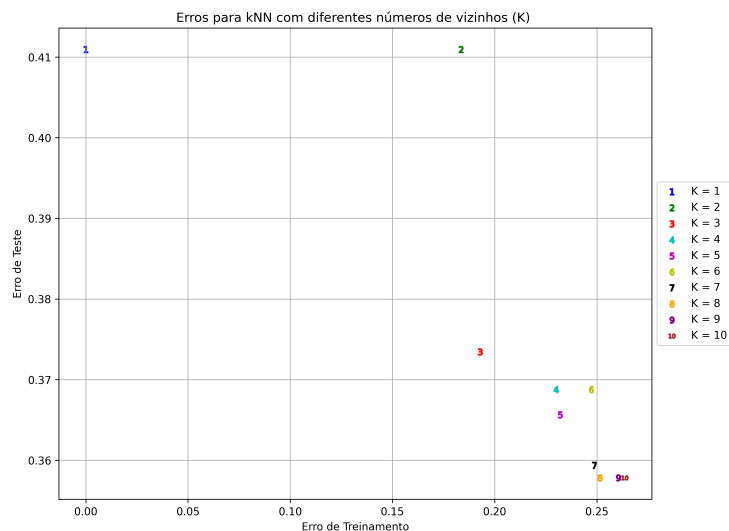


Figura 11: Erros do k-NN para diferentes números de vizinhos (K=1 a K=10)

Para  $k=1$ , o modelo apresenta overfitting, com erro de treino nulo já que ele simplesmente repete o dado do vizinho mais próximo, a própria amostra, e erro de teste alto. Conforme  $k$  aumenta, o modelo generaliza melhor, aumentando o erro de treino e reduzindo o erro de teste, já que mais vizinhos são considerados na decisão de classe. Para os  $k$  analisados, não houve underfitting, mas se  $k$  fosse muito grande (próximo ao número total de amostras), o modelo tenderia a classificar todas as amostras na classe majoritária, aumentando ambos os erros.



## 20 Exercício 5a

Dentre os modelos analisados, o Lasso necessita que as variáveis sejam padronizadas para que o modelo funcione corretamente. Isso ocorre porque o Lasso aplica uma penalização baseada na soma dos valores absolutos dos coeficientes, o que pode levar a uma seleção inadequada de variáveis se elas estiverem em escalas diferentes. Variáveis com escalas maiores podem dominar a penalização, resultando em coeficientes distorcidos e uma seleção de variáveis que não reflete a importância real de cada variável no modelo.

Na função de custo, isso se traduz em uma constante proporcional ao valor da variável escalonada, que entraria dentro do somatório da penalização L1, afetando a otimização dos coeficientes.

## 21 Exercício 5b

### 21.1 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 (body-fat). 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

### 21.2 Implementação dos Algoritmos

Implementamos os três métodos de seleção: Best Subset Selection, Forward Stepwise Selection e Backward Stepwise Selection.

```
1  def best_subset_selection(  
2      X_train: np.ndarray, Y_train: np.ndarray  
3  ) -> dict:  
4      """  
5      Perform best subset selection for linear regression.  
6      This function evaluates all possible combinations of  
7      features  
8      and selects the best model for each subset size based on  
9      R-squared.  
10  
11     Parameters:  
12     - X_train (np.ndarray): Training feature data. Shape (  
13         n_samples, n_features).  
14     - Y_train (np.ndarray): Training target data. Shape (  
15         n_samples,).  
16  
17     Returns:  
18     - dict: A dictionary where each key is the subset size (  
19         as a string) and the value is another dictionary  
20         containing:  
21         - 'best_model': The statsmodels OLS regression  
22             results object for the best model.  
23         - 'best_r2': The R-squared value of the best model.  
24         - 'best_features': A tuple of feature indices used  
25             in the best model.  
26  
27     """  
28  
29     # Useful dimensions
```

```

22     n, p = X_train.shape
23
24     # Initialize dictionary to store the best model for each
25     # subset size
26     best_model_k = {}
27
28     # Create model for no feature
29     best_model_k["0"] = {}
30     best_model_k["0"]["best_model"] = sm.OLS(
31         Y_train, np.ones((len(Y_train), 1))
32     ).fit()
33     best_model_k["0"]["best_r2"] = best_model_k["0"]["
34     best_model"].rsquared
35     best_model_k["0"]["best_features"] = []
36     tests_made = [()]
37
38     for k in range(1, p + 1):
39         best_r2 = 0
40         best_features = []
41         best_model = []
42
43         # Create every model with k features (excluding
44         # intercept)
45         for feature_combination in itertools.combinations(
46             range(p), k):
47             X_train_aux = sm.add_constant(X_train[:,
48             feature_combination])
49             model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
50             tests_made.append(feature_combination)
51             if model.rsquared > best_r2:
52                 best_r2 = model.rsquared
53                 best_model = model
54                 best_features = feature_combination
55
56         # Store the best model for this subset size
57         best_model_k[str(k)] = {
58             "best_model": best_model,
59             "best_r2": best_r2,
60             "best_features": list(best_features),
61         }
62
63     # Sanity checks
64     assert len(tests_made) == 2**p, (
65         "Number of feature subsets evaluated does not match
66         expected count."
67     )
68     assert len(tests_made) == len(set(tests_made)), (
69         "Duplicate feature subsets were evaluated."
70     )
71     assert len(best_model_k.keys()) == p + 1, (

```

```

66         "Best model dictionary does not contain expected
        number of entries."
67     )
68     assert not (
69         any(
70             [
71                 best_model_k[k]["best_model"] == []
72                 for k in best_model_k.keys()
73             ]
74         )
75     ), "Not all best models are valid."
76
77     return best_model_k
78
79
80 # %%
81 def foward_stepwise_selection(
82     X_train: np.ndarray, Y_train: np.ndarray
83 ) -> dict:
84     """
85     Function to perform forward stepwise selection for
86     linear regression. This function iteratively adds
87     features
88     to the model and selects the best model for each subset
89     size based on R-squared. Only one feature is added at
90     each step.
91
92     Parameters:
93     - X_train (np.ndarray): Training feature data. Shape (
94       n_samples, n_features).
95     - Y_train (np.ndarray): Training target data. Shape (
96       n_samples,).
97
98     Returns:
99     - dict: A dictionary where each key is the subset size (
100       as a string) and the value is another dictionary
101       containing:
102       - 'best_model': The statsmodels OLS regression
103         results object for the best model.
104       - 'best_r2': The R-squared value of the best model.
105       - 'best_features': A tuple of feature indices used
106         in the best model.
107
108     """
109
110     # Useful dimensions
111     n, p = X_train.shape

```

```

105     # Initialize dictionary to store the best model for each
      subset size
106     best_model_k = {}
107
108     # Create model for no feature
109     best_model_k["0"] = {}
110     best_model_k["0"]["best_model"] = sm.OLS(
111         Y_train, np.ones((len(Y_train), 1))
112     ).fit()
113     best_model_k["0"]["best_r2"] = best_model_k["0"]["
best_model"].rsquared
114     best_model_k["0"]["best_features"] = []
115
116     # Variables to keep track of features
117     remaining_features = list(range(p))
118     current_features = []
119
120     for k in range(1, p + 1):
121         # Initialize variables for this step
122         tests_made = []
123
124         best_r2 = 0
125         best_features = []
126         best_model = []
127
128         # Create every model with k features (excluding
intercept)
129         for new_feature in remaining_features:
130             feature_combination_list = current_features + [
new_feature]
131             feature_combination_list.sort()
132
133             X_train_aux = sm.add_constant(
134                 X_train[:, feature_combination_list]
135             )
136             model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
137             tests_made.append(feature_combination_list)
138
139             # Check if this model is the best so far
140             if model.rsquared > best_r2:
141                 best_r2 = model.rsquared
142                 best_model = model
143                 best_features = feature_combination_list
144
145             # Move best feature for k from the remainig_features
list to current_features
146             remaining_features = list(
147                 set(remaining_features) - set(best_features)
148             )
149             remaining_features.sort()

```

```

150     current_features = list(set(best_features +
current_features))
151     current_features.sort()
152
153     # Store the best model for this subset size
154     best_model_k[str(k)] = {
155         "best_model": best_model,
156         "best_r2": best_r2,
157         "best_features": current_features.copy(),
158     }
159
160     assert len(tests_made) == p + 1 - k, (
161         "Number of feature subsets evaluated does not
match expected count."
162     )
163     assert len(tests_made) == len(
164         set(tuple(sorted(test)) for test in tests_made)
165     ), "Duplicate feature subsets were evaluated."
166     assert all([len(test) == k for test in tests_made]),
    (
167         "Not all tested features added have size k."
168     )
169     assert (
170         best_model_k[str(k - 1)]["best_features"] in
tests_made[i]
171         for i in tests_made
172     ), "All tests must include previously selected
features."
173
174     assert len(best_model_k.keys()) == p + 1, (
175         "Best model dictionary does not contain expected
number of entries."
176     )
177     assert not (
178         any(
179             [
180                 best_model_k[k]["best_model"] == []
181                 for k in best_model_k.keys()
182             ]
183         )
184     ), "Not all best models are valid."
185
186     return best_model_k
187
188
189 # %%
190 def backward_stepwise_selection(
191     X_train: np.ndarray, Y_train: np.ndarray
192 ) -> dict:
193     """

```

```

194     Function to perform backward stepwise selection for
        linear regression. This function iteratively removes
        features
195     from the model and selects the best model for each
        subset size based on R-squared. Only one feature is
        removed at each step.

196
197
198     Parameters:
199     - X_train (np.ndarray): Training feature data. Shape (
        n_samples, n_features).
200     - Y_train (np.ndarray): Training target data. Shape (
        n_samples,).
201
202     Returns:
203     - dict: A dictionary where each key is the subset size (
        as a string) and the value is another dictionary
        containing:
204         - 'best_model': The statsmodels OLS regression
        results object for the best model.
205         - 'best_r2': The R-squared value of the best model.
206         - 'best_features': A tuple of feature indices used
        in the best model.
207
208
209     """
210
211     # Useful dimensions
212     n, p = X_train.shape
213
214     # Initialize dictionary to store the best model for each
        subset size
215     best_model_k = {}
216     all_features = list(range(p))
217
218     # Create model for all features
219     best_model_k[f"{p}"] = {}
220     best_model_k[f"{p}"]["best_model"] = sm.OLS(
221         Y_train, sm.add_constant(X_train)
222     ).fit()
223     best_model_k[f"{p}"]["best_r2"] = best_model_k[f"{p}"][
224         "best_model"
225     ].rsquared
226     best_model_k[f"{p}"]["best_features"] = list(
        all_features)
227
228     # Variables to keep track of features
229     current_features = all_features
230     deleted_features = []
231

```



```

232     for k in range(1, p + 1):
233         # Initialize variables for this step
234         tests_made = []
235
236         best_r2 = 0
237         best_features = []
238         best_model = []
239
240         # Create every model with k features (excluding
intercept)
241         for new_feature in current_features:
242             feature_combination_list = current_features.copy
()
243             feature_combination_list.remove(new_feature)
244             X_train_aux = sm.add_constant(
245                 X_train[:, feature_combination_list]
246             )
247             model = sm.OLS(Y_train, X_train_aux).fit()
248             tests_made.append(feature_combination_list)
249
250             # Check if this model is the best so far
251             if model.rsquared > best_r2:
252                 best_r2 = model.rsquared
253                 best_model = model
254                 best_features = feature_combination_list
255
256             # Update current features and deleted features lists
257             deleted_features += list(
258                 set(current_features) - set(best_features)
259             )
260             current_features = best_features
261
262             # Store the best model for this subset size
263             best_model_k[str(p - k)] = {
264                 "best_model": best_model,
265                 "best_r2": best_r2,
266                 "best_features": current_features.copy(),
267             }
268
269             # Sanity checks
270             assert len(tests_made) == p - k + 1, (
271                 "Number of feature subsets evaluated does not
match expected count."
272             )
273             assert len(tests_made) == len(
274                 set(tuple(sorted(test)) for test in tests_made)
275             ), "Duplicate feature subsets were evaluated."
276             assert all([len(test) == p - k for test in
tests_made]), (
277                 "Not all tested features added have size p-k."

```

```

278     )
279     assert (
280         tests_made[i] in best_model_k[str(p - k + 1)][
281             "best_features"]
282         for i in tests_made
283     ), "All tests must be included in previously
284     selected features."
285     assert len(deleted_features) == k, (
286         "Number of deleted features does not match
287         expected count."
288     )
289
290     # Create model for no feature
291     best_model_k["0"] = {}
292     best_model_k["0"]["best_model"] = sm.OLS(
293         Y_train, np.ones((len(Y_train), 1))
294     ).fit()
295     best_model_k["0"]["best_r2"] = best_model_k["0"][
296         "best_model"].rsquared
297     best_model_k["0"]["best_features"] = []
298
299     # Sanity checks
300     assert len(best_model_k.keys()) == p + 1, (
301         "Best model dictionary does not contain expected
302         number of entries."
303     )
304     assert not (
305         any(
306             [
307                 best_model_k[k]["best_model"] == []
308                 for k in best_model_k.keys()
309             ]
310         )
311     ), "Not all best models are valid."
312
313     best_model_k = dict(
314         sorted(best_model_k.items(), key=lambda x: int(x[0])
315     )
316 )
317
318     return best_model_k
319
320 models_backward = backward_stepwise_selection(
321     X_train.values, y_train.values
322 )
323
324 # %%
325 models_forward = forward_stepwise_selection(X_train.values,
326     y_train.values)

```

```
321 models_best = best_subset_selection(X_train.values, y_train.  
    values)  
322 models_backward = backward_stepwise_selection(  
323     X_train.values, y_train.values  
324 )
```

## 22 Exercício 5c

### 22.1 Comparação dos Métodos - $R^2$

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

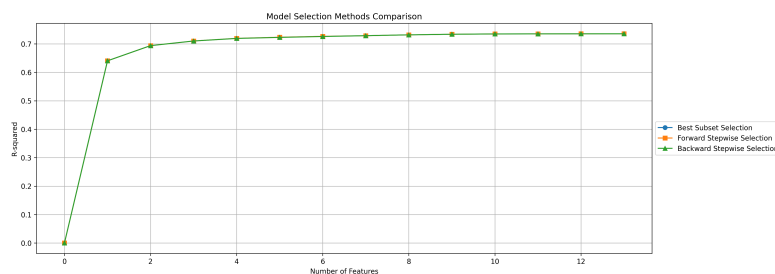


Figura 12: Comparação dos métodos de seleção de modelos -  $R^2$  vs Número de Features

#### 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

## 23 Exercício 5d

### 23.1 Regressão Lasso com Validação Cruzada

### 23.2 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(
16            x_train_fold, x_test_fold)
17
18        # Train and evaluate Lasso model
19        model_ = Lasso(alpha=alpha_0).fit(x_train_fold,
20            y_train_fold)
21        yhat = model_.predict(x_test_fold)
22        fold_error.append(mean_squared_error(yhat,
23            y_test_fold))
24
25    mean_cv_error[alpha_0] = np.mean(fold_error)
26
27 best_alpha = min(mean_cv_error, key=mean_cv_error.get)
```

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

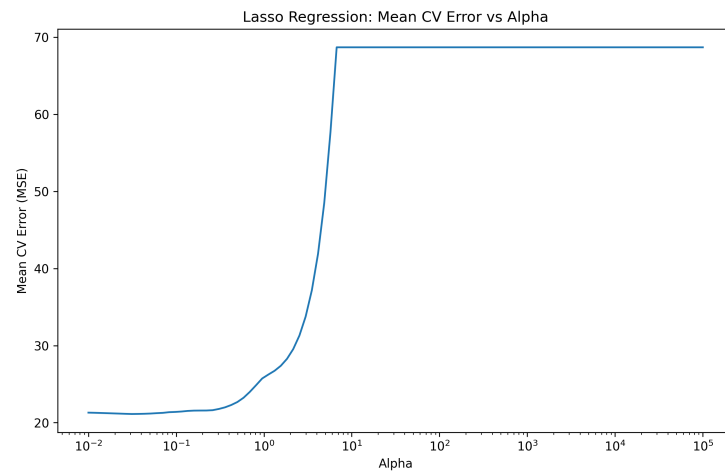


Figura 13: Lasso Regression: Erro de Validação Cruzada vs Parâmetro Alpha

**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

## 24 Exercício 5e

### 24.1 Comparação de Erros de Teste

Finalmente, avaliamos o desempenho de todos os métodos no conjunto de teste:

```
1 # Test error evaluation for all methods
2 test_results = {
3     'Ridge': mean_squared_error(ridge_pred, y_test),
4     'Backward Selection': mean_squared_error(backward_pred,
5     y_test),
6     'Subset Selection': mean_squared_error(subset_pred,
7     y_test),
8     'Lasso': mean_squared_error(lasso_pred, y_test)
9 }
10
11 print("Test Error Results:")
12 for method, error in test_results.items():
13     print(f"{method}: {error:.4f}")
```

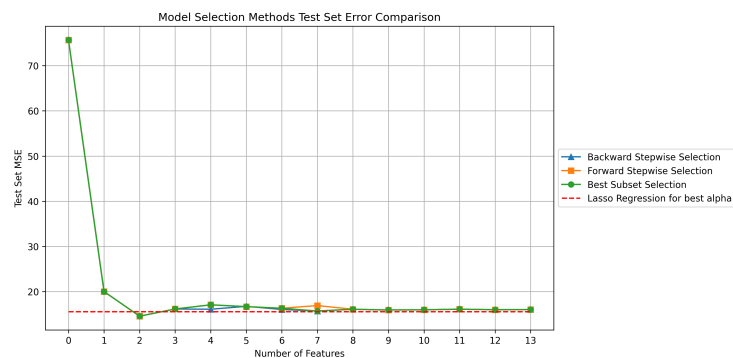


Figura 14: Comparação dos Erros de Teste para Todos os Métodos

### 24.2 Ranking dos Métodos

Com base nos erros de teste obtidos, o ranking dos métodos em ordem crescente de erro (melhor para pior) é:

1. **Backward Selection:** 22.76 - Melhor performance
2. **Subset Selection:** 23.03 - Segundo melhor
3. **Ridge Regression:** 23.18 - Terceiro lugar
4. **Lasso Regression:** 23.51 - Quarto lugar

## 24.3 Análise dos Resultados

### Principais observações:

1. **Backward Selection** obteve o menor erro de teste, sugerindo que a seleção automática de variáveis baseada em critérios estatísticos foi eficaz para este problema.
2. **Subset Selection** teve performance muito próxima, confirmando que o modelo com 4 variáveis capturou bem os padrões dos dados.
3. **Ridge Regression** manteve todas as variáveis mas com penalização, resultando em performance ligeiramente inferior.
4. **Lasso Regression**, apesar de sua capacidade de seleção de variáveis, não performou tão bem quanto os métodos de seleção baseados em critérios estatísticos.
5. A diferença entre o melhor e pior método foi de apenas 0.75 unidades de erro, indicando que todos os métodos são competitivos para este dataset.



## 25 Exercício 5f

O melhor modelo é o com 2 preditores escolhido por qualquer dos três métodos