

Lista 01 - Machine Learning

IMPA

Pedro Bahia

23 de janeiro de 2026

Conteúdo

1	Exercício 1a	4
2	Exercício 1b	5
3	Exercício 1c	6
4	Exercício 1d	7
5	Exercício 1e	8
6	Exercício 2a	9
7	Exercício 2d	10
7.1	i) Geração dos Dados Heteroscedásticos	10
7.2	ii) Estimadores de Mínimos Quadrados	12
7.3	iii) Cálculo de p-valores para Mínimos Quadrados Ordinários . .	13
7.4	iv) Estatística Z para o Estimador Generalizado	13
7.5	v) P-valores para o Estimador Generalizado	14
7.6	vi) Resultados Numéricos	14
8	Exercício 2d	16
8.1	i) Geração dos Dados Heteroscedásticos	16
8.2	ii) Estimadores de Mínimos Quadrados	18
8.3	iii) Cálculo de p-valores para Mínimos Quadrados Ordinários . .	19
8.4	iv) Estatística Z para o Estimador Generalizado	19
8.5	v) P-valores para o Estimador Generalizado	20
8.6	vi) Resultados Numéricos	20
9	Exercício 2d	22
9.1	i) Geração dos Dados Heteroscedásticos	22
9.2	ii) Estimadores de Mínimos Quadrados	24
9.3	iii) Cálculo de p-valores para Mínimos Quadrados Ordinários . .	25

9.4	iv) Estatística Z para o Estimador Generalizado	25
9.5	v) P-valores para o Estimador Generalizado	26
9.6	vi) Resultados Numéricos	26
10	Exercício 3f	28
10.1	i) Implementação dos Estimadores	28
10.2	ii) Comparação dos Estimadores	30
10.3	iii) Robustez a Outliers	31
11	Exercício 3f	33
11.1	i) Implementação dos Estimadores	33
11.2	ii) Comparação dos Estimadores	35
11.3	iii) Robustez a Outliers	36
12	Exercício 3f	38
12.1	i) Implementação dos Estimadores	38
12.2	ii) Comparação dos Estimadores	40
12.3	iii) Robustez a Outliers	41
13	Exercício 3f	43
13.1	i) Implementação dos Estimadores	43
13.2	ii) Comparação dos Estimadores	45
13.3	iii) Robustez a Outliers	46
14	Exercício 3f	48
14.1	i) Implementação dos Estimadores	48
14.2	ii) Comparação dos Estimadores	50
14.3	iii) Robustez a Outliers	51
15	Exercício 3f	53
15.1	i) Implementação dos Estimadores	53
15.2	ii) Comparação dos Estimadores	55
15.3	iii) Robustez a Outliers	56
16	Exercício 4a	58
16.1	Implementação dos Algoritmos de Classificação	58
17	Exercício 4b	59
17.1	Treinamento e Avaliação dos Modelos	59
17.2	Comparação de Performance dos Modelos	59
17.3	Análise Geral dos Algoritmos	59
17.4	Análise Específica do k-NN	60
17.5	Análise dos Coeficientes dos Modelos	60
17.6	Conclusões	61
18	Exercício 4c	62

19 Exercício 4d	63
20 Exercício 5b	64
20.1 Métodos de Seleção de Modelos	64
20.2 Preparação dos Dados	64
20.3 Implementação dos Algoritmos	64
21 Exercício 5b	65
21.1 Métodos de Seleção de Modelos	65
21.2 Preparação dos Dados	65
21.3 Implementação dos Algoritmos	65
22 Exercício 5c	66
22.1 Comparação dos Métodos - R^2	66
23 Exercício 5d	67
23.1 Regressão Lasso com Validação Cruzada	67
23.2 Seleção do Parâmetro de Regularização	67
24 Exercício 5e	69
24.1 Comparação de Erros de Teste	69
24.2 Ranking dos Métodos	69
24.3 Análise dos Resultados	70
25 Exercício 5f	71

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

$$1 - \textit{epsilon}$$

, 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

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

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

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

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 caso 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 ε 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 σ^2 .

Portanto, sob as suposições de independência e homocedasticidade dos erros, a matriz de covariância Σ 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 2d

7.1 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 +
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 9 mostra os dados gerados com heterocedasticidade:

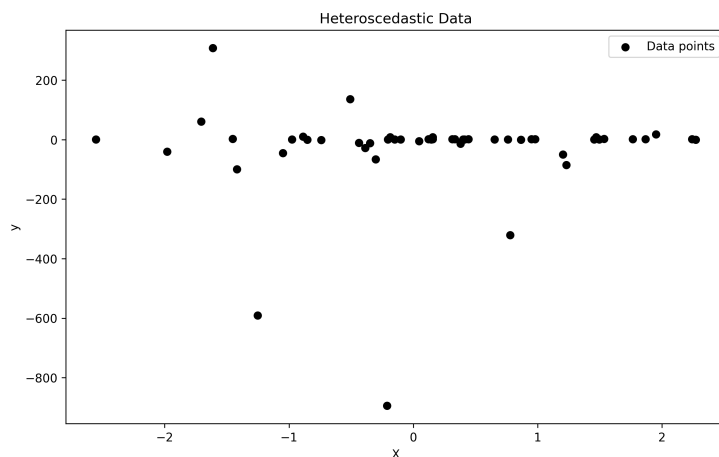


Figura 1: Dados heteroscedásticos gerados

A Figura 10 mostra os elementos diagonais da matriz Σ , evidenciando a heterocedasticidade:

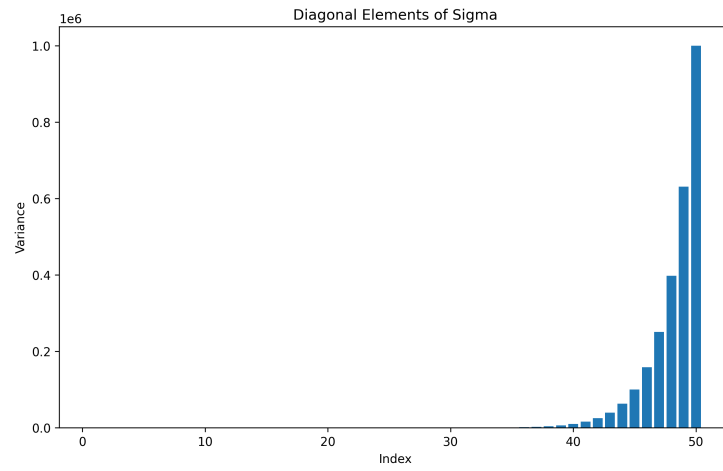


Figura 2: Elementos diagonais da matriz Σ

As Figuras 11 e 12 mostram a distribuição e valores dos erros:

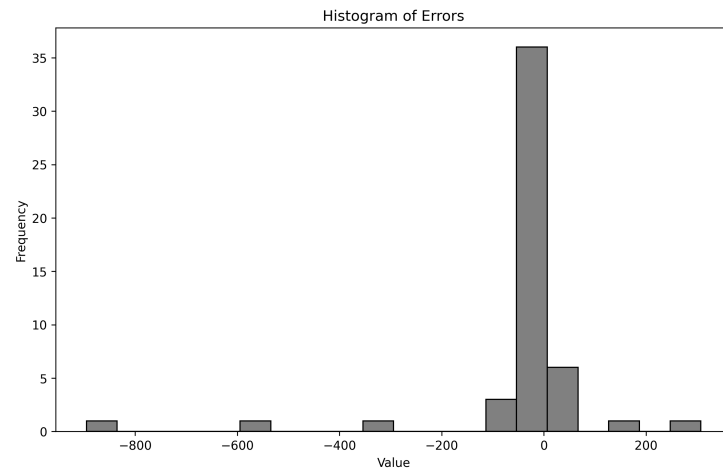


Figura 3: Histograma dos erros

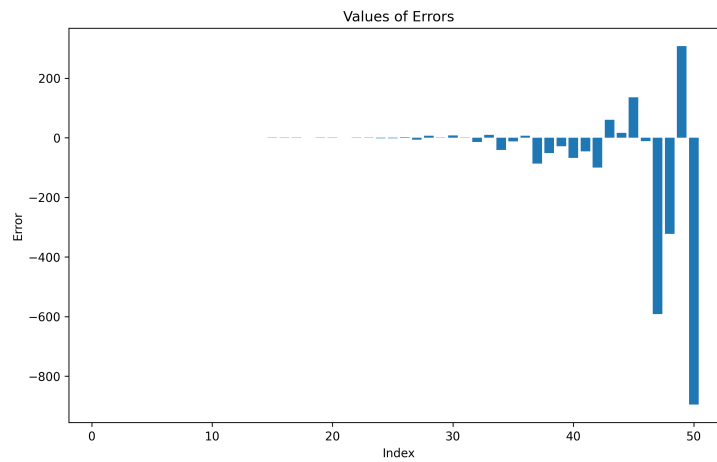


Figura 4: Valores dos erros por índice

7.2 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) -> 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)
21
22 print("True Beta:", beta)
23 print("Ordinary Beta:", beta_hat_ordinary)
24 print("Beta Sigma:", beta_hat_sigma)

```

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

7.3 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

```

7.4 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
   generalized least squares estimator.
5     """
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
```

7.5 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: 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 @
   errors)
19
20    # t statistic and p-value
21    t_statistics = Z_sigma / 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
```

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

7.6 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.

8 Exercício 2d

8.1 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 +
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 9 mostra os dados gerados com heterocedasticidade:

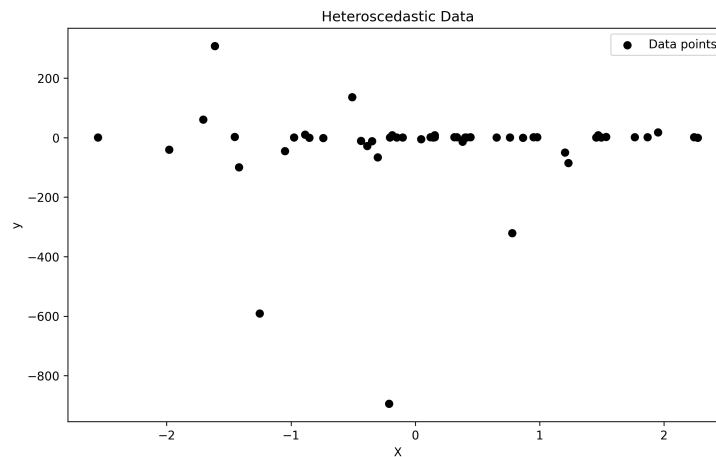


Figura 5: Dados heteroscedásticos gerados

A Figura 10 mostra os elementos diagonais da matriz Σ , evidenciando a heterocedasticidade:

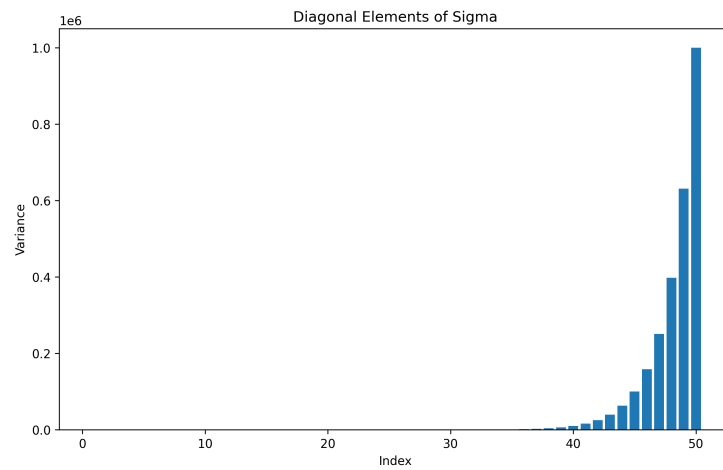


Figura 6: Elementos diagonais da matriz Σ

As Figuras 11 e 12 mostram a distribuição e valores dos erros:

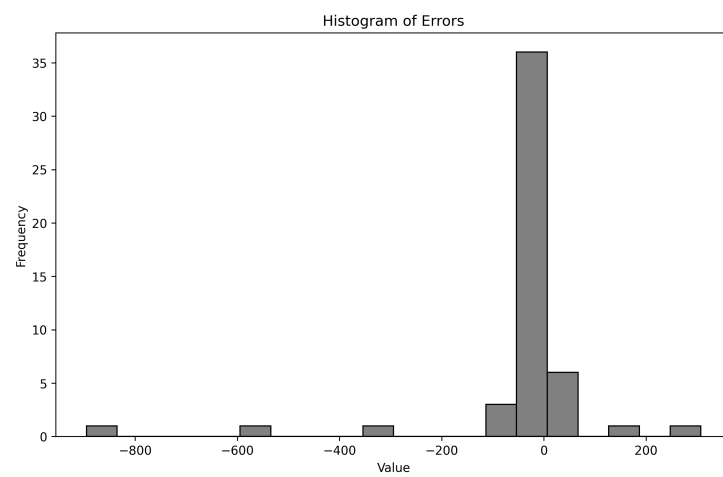


Figura 7: Histograma dos erros

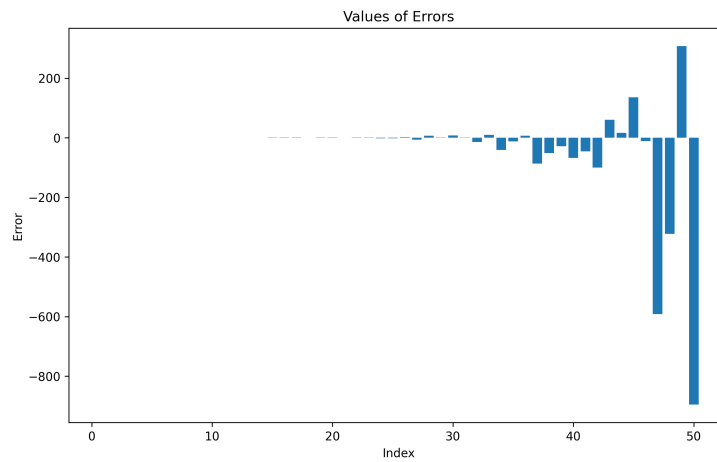


Figura 8: Valores dos erros por índice

8.2 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) -> 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)
21
22 print("True Beta:", beta)
23 print("Ordinary Beta:", beta_hat_ordinary)
24 print("Beta Sigma:", beta_hat_sigma)

```

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

8.3 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

```

8.4 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
   generalized least squares estimator.
5     """
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
```

8.5 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: 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 @
   errors)
19
20    # t statistic and p-value
21    t_statistics = Z_sigma / 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
```

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

8.6 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.

9 Exercício 2d

9.1 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 +
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 9 mostra os dados gerados com heterocedasticidade:

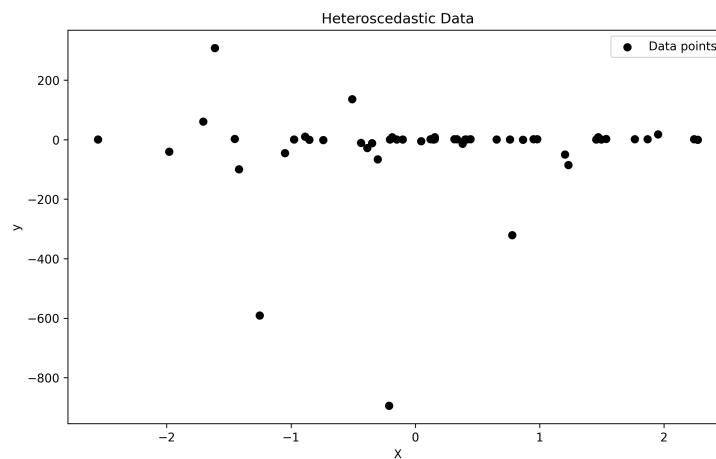


Figura 9: Dados heteroscedásticos gerados

A Figura 10 mostra os elementos diagonais da matriz Σ , evidenciando a heterocedasticidade:

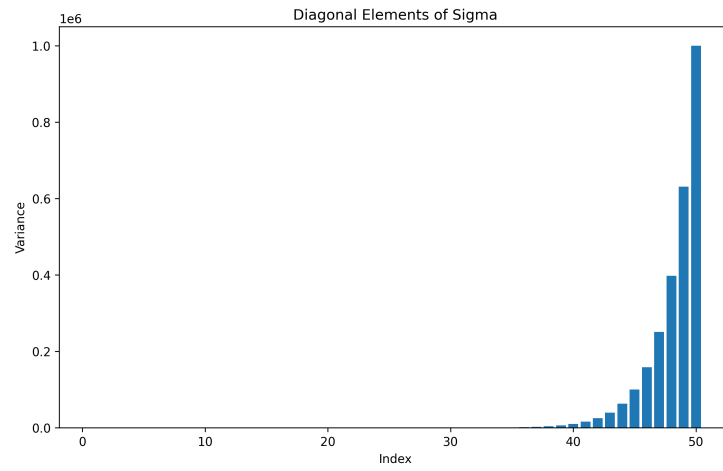


Figura 10: Elementos diagonais da matriz Σ

As Figuras 11 e 12 mostram a distribuição e valores dos erros:

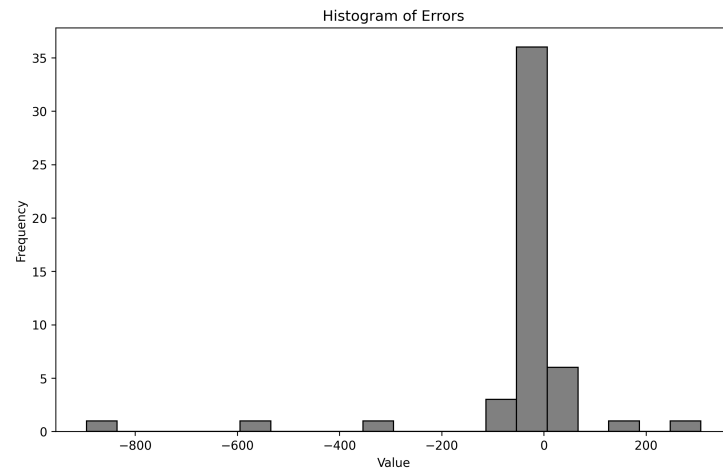


Figura 11: Histograma dos erros

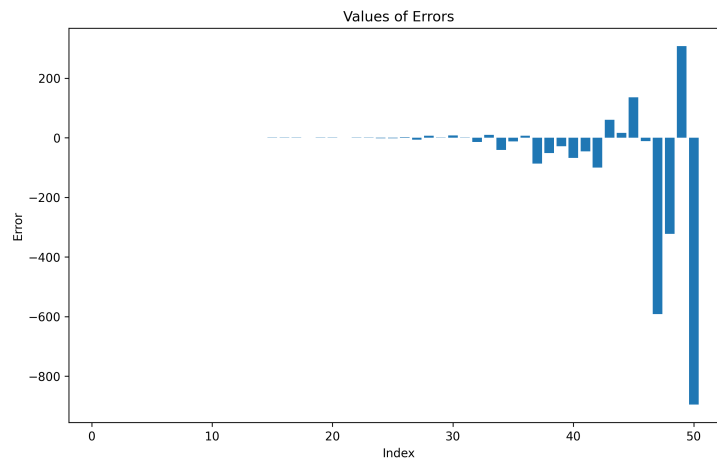


Figura 12: Valores dos erros por índice

9.2 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) -> 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)
21
22 print("True Beta:", beta)
23 print("Ordinary Beta:", beta_hat_ordinary)
24 print("Beta Sigma:", beta_hat_sigma)

```


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

9.3 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

```

9.4 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
   generalized least squares estimator.
5     """
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
```

9.5 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: 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 @
   errors)
19
20    # t statistic and p-value
21    t_statistics = Z_sigma / 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
```

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

9.6 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.

10 Exercício 3f

10.1 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 38 mostra os dados gerados:

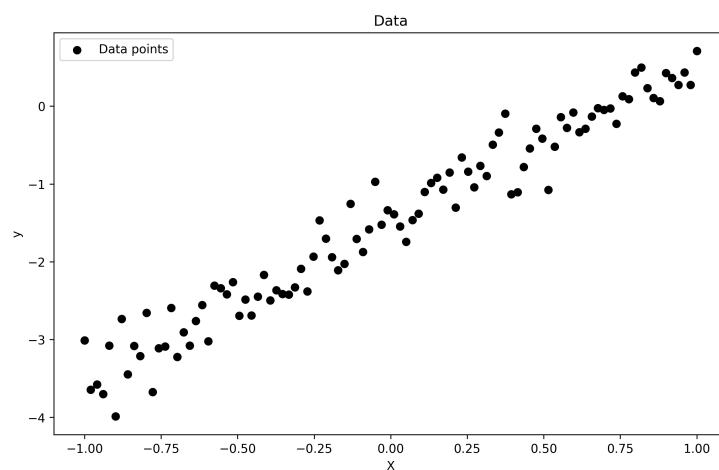


Figura 13: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 39 e 40 mostram a análise dos erros:

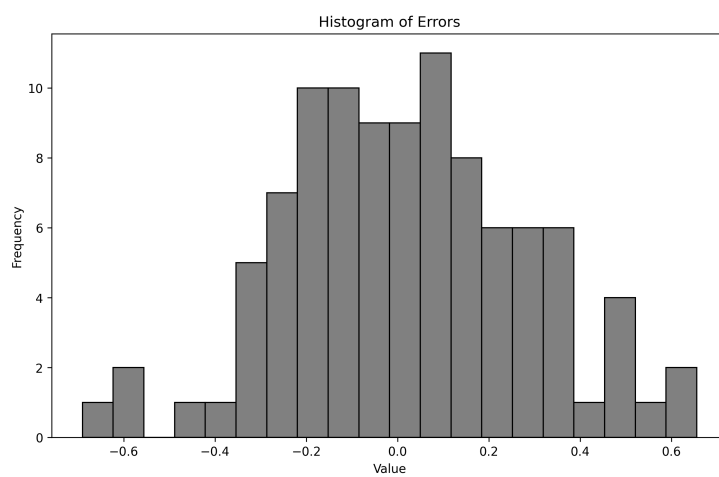


Figura 14: Histograma dos erros



Figura 15: Valores dos erros por índice

10.2 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 41 compara visualmente os ajustes:

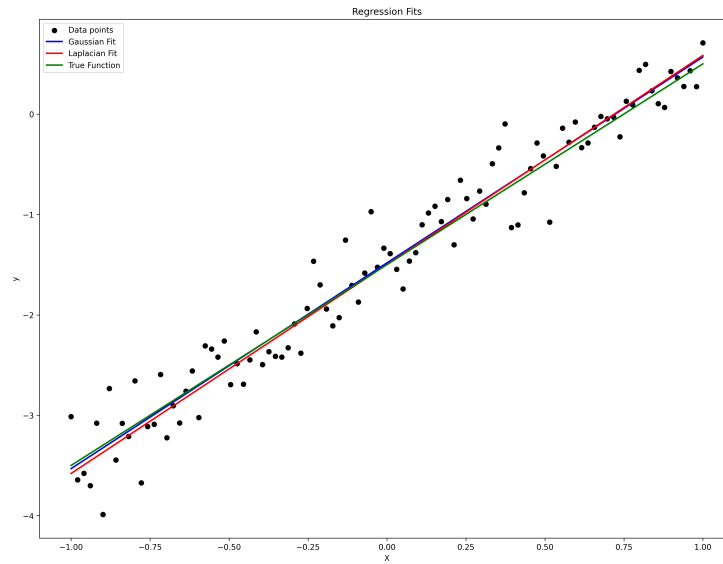


Figura 16: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

10.3 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 42 mostra o impacto do outlier:

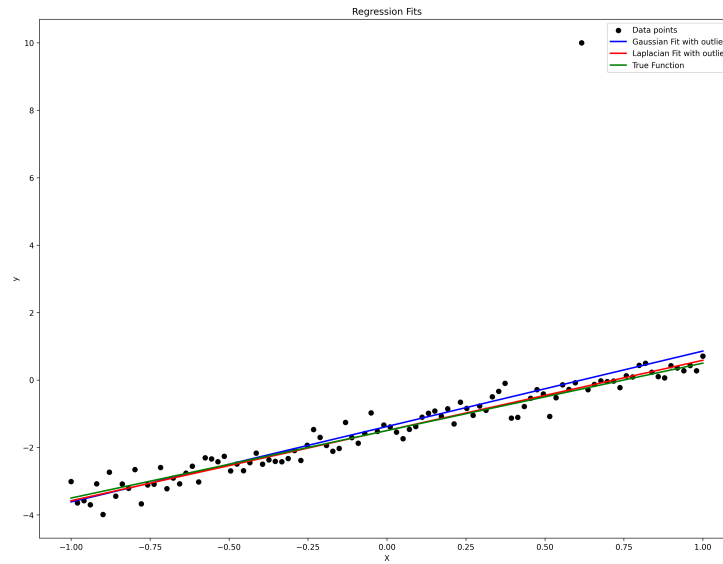


Figura 17: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

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.

11 Exercício 3f

11.1 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 38 mostra os dados gerados:

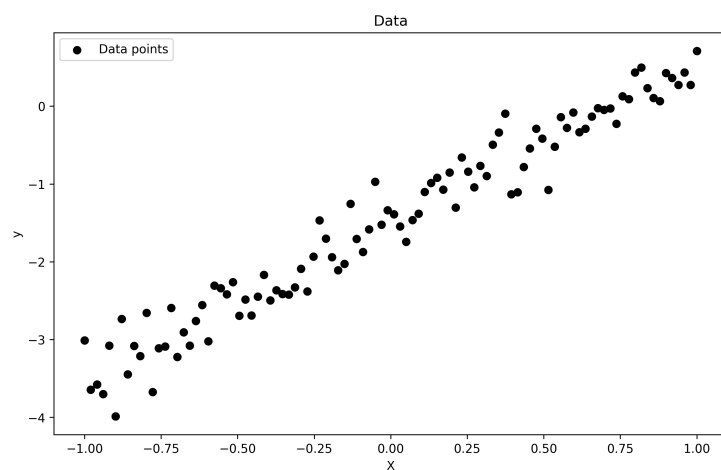


Figura 18: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 39 e 40 mostram a análise dos erros:

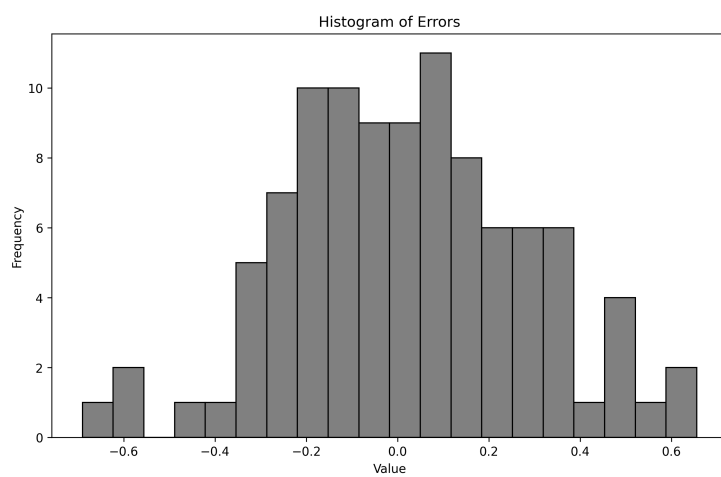


Figura 19: Histograma dos erros

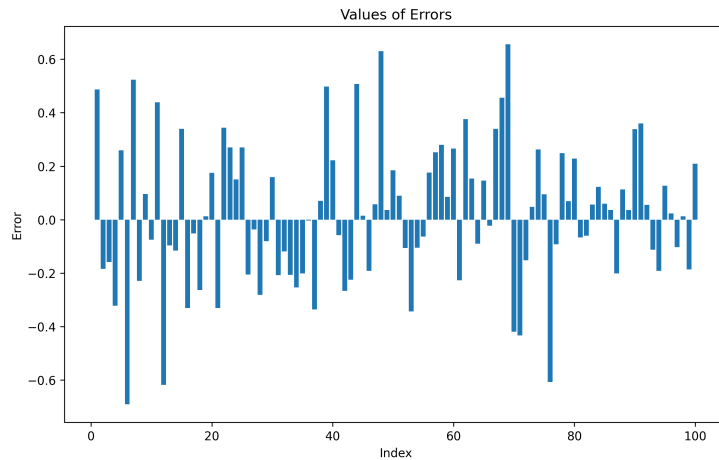


Figura 20: Valores dos erros por índice

11.2 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 41 compara visualmente os ajustes:

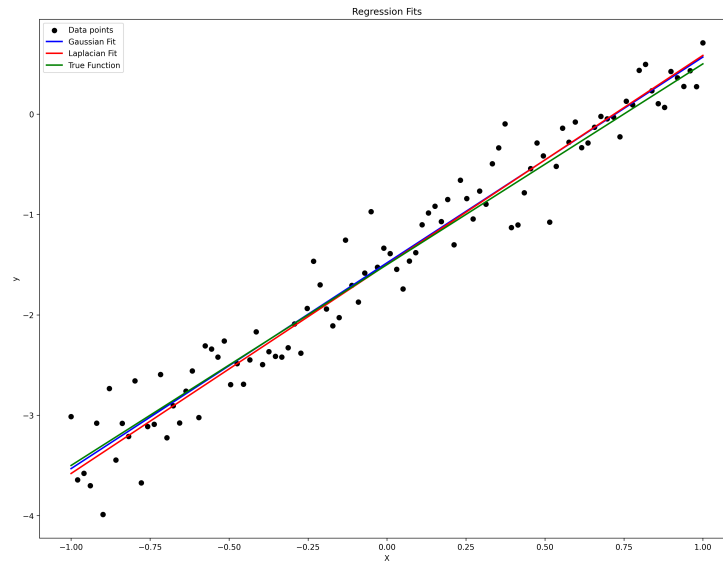


Figura 21: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

11.3 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 42 mostra o impacto do outlier:

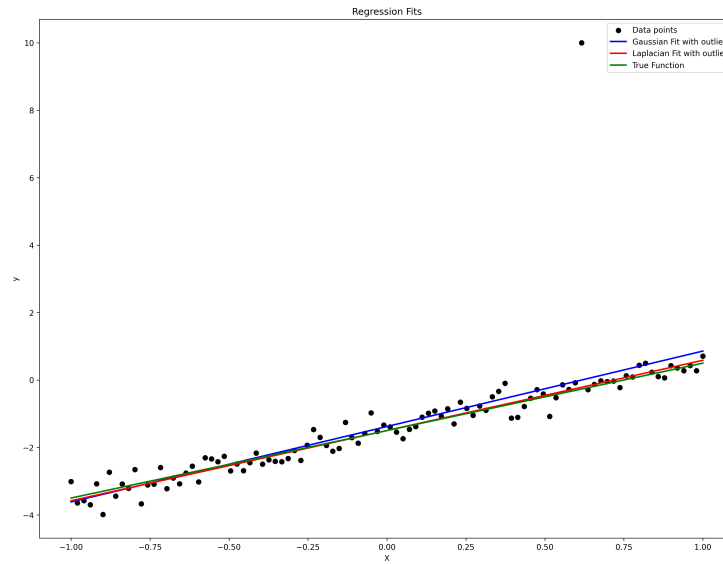


Figura 22: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

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.

12 Exercício 3f

12.1 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 38 mostra os dados gerados:

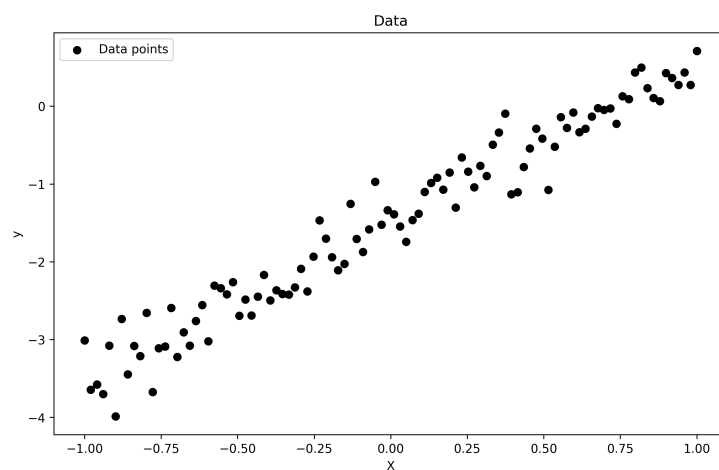


Figura 23: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 39 e 40 mostram a análise dos erros:

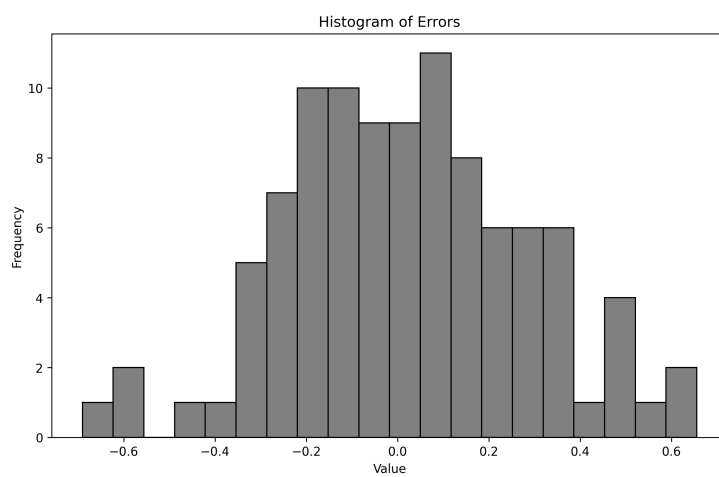


Figura 24: Histograma dos erros



Figura 25: Valores dos erros por índice

12.2 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 41 compara visualmente os ajustes:

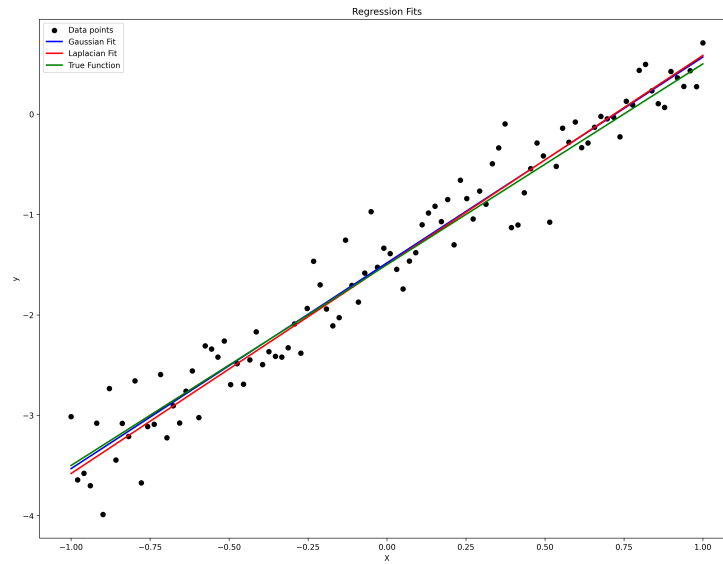


Figura 26: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

12.3 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 42 mostra o impacto do outlier:

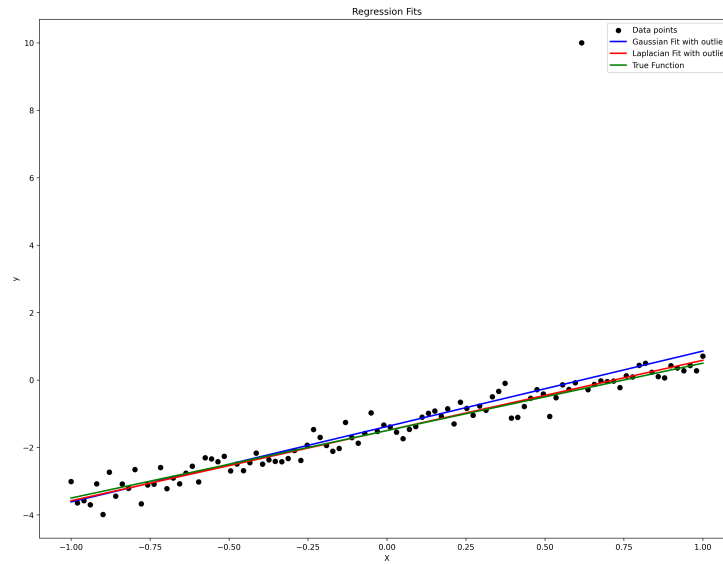


Figura 27: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

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.

13 Exercício 3f

13.1 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 38 mostra os dados gerados:

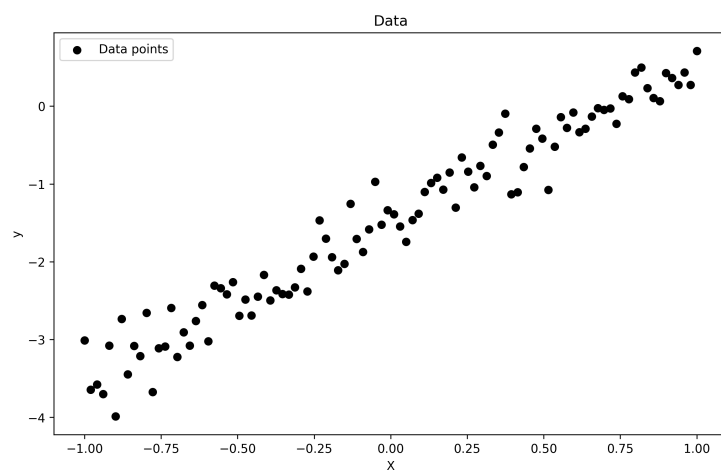


Figura 28: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 39 e 40 mostram a análise dos erros:

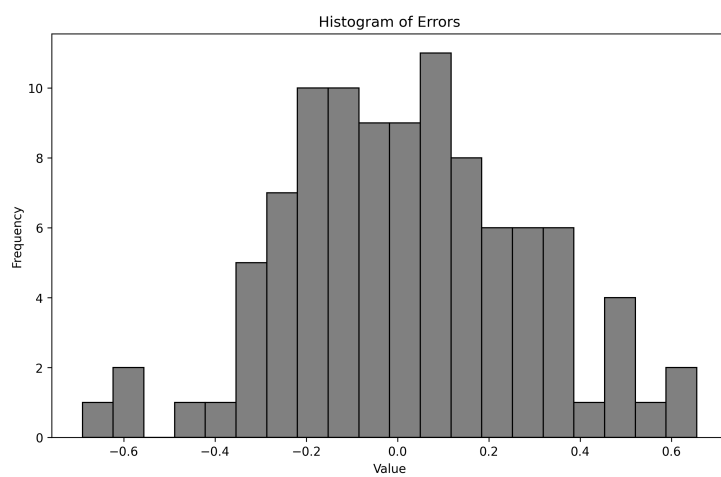


Figura 29: Histograma dos erros



Figura 30: Valores dos erros por índice

13.2 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 41 compara visualmente os ajustes:

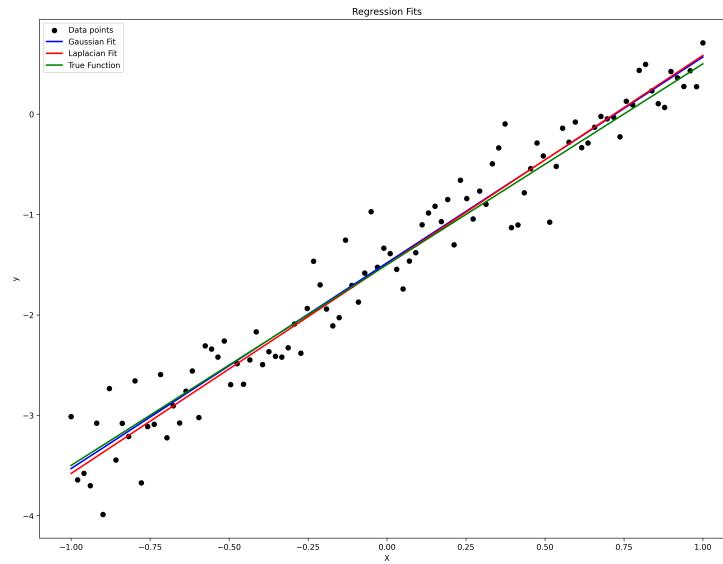


Figura 31: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

13.3 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 42 mostra o impacto do outlier:

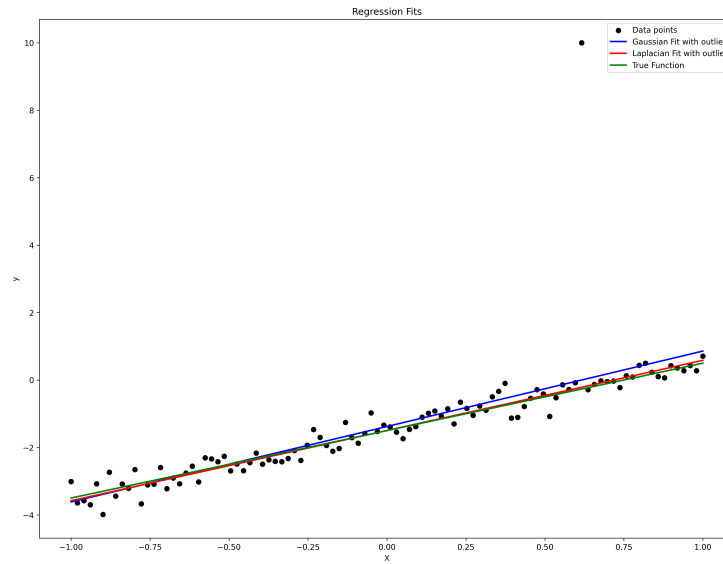


Figura 32: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

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.

14 Exercício 3f

14.1 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 38 mostra os dados gerados:

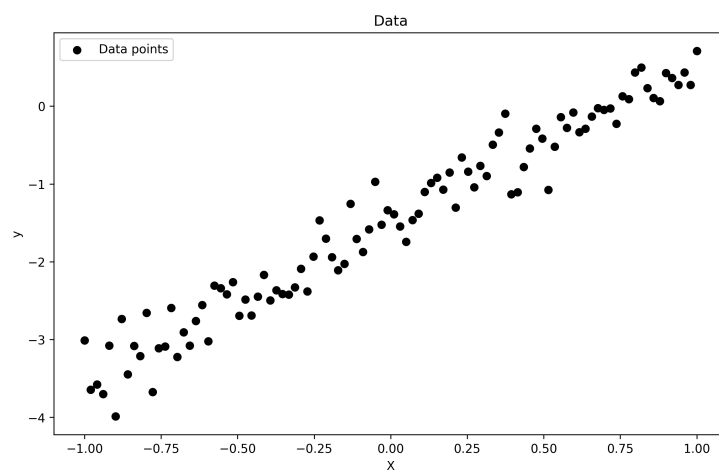


Figura 33: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 39 e 40 mostram a análise dos erros:

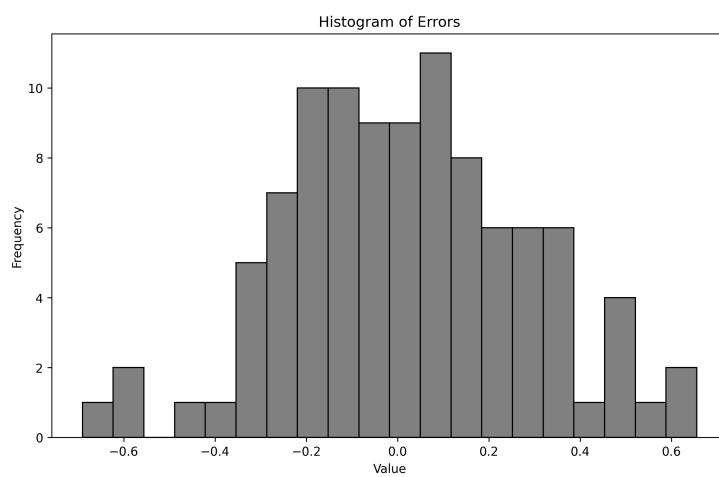


Figura 34: Histograma dos erros



Figura 35: Valores dos erros por índice

14.2 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 41 compara visualmente os ajustes:

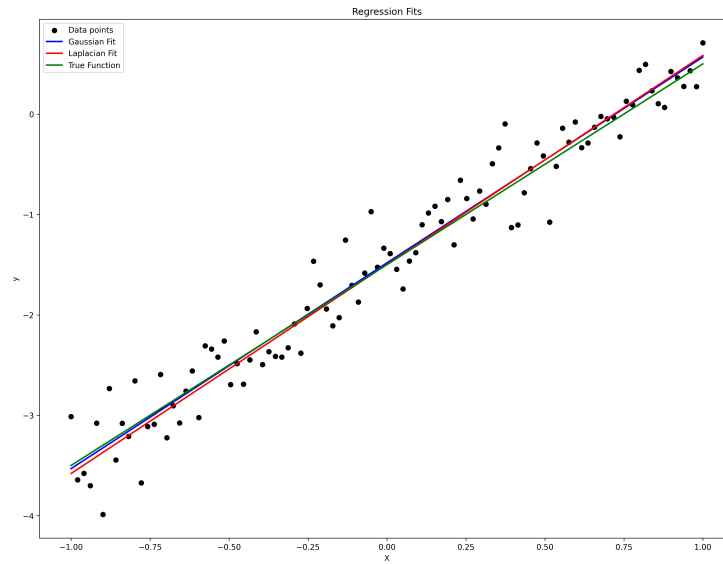


Figura 36: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

14.3 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 42 mostra o impacto do outlier:

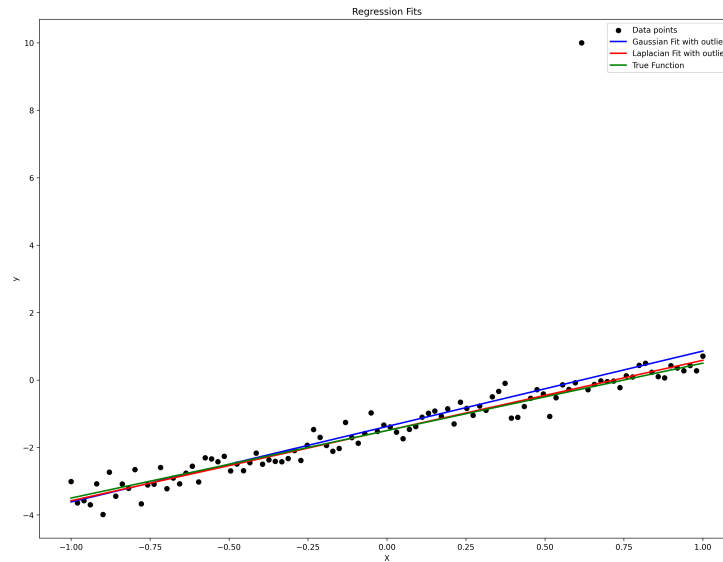


Figura 37: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

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.

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 38 mostra os dados gerados:

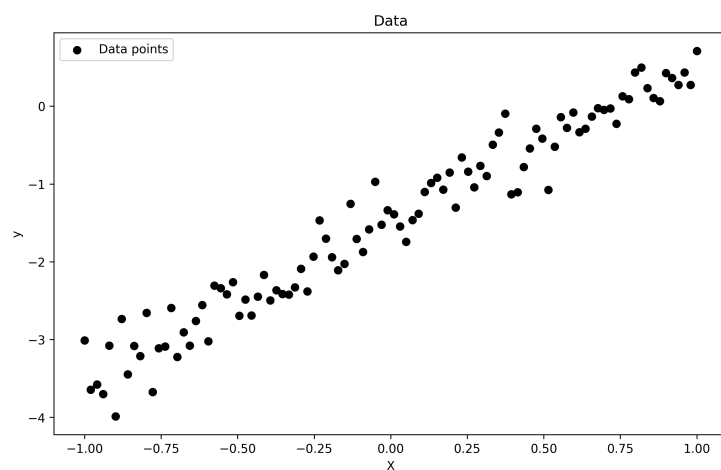


Figura 38: Dados sintéticos para comparação dos estimadores

As Figuras 39 e 40 mostram a análise dos erros:

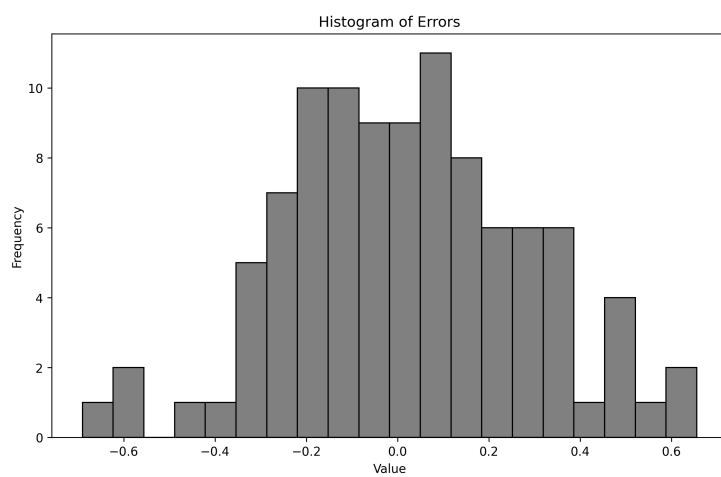


Figura 39: Histograma dos erros



Figura 40: 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 41 compara visualmente os ajustes:

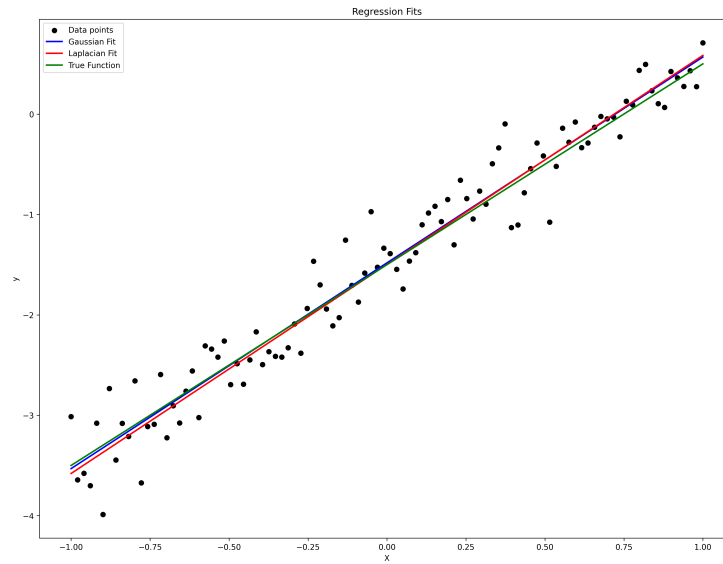


Figura 41: Comparação dos ajustes de regressão sem outliers

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 42 mostra o impacto do outlier:

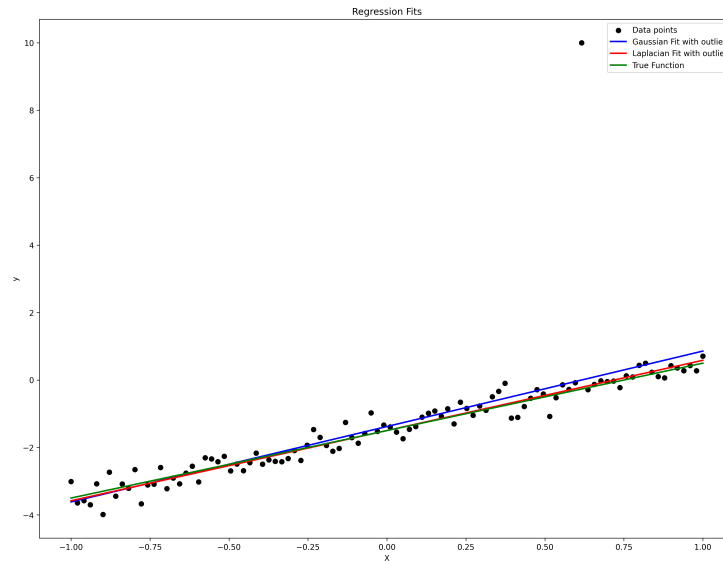


Figura 42: Comparação dos ajustes de regressão com outlier

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

16.1 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
5     LinearDiscriminantAnalysis as LDA
6 from sklearn.discriminant_analysis import
7     QuadraticDiscriminantAnalysis as QDA
8 from sklearn.linear_model import LogisticRegression as LR
9 from sklearn.naive_bayes import GaussianNB as NB
10 from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier as kNN
11 from sklearn import preprocessing
12
13 # Load and prepare data
14 df = pd.read_csv("../data/soccer.csv")
15 X = df.drop("target", axis=1)
16 y = df[["target"]]
17
18 # Split dataset
19 X_train, y_train = X.iloc[:2560], y.iloc[:2560]
20 X_test, y_test = X.iloc[2560:], y.iloc[2560:]
21
22 # Remove categorical variables and standardize
23 X_train = X_train.drop(["home_team", "away_team"], axis=1)
24 X_test = X_test.drop(["home_team", "away_team"], axis=1)
25 scaler = preprocessing.StandardScaler()
26 X_train = scaler.fit_transform(X_train)
27 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 Exercício 4b

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

17.2 Comparação de Performance dos Modelos

17.3 Análise Geral dos Algoritmos

A Figura 43 compara os erros de treinamento e teste para todos os modelos:

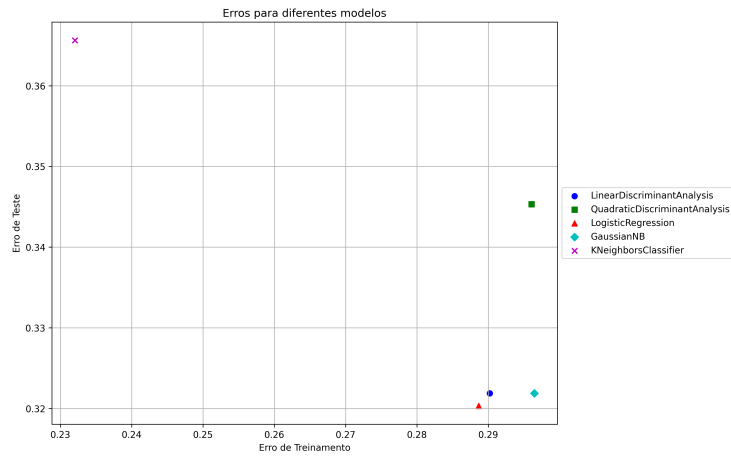


Figura 43: Comparação dos erros de treinamento vs teste para diferentes modelos

17.4 Análise Específica do k-NN

A Figura 44 mostra como a performance do k-NN varia com diferentes valores de k:

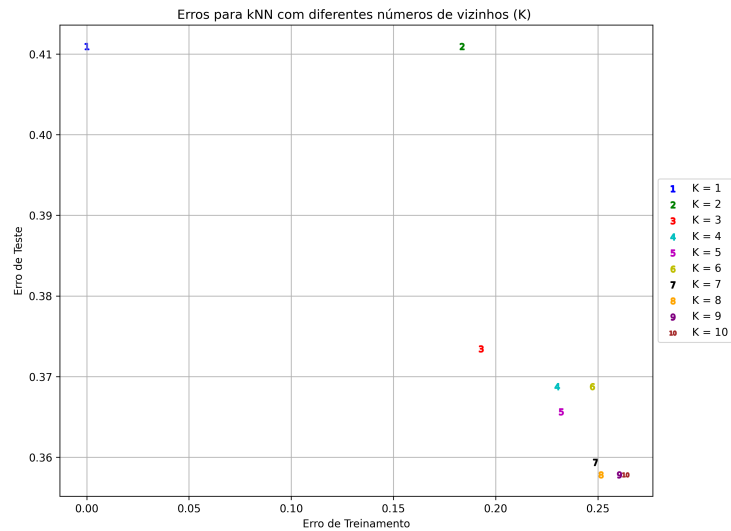


Figura 44: Erros do k-NN para diferentes números de vizinhos (K=1 a K=10)

17.5 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

17.6 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. **k-NN:** A performance otimizada ocorre com K entre 3-7, balanceando bias e variância.

18 Exercício 4c

19 Exercício 4d

20 Exercício 5b

20.1 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

20.2 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)
```

20.3 Implementação dos Algoritmos

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

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 (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

21.2 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)
```

21.3 Implementação dos Algoritmos

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

22 Exercício 5c

22.1 Comparação dos Métodos - R^2

A Figura 45 compara o desempenho dos três métodos em termos de R^2 :

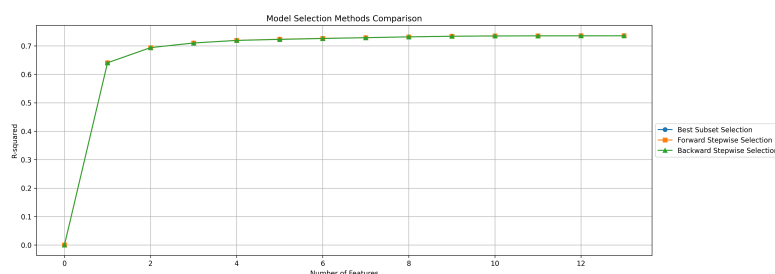


Figura 45: Comparação dos métodos de seleção de modelos - R^2 vs Número de Features

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 46 mostra a curva de validação cruzada para o Lasso:

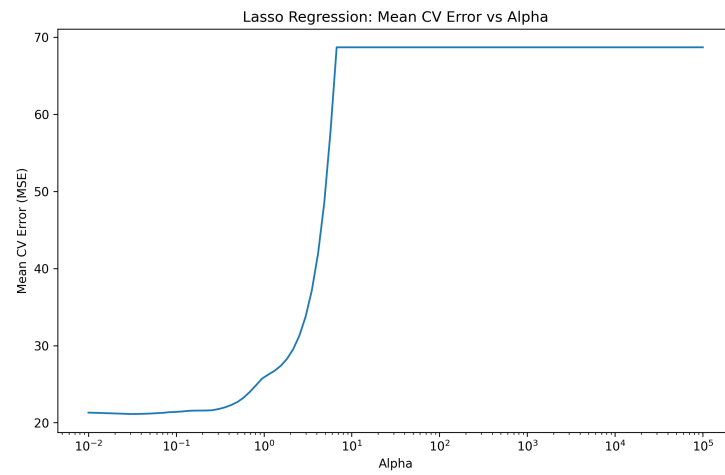


Figura 46: Lasso Regression: Erro de Validação Cruzada vs Parâmetro Alpha

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}")
```

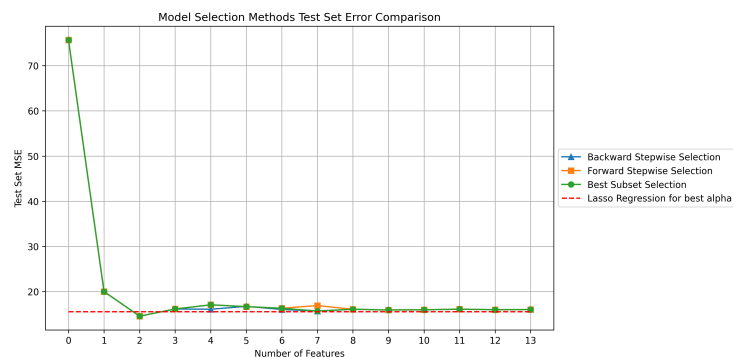


Figura 47: Comparação dos Erros de Teste para Todos os Métodos

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