

Aprendizado de máquinas

Thiago Rodrigo Ramos

19 de maio de 2025

Sumário

1	Introdução	7
1.1	Um breve histórico do aprendizado estatístico	7
1.1.1	Inferência vs Predição	8
1.1.2	As duas culturas de Breiman	9
1.2	Algumas tarefas clássicas de aprendizado	10
1.3	Exemplos	10
1.3.1	Salários	10
1.3.2	Mercado de ações	11
1.4	Um conselho: a importância de ser ruim antes de ser bom	12
2	Fundamentos do aprendizado supervisionado	13
2.1	Formulação do problema	13
2.2	Decomposição de viés-variância em regressão	15
2.3	Data Splitting e Validação Cruzada	18
3	Introdução à regressão via mínimos quadrados	21
3.1	Mínimos quadrados	21
3.2	Resolução Numérica	25
3.3	Estimativas de erros para regressão linear	25
3.4	Um pouco de inferência	27
4	Introdução à classificação via regressão logística	29
4.1	Classificador de Bayes	29
4.1.1	O Modelo Logístico	31
4.1.2	Estimando os Coeficientes da Regressão	32
4.2	Um pouco de otimização - O método de Newton	33
4.3	Outras métricas de avaliação	35
4.4	Ajuste do limiar de decisão	36
4.4.1	Escolhendo o limiar de decisão	37
5	KNN	41
6	Modelos baseados em árvores	49
6.1	Árvores de decisão	49

6.1.1	Divisão Binária Recursiva	50
6.1.2	Poda de Árvores (Tree Pruning)	52
6.1.3	Árvores de Classificação	53
6.1.4	Árvores versus modelos lineares	56
6.1.5	Vantagens e Desvantagens das Árvores	58
6.2	Bagging	58
6.2.1	Estimativa do Erro Out-of-Bag (OOB)	59
6.2.2	Importância de Variáveis em Modelos Bagged	61
6.3	Random Forests	61
6.3.1	Impacto dos Parâmetros B e m	62
6.3.2	Uso de Random Forests em Altas Dimensões	63
7	Seleção de modelos lineares e regularização	65
7.1	Seleção do melhor subconjunto (Best Subset Selection)	66
7.1.1	Seleção Forward e Backward	67
7.2	Ridge e Lasso	72
7.2.1	Regressão Ridge (Ridge Regression)	72
7.2.2	Regressão Lasso	73
7.2.3	Formulações Alternativas de Ridge e Lasso	73
7.2.4	Interpretação via encolhimento	75
7.2.5	Interpretação Bayesiana de Ridge e Lasso	76
8	Tópicos avançados	79
8.1	Descida dupla	79
A	Revisão	81
A.1	Álgebra linear	81
A.1.1	Multiplicações	83
A.1.2	Mudança de base	84
A.1.3	Produtos internos	85
A.1.4	Ortogonalidade	88
A.1.5	Decomposição em valores singulares	93
A.2	Probabilidade	95
A.2.1	Variáveis aleatórias	96
A.2.2	Probabilidade condicional e independência	96
A.2.3	Algumas fórmulas importantes	97
A.2.4	Esperança e desigualdade de Markov	97
A.2.5	Variância e a desigualdade de Chebyshev	98
A.2.6	Covariância	98
A.2.7	Teoremas assintóticos	100
A.2.8	Função geradora de momentos	100
B	Guia de desigualdades	103

<i>SUMÁRIO</i>	5
C Ferramentas computacionais	105
C.1 Git	105
C.2 Python	106
C.3 Poetry	106

Material do curso

Todo o material utilizado neste curso, incluindo códigos e notebooks, pode ser acessado no repositório do GitHub: https://github.com/thiagorr162/curso_aprendizado.

Referências principais

O conteúdo deste curso é baseado em referências que cobrem tópicos fundamentais de aprendizado de máquina e estatística. [Izbicki and dos Santos \(2020\)](#) introduz o aprendizado de máquina com ênfase em uma abordagem estatística, voltada ao público brasileiro. [James et al. \(2013\)](#) apresentam métodos estatísticos aplicados à aprendizagem supervisionada e não supervisionada, com exemplos em *R* e *Python*. [Hastie et al. \(2001\)](#) abordam técnicas avançadas e a teoria estatística por trás de algoritmos de aprendizado de máquina. [Shalev-Shwartz and Ben-David \(2014\)](#) desenvolvem a teoria do aprendizado e a análise de algoritmos, com foco na compreensão matemática das técnicas. [Mohri et al. \(2018\)](#) tratam de conceitos fundamentais de generalização e estabilidade, além de fornecer uma base teórica para diversos algoritmos modernos.

Todas esses livros podem ser baixadas online de forma legal nos sites dos autores.

Capítulo 1

Introdução

Aprendizado de máquina é um termo utilizado para descrever sistemas capazes de identificar automaticamente padrões e regularidades em dados (Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014). Nos últimos anos, essa área consolidou-se como uma ferramenta indispensável para atividades que envolvem a análise e interpretação de grandes volumes de informação. Hoje em dia, essa tecnologia está presente em nosso cotidiano: motores de busca ajustam seus resultados para atender melhor às nossas consultas (ao mesmo tempo em que exibem anúncios), filtros de *spam* são aperfeiçoados para proteger nossas caixas de e-mail, e sistemas de detecção de fraudes asseguram a integridade de transações financeiras realizadas com cartões de crédito. Além disso, câmeras digitais reconhecem rostos, assistentes virtuais em *smartphones* interpretam comandos de voz e veículos utilizam algoritmos inteligentes para prevenir acidentes. O aprendizado de máquina também desempenha papel crucial em diversas áreas da ciência, como a bioinformática, a medicina e a astronomia.

1.1 Um breve histórico do aprendizado estatístico

Como descrito em James et al. (2013), embora o termo *aprendizado estatístico* seja relativamente recente, muitos dos conceitos fundamentais da área foram estabelecidos há bastante tempo. No início do século XIX, surgiu o método dos mínimos quadrados, que representa uma das primeiras formas do que hoje conhecemos como regressão linear. Essa técnica foi aplicada com sucesso, inicialmente, em problemas de astronomia. A regressão linear é amplamente utilizada para prever variáveis quantitativas, como o salário de um indivíduo, por exemplo.

Com o objetivo de prever variáveis qualitativas — como determinar se um paciente sobreviverá ou não, ou se o mercado financeiro terá alta ou queda —, foi proposta em 1936 a análise discriminante linear. Já na década de 1940, autores sugeriram uma abordagem alternativa: a regressão logística. No início dos anos 1970, o conceito de *modelos lineares generalizados* foi introduzido, englobando tanto a regressão linear quanto a logística como casos particulares dentro de uma estrutura mais ampla.

Até o final da década de 1970, diversas técnicas para aprendizado a partir de dados já estavam disponíveis, embora fossem predominantemente lineares, devido às limitações computacionais da época para modelagem de relações não lineares. A partir dos anos 1980, com o avanço da

tecnologia, métodos não lineares passaram a ser mais acessíveis. Nesse período surgiram as árvores de decisão para classificação e regressão, seguidas pelos modelos aditivos generalizados. Ainda nos anos 1980, as redes neurais ganharam destaque, e nos anos 1990, as máquinas de vetor de suporte (*support vector machines*) foram introduzidas.

Desde então, o aprendizado estatístico consolidou-se como um subcampo da estatística dedicado à modelagem e predição em cenários supervisionados e não supervisionados. Nos últimos anos, o progresso na área foi impulsionado pela crescente disponibilidade de softwares poderosos e acessíveis, como a linguagem de programação Python, que é gratuito e de código aberto. Esse avanço vem contribuindo para ampliar o alcance das técnicas de aprendizado estatístico, tornando-as uma ferramenta essencial não apenas para estatísticos e cientistas da computação, mas também para profissionais de diversas outras áreas.

1.1.1 Inferência vs Predição

Como descrito em [Izbicki and dos Santos \(2020\)](#), em problemas supervisionados, é importante distinguir entre dois objetivos fundamentais: a inferência e a predição. Essas duas abordagens guiam a forma como modelos são construídos e avaliados.

- **Objetivo inferencial** diz respeito à compreensão da relação entre as covariáveis x e a variável resposta Y . Nesse caso, queremos responder perguntas como: quais covariáveis são mais relevantes para explicar Y ? Qual a direção e a magnitude do efeito de cada preditor? Esse tipo de análise é útil quando o interesse está em interpretar o modelo, entender a estrutura dos dados ou formular hipóteses científicas.
- **Objetivo preditivo**, por outro lado, está focado em construir uma função $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ que tenha boa capacidade de prever Y para novas observações não vistas durante o treinamento. O sucesso neste contexto é medido pela capacidade do modelo em generalizar para dados futuros, mesmo que isso ocorra às custas de uma menor interpretabilidade do modelo.

Para ilustrar essas distinções, vejamos dois exemplos práticos:

- No **Exemplo 1.3** (*Isomap face data*), cada observação consiste em uma imagem de um rosto humano, e o objetivo é prever a direção para a qual a pessoa está olhando (variável y) com base nos pixels da imagem (variáveis x). Esse é um exemplo puramente preditivo, pois a principal meta é estimar corretamente a direção do olhar em novas imagens. O modelo não busca explicar quais regiões da imagem são mais relevantes ou como cada pixel individual influencia a resposta, mas sim gerar boas predições.
- Já no **Exemplo 1.4** (*Million Song Dataset*), o banco de dados contém informações sobre diversas características de músicas (como timbre, energia, dançabilidade etc.) e o ano de lançamento de cada uma delas. Nesse caso, o problema tem um caráter misto. Por um lado, queremos prever o ano de lançamento a partir das covariáveis disponíveis (objetivo preditivo). Por outro, pode haver interesse em entender como cada característica da música se relaciona com o ano de lançamento, como por exemplo investigar se músicas dos anos 70 são de fato mais "dançantes" do que as atuais (objetivo inferencial).

Portanto, enquanto alguns problemas são essencialmente preditivos ou inferenciais, outros envolvem uma combinação dos dois. Essa distinção é relevante, pois impacta tanto a escolha do modelo quanto a forma de interpretá-lo e validá-lo.

1.1.2 As duas culturas de Breiman

Leo Breiman foi um estatístico renomado, conhecido por suas contribuições fundamentais à estatística e ao aprendizado de máquina, incluindo o desenvolvimento de métodos como random forests [Breiman \(2001a\)](#). Em seu influente artigo *“Statistical Modeling: The Two Cultures”* ([Breiman, 2001b](#)), Breiman discute duas abordagens distintas para modelagem estatística. Ele inicia seu artigo com o seguinte resumo:

“There are two cultures in the use of statistical modeling to reach conclusions from data. One assumes that the data are generated by a given stochastic data model. The other uses algorithmic models and treats the data mechanism as unknown. The statistical community has been committed to the almost exclusive use of data models. This commitment has led to irrelevant theory, questionable conclusions, and has kept statisticians from working on a large range of interesting current problems. Algorithmic modeling, both in theory and practice, has developed rapidly in fields outside statistics. It can be used both on large complex data sets and as a more accurate and informative alternative to data modeling on smaller data sets. If our goal as a field is to use data to solve problems, then we need to move away from exclusive dependence on data models and adopt a more diverse set of tools.”

O artigo teve grande impacto na comunidade estatística e no campo do aprendizado de máquina. Nele, Breiman argumenta que existem duas culturas distintas na modelagem de dados: a **cultura dos modelos estocásticos**, que assume que os dados são gerados por um modelo probabilístico especificado (como regressão linear, modelos lineares generalizados etc.), e a **cultura algorítmica**, que foca na construção de algoritmos preditivos eficazes sem necessariamente se preocupar com a interpretação ou com a modelagem explícita da distribuição dos dados (como árvores de decisão, random forests, redes neurais, entre outros).

Breiman defende que a estatística tradicional estava excessivamente focada em modelos estocásticos, o que limitava seu impacto em problemas práticos, enquanto métodos algorítmicos — amplamente utilizados fora da estatística, especialmente na ciência da computação — estavam mais bem adaptados para resolver problemas com grandes volumes de dados e alta complexidade.

Hoje em dia, o artigo de Breiman é amplamente citado e considerado um marco que antecipou a ascensão de métodos de aprendizado de máquina dentro da estatística e da ciência de dados. No entanto, sua visão também recebeu críticas. Alguns argumentam que as duas culturas não são mutuamente excludentes e que há um valor significativo na modelagem estatística clássica, especialmente quando a interpretação dos parâmetros e a inferência causal são importantes. Além disso, com o avanço dos métodos de aprendizado estatístico e da estatística bayesiana, muitos pesquisadores propõem abordagens híbridas que combinam modelagem interpretável com o poder preditivo dos algoritmos.

Atualmente, o artigo de Breiman é visto como uma provocação importante que incentivou a comunidade a repensar o papel da estatística em problemas do mundo real, mas também é reconhecido que tanto a modelagem estocástica quanto a preditiva têm seu espaço e relevância dependendo do contexto e dos objetivos da análise.

1.2 Algumas tarefas clássicas de aprendizado

A seguir, apresentamos algumas tarefas clássicas de aprendizado de máquina que têm sido amplamente estudadas ([Mohri et al., 2018](#)):

- **Classificação:** consiste em atribuir uma categoria a cada item. Por exemplo, na classificação de documentos, o objetivo é rotular cada texto com categorias como política, negócios, esportes ou clima. Já na classificação de imagens, cada imagem pode ser categorizada como carro, trem ou avião. Em geral, o número de categorias é limitado a algumas centenas, mas pode ser consideravelmente maior em tarefas complexas, como reconhecimento óptico de caracteres (OCR), classificação de textos ou reconhecimento de fala.
- **Regressão:** envolve a predição de um valor numérico contínuo para cada item. Exemplos comuns incluem a previsão de preços de ações ou de indicadores econômicos. Diferentemente da classificação, em regressão o erro de uma predição depende da distância entre o valor real e o valor estimado, enquanto na classificação normalmente não há uma medida de proximidade entre as categorias.
- **Ranqueamento:** trata-se de aprender a ordenar itens de acordo com algum critério. Um exemplo típico é o ranqueamento de páginas em um motor de busca, onde o sistema precisa retornar os resultados mais relevantes para uma consulta. Outras aplicações de ranqueamento aparecem em sistemas de extração de informações e em processamento de linguagem natural.
- **Agrupamento (Clustering):** busca organizar um conjunto de itens em subconjuntos homogêneos. Algoritmos de agrupamento são especialmente úteis na análise de grandes volumes de dados. Na análise de redes sociais, por exemplo, técnicas de clustering são usadas para identificar comunidades ou grupos com características similares dentro de uma rede.
- **Redução de dimensionalidade ou aprendizado de variedades:** refere-se ao processo de transformar uma representação original de dados em uma representação de menor dimensão, preservando certas propriedades estruturais importantes. Um exemplo comum ocorre no pré-processamento de imagens digitais em tarefas de visão computacional.

1.3 Exemplos

1.3.1 Salários

Nesta análise, utilizamos um conjunto de dados que contém informações sobre salários de trabalhadores da região do Atlântico dos Estados Unidos (Fig. [1.3.1](#)). O foco é explorar como fatores

como idade, nível de escolaridade e o ano em que o salário foi registrado influenciam os valores salariais.

	year	age	maritl	race	education	region	jobclass	health	health_ins	logwage	wage
0	2006	18	1. Never Married	1. White	1. < HS Grad	2. Middle Atlantic	1. Industrial	1. <=Good	2. No	4.318063	75.043154
1	2004	24	1. Never Married	1. White	4. College Grad	2. Middle Atlantic	2. Information	2. >=Very Good	2. No	4.255273	70.476020
2	2003	45	2. Married	1. White	3. Some College	2. Middle Atlantic	1. Industrial	1. <=Good	1. Yes	4.875061	130.982177
3	2003	43	2. Married	3. Asian	4. College Grad	2. Middle Atlantic	2. Information	2. >=Very Good	1. Yes	5.041393	154.685293
4	2005	50	4. Divorced	1. White	2. HS Grad	2. Middle Atlantic	2. Information	1. <=Good	1. Yes	4.318063	75.043154

Figura 1.1: Exemplo de registros do conjunto de dados de salários.

Exercício 1. Utilizando o código nesse [link](#). Faça uma análise do comportamento entre as variáveis de idade e salário. Faça o mesmo para nível de escolaridade e salário.

1.3.2 Mercado de ações

Enquanto o conjunto de dados de salários aborda a previsão de uma variável numérica contínua, neste exemplo o objetivo é prever um resultado qualitativo. Trata-se de um problema clássico de classificação, em que desejamos prever categorias ao invés de valores numéricos. Um exemplo

	Year	Lag1	Lag2	Lag3	Lag4	Lag5	Volume	Today	Direction
0	2001	0.381	-0.192	-2.624	-1.055	5.010	1.1913	0.959	Up
1	2001	0.959	0.381	-0.192	-2.624	-1.055	1.2965	1.032	Up
2	2001	1.032	0.959	0.381	-0.192	-2.624	1.4112	-0.623	Down
3	2001	-0.623	1.032	0.959	0.381	-0.192	1.2760	0.614	Up
4	2001	0.614	-0.623	1.032	0.959	0.381	1.2057	0.213	Up

Figura 1.2: Exemplo de registros do conjunto de dados de ações.

interessante envolve dados do mercado financeiro (Fig. 1.2), que incluem as variações diárias do índice S&P 500 ao longo de um período de cinco anos, entre 2001 e 2005. Esse conjunto de dados, que chamaremos de *Smarket*, busca prever a direção do mercado em um determinado dia (se irá subir ou cair), utilizando como variáveis explicativas as mudanças percentuais dos cinco dias anteriores.

Diferente da tarefa de regressão, aqui o desafio consiste em classificar o movimento do mercado como sendo uma alta (*Up*) ou uma baixa (*Down*). Embora o comportamento passado do índice possa não fornecer uma regra clara para prever o movimento do dia seguinte, pequenas tendências ou padrões podem ser identificados com métodos de aprendizado estatístico.

Exercício 2. Explorar os dados do mercado de ações utilizando esse [código](#).

1.4 Um conselho: a importância de ser ruim antes de ser bom

É natural que, quando começamos a fazer algo, a gente faça essa coisa muito malfeita ou cheia de defeitos. Isso é comum em qualquer processo de aprendizagem, e sempre foi assim, desde o início dos tempos.

Quando comecei a programar em Python, muita coisa sobre a linguagem eu aprendi por conta própria, apesar de já ter feito alguns cursos básicos em C. Programei de forma amadora em Python por muitos anos, até que, no doutorado, precisei aprender a programar de forma mais organizada e profissional. Lembro que, nessa época, um amigo da pós-graduação me apresentou ao "submundo da programação". Foi aí que aprendi muito do que sei hoje sobre terminal do Linux, Git, e foi também quando comecei a usar o Vim.

Uma das coisas que esse amigo me mostrou foi o Pylint, que nada mais é do que um verificador de bugs e qualidade de código para Python. O Pylint é bem rigoroso na análise, e ainda te dá, ao final, uma nota que vai até 10. Nessa fase, apesar de já ter evoluído bastante, meus códigos ainda recebiam notas por volta de 6 ou 7. Resolvi então rodar o Pylint nos meus códigos antigos pra ter uma noção de quão ruins eles eram — e a nota final foi -900. Pois é, existe um limite superior para o quão bem você consegue fazer algo, mas aparentemente o fundo do poço é infinito.

O que eu queria mostrar com essa história é que faz parte do processo de aprendizado ser ruim no começo e melhorar com o tempo. Falo isso porque, hoje em dia, com o crescimento dos LLMs, a gente fica tentado a pular essa etapa de errar muito até acertar, e ir direto pra fase em que escrevemos códigos limpos, bem comentados, identados e organizados. Mas não se enganem: apesar da aparência profissional, depender de LLMs pra escrever tudo atrapalha justamente essa parte essencial de aprender errando.

Nessas notas, vários exercícios envolvem escrever códigos em Python. Meu conselho é: não tenham vergonha de errar, de escrever soluções ruins ou confusas. Isso é absolutamente normal. Vocês estão aqui para evoluir — e errar faz parte do processo.

Capítulo 2

Fundamentos do aprendizado supervisionado

O aprendizado supervisionado é uma das principais áreas do aprendizado de máquina e da estatística, tendo como objetivo construir modelos capazes de prever uma variável de interesse Y a partir de um conjunto de variáveis explicativas X . Este paradigma baseia-se em dados rotulados, ou seja, em observações para as quais tanto as covariáveis quanto a variável de resposta são conhecidas.

2.1 Formulação do problema

Ao longo deste capítulo, assumiremos que dispomos de uma amostra de dados $(X_i, Y_i)_{i=1}^n$, em que cada par (X_i, Y_i) é uma realização de um mesmo par de variáveis aleatórias (X, Y) . Além disso, adotaremos a hipótese de que estas observações são *i.i.d.* (independentes e identicamente distribuídas). Esta suposição simplifica a análise teórica, permitindo o uso de ferramentas como leis dos grandes números e teoremas de concentração. Na prática, embora a hipótese de *i.i.d.* nem sempre seja completamente satisfeita, ela é uma aproximação útil e bastante comum em aplicações reais.

Nosso objetivo será utilizar esse conjunto de dados (ou uma parte dele) para aprender um modelo preditivo, que denotaremos por \hat{g} , de forma que $\hat{g}(X) \approx Y$. O significado da relação de aproximação " \approx " será discutido a seguir.

Ao construir um modelo preditivo $\hat{g}(X)$ para estimar uma variável de interesse Y , é essencial definir uma métrica que quantifique o erro cometido pelas previsões. Essa métrica é chamada de **função de perda**, e mede a discrepância entre o valor verdadeiro Y e a predição $\hat{g}(X)$. Duas escolhas comuns para problemas com resposta contínua (regressão) são:

$$L(Y, \hat{g}(X)) = \begin{cases} (Y - \hat{g}(X))^2 & \text{(erro quadrático)} \\ |Y - \hat{g}(X)| & \text{(erro absoluto).} \end{cases}$$

No caso de problemas com resposta discreta (classificação), um exemplo comum de função de perda é a chamada *perda 0-1*, definida por:

$$L(Y, \hat{g}(X)) = \mathbb{I} \{ \hat{g}(X) \neq Y \},$$

a qual simplesmente contabiliza a quantidade de erros cometidos pelo classificador \hat{g} , isto é, o número de vezes em que a predição difere do valor verdadeiro.

A escolha da função de perda impacta diretamente as propriedades do modelo e como ele responde a diferentes tipos de dados ou outliers.

Erro de teste, também chamado de *erro de generalização*, é o erro de predição em uma amostra de teste independente:

$$R_{\mathcal{D}}(\hat{g}) = \mathbb{E} [L(Y, \hat{g}(X)) \mid \mathcal{D}]$$

onde X e Y são sorteados de sua distribuição conjunta (população). Note que \hat{g} **depende de \mathcal{D}** ! Aqui, o conjunto de treinamento \mathcal{D} é fixo, e o erro de teste se refere ao erro para esse conjunto de treinamento específico. Uma quantidade relacionada é o *erro esperado de predição* (ou erro esperado de teste):

$$R(\hat{g}) = \mathbb{E} [L(Y, \hat{g}(X))] = \mathbb{E} [\text{Err}_{\mathcal{D}}].$$

Note que a esperança acima leva em conta toda a aleatoriedade envolvida, incluindo a aleatoriedade do conjunto de treinamento que gerou \hat{g} .

Nosso objetivo será a estimação de $\text{Err}_{\mathcal{D}}$, embora veremos que Err é mais acessível do ponto de vista estatístico, e a maioria dos métodos busca estimar efetivamente esse erro esperado. Estimar $\text{Err}_{\mathcal{D}}$ de maneira condicional não é muito viável na prática.

Erro de treinamento é a perda média sobre a amostra de treinamento:

$$\hat{R}(\hat{g}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{g}(x_i)).$$

Nosso interesse está em conhecer o erro de teste esperado do modelo \hat{g} . À medida que o modelo se torna mais complexo, ele se ajusta melhor aos dados de treinamento e passa a capturar estruturas subjacentes mais complicadas. Com isso, ocorre uma redução no viés, mas um aumento na variância. Existe, portanto, um nível intermediário de complexidade do modelo que minimiza o erro esperado de teste.

Infelizmente, o erro de treinamento não é uma boa estimativa do erro de teste. O erro de treinamento tipicamente diminui à medida que a complexidade do modelo aumenta, podendo até atingir zero quando essa complexidade é suficientemente alta. Entretanto, um modelo com erro de treinamento igual a zero está *superajustado* (overfit) aos dados de treinamento e, geralmente, apresentará baixa capacidade de generalização.

Ao longo deste capítulo, descreveremos diversos métodos para estimar o erro de teste esperado de um modelo. Tipicamente, o modelo dependerá de um parâmetro ou de um conjunto de parâmetros de ajuste α , de modo que podemos escrever a predição como $\hat{g}_{\alpha}(x)$. O parâmetro α controla a complexidade do modelo, e nosso objetivo é encontrar o valor de α que minimize o erro esperado de teste, ou seja, que produza o menor erro médio. Para simplificar a notação, omitiremos frequentemente a dependência explícita de $\hat{g}(x)$ em α .

É importante destacar que temos, na verdade, dois objetivos distintos ao avaliar modelos preditivos:

- **Seleção de modelo:** consiste em comparar diferentes modelos ou configurações a fim de escolher o que apresenta o melhor desempenho.

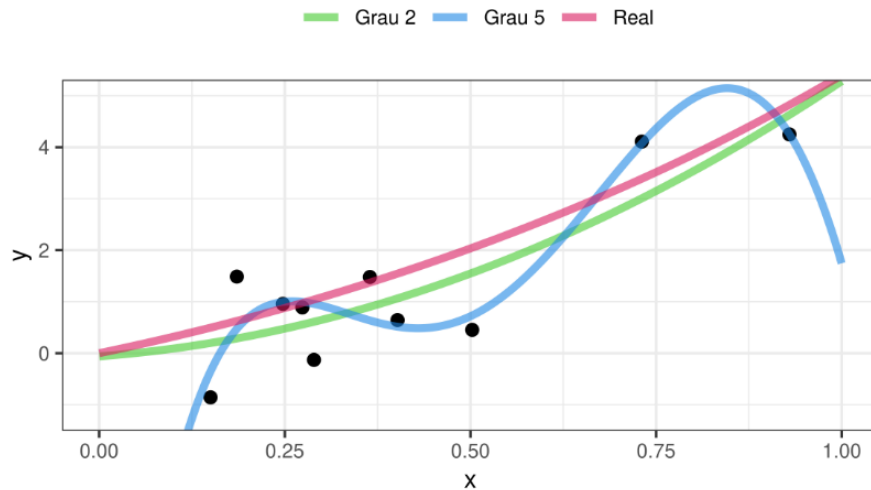


Figura 2.1: Exemplo de sobreajuste. Imagem retirada de (Izbicki and dos Santos, 2020).

- **Avaliação de modelo:** uma vez escolhido o modelo final, o objetivo passa a ser estimar o seu erro de predição (ou erro de generalização) em novos dados.

Para entender como o erro de predição se comporta em função da complexidade do modelo, começamos analisando o caso da **regressão**, onde é possível decompor o erro de teste esperado em termos de *viés* e *variância*. Essa decomposição fornece intuições valiosas sobre o compromisso entre subajuste e sobreajuste, e servirá de base conceitual para as discussões posteriores sobre classificação e seleção de modelos.

2.2 Decomposição de viés-variância em regressão

As origens dos métodos de regressão remontam a mais de 200 anos, com as contribuições de Legendre (1805) e Gauss (1809), que introduziram o método dos mínimos quadrados para modelar o movimento dos planetas ao redor do Sol. Atualmente, a estimação de funções de regressão é um dos pilares fundamentais da estatística.

Embora as primeiras soluções para este problema sejam antigas, apenas nas últimas décadas, com o avanço das tecnologias de computação e armazenamento, novas abordagens puderam ser exploradas. Em especial, o crescimento exponencial da quantidade de dados disponíveis tem impulsionado o desenvolvimento de métodos que fazem menos suposições sobre o comportamento real dos fenômenos estudados.

Esse cenário trouxe novos desafios: por exemplo, métodos clássicos muitas vezes não conseguem lidar adequadamente com bancos de dados em que o número de variáveis excede o número de observações, uma situação comum nos contextos atuais. Além disso, aplicações envolvendo dados complexos — como imagens ou textos — têm se tornado frequentes e demandam técnicas mais sofisticadas.

De modo geral, o objetivo de um modelo de regressão é capturar a relação entre uma variável aleatória de interesse $Y \in \mathbb{R}$ e um vetor de covariáveis $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}^p$. O foco está em

estimar a chamada função de regressão, definida por

$$r(\mathbf{x}) := \mathbb{E}[Y \mid X = \mathbf{x}].$$

A motivação para estudar essa função está relacionada ao problema de minimizar o erro quadrático. Para ilustrar, considere uma variável aleatória Z e a função objetivo

$$\phi(t) = \mathbb{E}[(Z - t)^2],$$

em que buscamos o valor $t \in \mathbb{R}$ que minimiza $\phi(t)$. Derivando em relação a t e igualando a zero, obtemos:

$$\phi'(t) = \mathbb{E}[2(Z - t)] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad t = \mathbb{E}[Z].$$

Portanto, o valor ótimo de t que minimiza o erro quadrático é justamente a esperança de Z .

Esse raciocínio se estende naturalmente ao contexto de regressão. Nosso objetivo passa a ser encontrar uma função $g(\mathbf{x})$ que minimize

$$\phi(g) = \mathbb{E}[(Y - g(X))^2] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[(Y - g(\mathbf{x}))^2 \mid X = \mathbf{x}]].$$

Fixando $X = \mathbf{x}$, $g(\mathbf{x})$ se comporta como um número, e, pelo argumento anterior, a minimização local de $\mathbb{E}[(Y - g(\mathbf{x}))^2 \mid X = \mathbf{x}]$ ocorre quando $g^*(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[Y \mid X = \mathbf{x}]$.

Assim, a função de regressão $r(\mathbf{x})$ é, sob a métrica de erro quadrático, a melhor escolha para aproximar Y em função de \mathbf{x} .

Exercício 3. *Seja*

$$\varphi(t) = \mathbb{E}[|Z - t|].$$

Encontre o t que minimiza a expressão acima.

Agora, suponha que o modelo verdadeiro seja dado por $Y = g^*(X) + \varepsilon$, onde ε é um ruído com $\mathbb{E}[\varepsilon] = 0$, independente das covariáveis X . Nosso objetivo é estudar o erro quadrático esperado de um modelo preditivo $\hat{g}(x)$ que tenta estimar y a partir de x .

O erro de predição é medido pela perda quadrática $(y - \hat{g}(x))^2$, e buscamos decompor o valor esperado desse erro em três componentes: variância, viés ao quadrado e ruído irreduzível, considerando x fixado.

A função ótima g^* é definida como:

$$g^*(x) = \arg \min_g \mathbb{E}[(y - g(x))^2].$$

Para a decomposição, começamos adicionando e subtraindo $g^*(x)$ no termo de erro esperado:

$$\mathbb{E}[(y - \hat{g}(x))^2] = \mathbb{E}[(y - g^*(x) + g^*(x) - \hat{g}(x))^2].$$

Expandindo o quadrado, obtemos:

$$\mathbb{E}[(y - g^*(x))^2] + \mathbb{E}[(g^*(x) - \hat{g}(x))^2] + 2\mathbb{E}[(y - g^*(x))(g^*(x) - \hat{g}(x))].$$

O primeiro termo, $\mathbb{E}[(y - g^*(x))^2]$, representa a variância do ruído ε e, portanto, é irreduzível. O segundo termo, $\mathbb{E}[(g^*(x) - \hat{g}(x))^2]$, captura o erro introduzido pelo modelo $\hat{g}(x)$. O terceiro termo é nulo, pois $y - g^*(x) = \varepsilon$ tem média zero e é independente de $\hat{g}(x)$.

Portanto, temos a seguinte decomposição:

$$\mathbb{E}[(y - \hat{g}(x))^2] = \underbrace{\mathbb{E}[(y - g^*(x))^2]}_{\text{ruído irreduzível}} + \mathbb{E}[(g^*(x) - \hat{g}(x))^2].$$

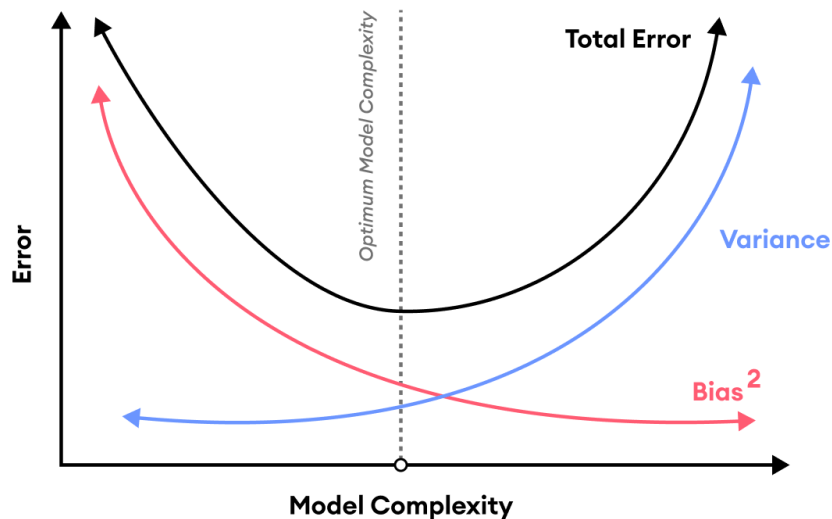
Agora, o termo $\mathbb{E}[(g^*(x) - \hat{g}(x))^2]$ pode ser decomposto em viés e variância:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(g^*(x) - \hat{g}(x))^2] &= \mathbb{E}[(g^*(x) - \mathbb{E}[\hat{g}(x)] + \mathbb{E}[\hat{g}(x)] - \hat{g}(x))^2] \\ &= (g^*(x) - \mathbb{E}[\hat{g}(x)])^2 + \text{Var}(\hat{g}(x)), \end{aligned}$$

onde o termo cruzado é novamente nulo por independência.

Finalmente, temos a seguinte decomposição clássica:

$$\mathbb{E}[(y - \hat{g}(x))^2] = \underbrace{\mathbb{E}[(y - g^*(x))^2]}_{\text{ruído irreduzível}} + \underbrace{(g^*(x) - \mathbb{E}[\hat{g}(x)])^2}_{\text{viés}^2} + \underbrace{\text{Var}(\hat{g}(x))}_{\text{variância}}.$$



Essa decomposição nos permite entender um dos conceitos fundamentais em aprendizado de máquina e estatística: o **trade-off viés-variância**. Em termos simples, existe uma relação inversa entre o viés e a variância de um modelo. Modelos mais simples tendem a ter baixa variância, pois suas previsões mudam pouco ao variar a amostra de treinamento, mas frequentemente apresentam alto viés por não capturarem toda a complexidade da função $g^*(x)$. Por outro lado, modelos mais complexos conseguem ajustar melhor os dados e reduzir o viés, mas tendem a ter alta variância, pois são mais sensíveis a flutuações nas amostras de treino. O desafio central em modelagem preditiva é encontrar um equilíbrio entre essas duas quantidades, de modo a minimizar o erro total. Esse equilíbrio é essencial para garantir que o modelo generalize bem para novos dados, sem ser excessivamente simples (subajuste) ou excessivamente complexo (sobreajuste).

Resumindo: no caso da perda quadrática, o erro total pode ser decomposto como:

$$\text{Erro Total} = \text{Erro Irreduzível} + \text{Viés}^2 + \text{Variância}.$$

Exercício 4. Acesse o notebook [aqui](#) e faça experimentos com o código mudando o tamanho da amostra, random state, grau dos polinômios, etc. Além disso, aplique o método de validação cruzada k-fold.

2.3 Data Splitting e Validação Cruzada

Em situações onde há abundância de dados, uma abordagem comum é dividir aleatoriamente o conjunto em três partes: um conjunto de treinamento, um conjunto de validação e um conjunto de teste. O conjunto de treinamento é utilizado para ajustar os modelos; o conjunto de validação serve para estimar o erro de predição e realizar a seleção do modelo; e o conjunto de teste é reservado para avaliar o erro de generalização final do modelo escolhido.

IMPORTANTE! Idealmente, o conjunto de teste deve ser mantido isolado — como se estivesse em um "cofre"— e só ser acessado ao final da análise de dados. Caso utilizemos o conjunto de teste de forma repetida durante a seleção do modelo, escolhendo aquele com menor erro no teste, acabaremos subestimando o verdadeiro erro de generalização, às vezes de maneira significativa.

Não há uma regra única para definir a quantidade de observações em cada uma das três divisões, pois isso depende da razão sinal-ruído dos dados e do tamanho da amostra disponível. Uma divisão típica é utilizar cerca de 50% dos dados para treinamento e 25% para validação e teste, respectivamente.



Figura 2.2: Divisão em treino, validação e teste. Tirado de (Hastie et al., 2001).

No Python, podemos realizar essa divisão utilizando a biblioteca `scikit-learn`. O procedimento padrão é, primeiramente, dividir os dados em duas partes: treino e teste. Em seguida, subdividir a parte de treino em treino e validação.

Listing 2.1: Divisão em treino, validação e teste

```
1 from sklearn.model_selection import train_test_split
2
3 # Suponha que temos dados X e respostas Y
4 # X: matriz de covariáveis (n_samples x n_features)
5 # Y: vetor de respostas (n_samples,)
6
7
8 # Primeira divisao: treino e restante (validacao + teste)
9 X_train, X_rest, Y_train, Y_rest = train_test_split(
10     X, Y, test_size=0.5, random_state=42)
11
```

```

12 # Segunda divisao: validacao e teste a partir do restante
13 X_val, X_test, Y_val, Y_test = train_test_split(
14     X_rest, Y_rest, test_size=0.5, random_state=42)
15
16 print("Treino:", X_train.shape)
17 print("Validacao:", X_val.shape)
18 print("Teste:", X_test.shape)

```

No exemplo acima, separamos 25% dos dados para o conjunto de teste e, dos 75% restantes, cerca de 33% foi alocado para validação. Assim, o resultado final aproximado seria: 50% dos dados para treino, 25% para validação e 25% para teste, como discutido anteriormente.

ATENÇÃO: É importante definir o argumento `random_state` para garantir reprodutibilidade da divisão dos dados.

Embora a divisão treino/validação/teste seja bastante comum, em situações onde a quantidade de dados é limitada, desperdiçar uma parte significativa da amostra apenas para validação pode ser custoso. Nesse contexto, uma estratégia amplamente utilizada é a **validação cruzada**, em especial o *k-fold cross-validation*.

A ideia do *k-fold* é dividir o conjunto de dados em k subconjuntos (ou *folds*) de tamanhos aproximadamente iguais. Em cada uma das k iterações, utilizamos $k - 1$ desses subconjuntos para treinar o modelo e o subconjunto restante para validá-lo. No final, o erro de validação é calculado como a média dos erros obtidos em cada uma das iterações.

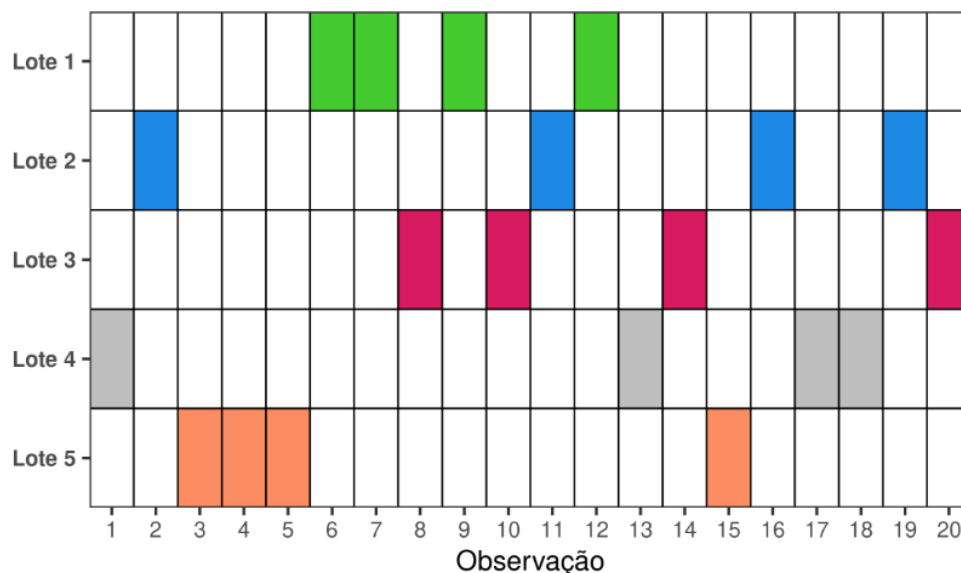


Figura 2.3: Esquema com amostra de tamanho 20 e 5 folds. Retirado de [Izbicki and dos Santos \(2020\)](#).

Essa técnica tem como vantagem utilizar o máximo de dados possível para treinamento em

cada repetição, reduzindo a variância da estimativa do erro de generalização. Além disso, o *k-fold* ajuda a mitigar a dependência da divisão aleatória dos dados, já que cada observação é utilizada tanto para treino quanto para validação ao longo do processo.

No Python, a implementação do *k-fold cross-validation* pode ser feita utilizando a biblioteca `scikit-learn` da seguinte maneira:

Listing 2.2: Validação cruzada k-fold

```
1 from sklearn.model_selection import KFold
2
3 # Suponha que temos dados X e respostas Y
4 k = 5
5 kf = KFold(n_splits=k, shuffle=True, random_state=42)
6
7 for fold, (train_index, val_index) in enumerate(kf.split(X)):
8     X_train, X_val = X[train_index], X[val_index]
9     Y_train, Y_val = Y[train_index], Y[val_index]
10    print(f"Fold {fold+1}:")
11    print("Treino:", X_train.shape, "Validacao:", X_val.shape)
```

No exemplo acima, o conjunto de dados é dividido em $k = 5$ subconjuntos. O argumento `shuffle=True` garante que as observações sejam embaralhadas antes da divisão em folds, e o `random_state` garante a reprodutibilidade dos resultados.

Exercício 5. Acesse o notebook [aqui](#) e faça experimentos com o código mudando o tamanho da amostra, *random state*, etc.

Capítulo 3

Introdução à regressão via mínimos quadrados

3.1 Mínimos quadrados

O método dos mínimos quadrados tem suas origens no início do século XIX e está intimamente ligado à história da astronomia e da estatística. Ele foi introduzido formalmente por Carl Friedrich Gauss, que o utilizava desde 1795 em seus trabalhos com órbitas planetárias, embora o primeiro a publicar sobre o método tenha sido Adrien-Marie Legendre, em 1805.

Legendre apresentou o método em seu trabalho sobre o cálculo de órbitas cometárias, propondo uma técnica para ajustar curvas a dados experimentais minimizando a soma dos quadrados dos erros. Poucos anos depois, em 1809, Gauss publicou seu famoso livro *Theoria Motus Corporum Coelestium*, onde apresentou uma justificativa probabilística do método com base na distribuição normal dos erros.

Desde então, os mínimos quadrados tornaram-se uma das ferramentas fundamentais em estatística, ciência de dados e análise numérica, sendo aplicados em regressão linear, ajuste de modelos, filtragem de sinais e muitos outros contextos científicos e tecnológicos.

Motivados por esses contextos, consideremos agora o seguinte problema: queremos encontrar um vetor β tal que

$$y = X\beta.$$

Essa expressão possui solução se, e somente se, $y \in \text{Ran } X$. Mas o que podemos fazer quando queremos resolver uma equação que não tem solução? Por exemplo, se $y = X\beta + \varepsilon$ onde ε é um erro aleatório de medição?

À primeira vista, essa pode parecer uma pergunta boba, pois se não há solução, então não há solução. No entanto, situações em que desejamos resolver uma equação sem solução podem surgir naturalmente — por exemplo, quando a equação vem de dados experimentais. Se não houver nenhum erro, o vetor do lado direito y pertence à imagem de X , e a equação é consistente.

Porém, na prática, é impossível eliminar completamente os erros de medição. Assim, pode acontecer de uma equação que teoricamente deveria ser consistente não possuir solução.

O que fazer, então, nessa situação?

A ideia mais simples é escrever o erro na forma

$$\|X\beta - y\|$$

e tentar encontrar o vetor β que minimiza essa quantidade. Se conseguirmos encontrar um β tal que o erro seja zero, então o sistema é consistente e temos uma solução exata. Caso contrário, obtemos a chamada *solução de mínimos quadrados*.

O nome *mínimos quadrados* vem do fato de que minimizar $\|X\beta - y\|$ é equivalente a minimizar

$$\|X\beta - y\|^2 = \sum_{k=1}^m |(X\beta)_k - y_k|^2 = \sum_{k=1}^m \left| \sum_{j=1}^n X_{k,j} \beta_j - y_k \right|^2,$$

isto é, estamos minimizando a soma dos quadrados de funções lineares.

Existem diversas maneiras de encontrar a solução de mínimos quadrados. Se estivermos em \mathbb{R}^n , e tudo for real, podemos ignorar os valores absolutos. Nesse caso, basta calcular as derivadas parciais em relação a cada β_j e encontrar onde todas elas se anulam — o que nos dará o ponto de mínimo.

Exercício 6. Encontre a solução do problema de mínimos quadrados derivando e igualando à zero.

Existe uma forma mais simples de encontrar o mínimo. De fato, ao considerarmos todos os vetores β , o vetor $X\beta$ percorre todo o espaço imagem de X , ou seja, $\text{Ran } X$. Portanto, minimizar $\|X\beta - y\|$ equivale a calcular a menor distância de y até $\text{Ran } X$.

Assim, $\|X\beta - y\|^2$ é mínima se, e somente se,

$$X\beta = P_{\text{Ran } X} y,$$

onde $P_{\text{Ran } X}$ denota a projeção ortogonal de y sobre o subespaço imagem de X .

Se conhecemos uma base ortogonal $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ de $\text{Ran } X$, podemos calcular $P_{\text{Ran } X} y$ pela fórmula:

$$P_{\text{Ran } X} y = \sum_{k=1}^n \frac{\langle y, \mathbf{v}_k \rangle}{\|\mathbf{v}_k\|^2} \mathbf{v}_k.$$

Caso só tenhamos uma base qualquer de $\text{Ran } X$, é necessário utilizar o processo de Gram-Schmidt para ortogonalizá-la antes de aplicar a fórmula.

Existe, no entanto, uma alternativa mais direta. A condição de que $X\beta = P_{\text{Ran } X} y$ é equivalente a exigir que o vetor $y - X\beta$ seja ortogonal a $\text{Ran } X$, ou seja,

$$y - X\beta \perp \text{coluna de } X.$$

Seja $X = [a_1, a_2, \dots, a_n]$, onde cada a_k é uma coluna. A condição acima é equivalente a:

$$\langle y - X\beta, a_k \rangle = 0, \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, n.$$

Ou, de forma matricial:

$$X^*(y - X\beta) = 0,$$

o que é equivalente à chamada *equação normal*:

$$X^* X \beta = X^* y.$$

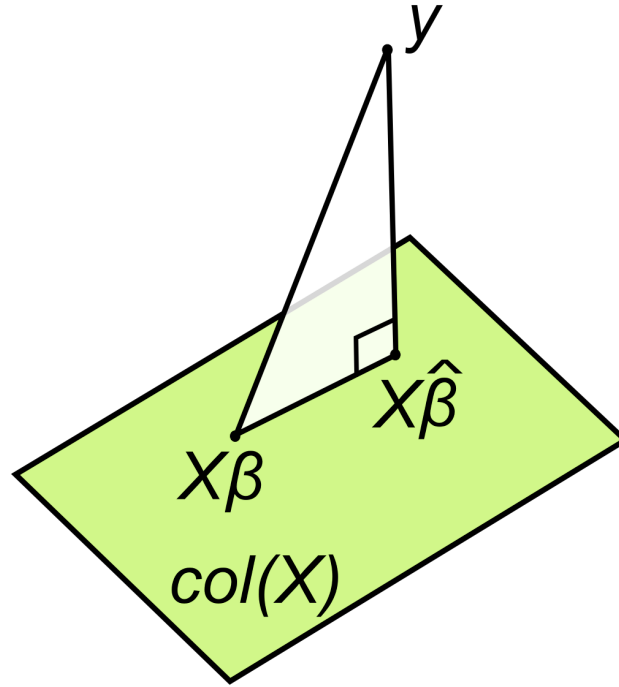


Figura 3.1: Projeção ortogonal de y no espaço coluna de X .

A solução dessa equação nos fornece a solução de mínimos quadrados da equação $X\beta = y$. Note que a solução é única se, e somente se, X^*X for inversível.

Agora, se β é uma solução da equação normal $X^*X\beta = X^*y$ (ou seja, uma solução de mínimos quadrados da equação $X\beta = y$), então $X\beta = P_{\text{Ran } X}y$. Assim, para encontrar a projeção ortogonal de y sobre o espaço coluna $\text{Ran } X$, basta resolver a equação normal $X^*X\beta = X^*y$ e multiplicar a solução por X .

Se o operador X^*X for inversível, então a solução da equação normal é dada por:

$$\beta = (X^*X)^{-1}X^*y,$$

e, portanto, a projeção ortogonal $P_{\text{Ran } X}y$ pode ser escrita como:

$$P_{\text{Ran } X}y = X(X^*X)^{-1}X^*y.$$

Como isso vale para todo y , obtemos a expressão matricial da projeção ortogonal sobre o espaço coluna de X :

$$P_{\text{Ran } X} = X(X^*X)^{-1}X^*.$$

Observação 1. Note que a expressão

$$P_{\text{Ran } X} = X(X^*X)^{-1}X^*.$$

é uma generalização matricial para a projeção ortogonal em vetores da forma

$$\frac{vv^T}{v^Tv} = v(v^Tv)^{-1}v^T,$$

já que para um vetor x qualquer,

$$\frac{\langle v, x \rangle}{\|v\|^2} v = \frac{v^T x}{\|v\|^2} v = \frac{vv^T x}{\|v\|^2} = \frac{vv^T}{\|v\|^2} x.$$

Exemplo 1. Suponha que sabemos que a relação entre x e y é dada por uma parábola da forma

$$y = a + bx + cx^2,$$

e queremos ajustar essa parábola aos dados observados. Os coeficientes desconhecidos a, b, c devem satisfazer o sistema:

$$a + bx_k + cx_k^2 = y_k, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Em forma matricial, esse sistema pode ser escrito como:

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Por exemplo, para os dados do exemplo anterior, devemos resolver a equação de mínimos quadrados:

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Então calculamos:

$$X^T X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 3 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 18 \\ 2 & 18 & 26 \\ 18 & 26 & 114 \end{pmatrix}.$$

E também:

$$X^T y = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 3 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ -5 \\ 31 \end{pmatrix}.$$

Portanto, a equação normal $X^T X \beta = X^T y$ é:

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 18 \\ 2 & 18 & 26 \\ 18 & 26 & 114 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ -5 \\ 31 \end{pmatrix},$$

cuja solução única é:

$$a = \frac{86}{77}, \quad b = -\frac{62}{77}, \quad c = \frac{43}{154}.$$

Portanto, a parábola que melhor se ajusta aos dados é:

$$y = \frac{86}{77} - \frac{62}{77}x + \frac{43}{154}x^2.$$

3.2 Resolução Numérica

A forma fechada da solução dos mínimos quadrados, dada por

$$(X^T X) \hat{\beta} = X^T y \Rightarrow \hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y,$$

embora útil em termos analíticos, pode ser instável numericamente e custosa para grandes dimensões. Assim, é comum empregar abordagens numéricas mais robustas.

Fatoração QR. Um método bastante utilizado é a decomposição QR , na qual a matriz $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ é escrita como $X = QR$, onde Q possui colunas ortonormais (ou seja, $Q^T Q = I$) e $R \in \mathbb{R}^{p \times p}$ é triangular superior. Essa fatoração evita a inversão direta da matriz $X^T X$ e proporciona maior estabilidade numérica.

Como $X^T X = R^T Q^T QR = R^T R$, temos:

$$(X^T X) \hat{\beta} = X^T y \iff R^T R \hat{\beta} = R^T Q^T y \iff R \hat{\beta} = Q^T y.$$

Portanto, basta resolver um sistema linear triangular com matriz R , o que é computacionalmente eficiente. O custo total permanece na ordem de $\mathcal{O}(d^3)$. Em situações onde d é grande, métodos iterativos como o gradiente conjugado também podem ser considerados (ver Golub e Loan, 1996).

3.3 Estimativas de erros para regressão linear

Como vimos no primeiro capítulo, um conceito central na análise de métodos de aprendizado de máquina é compreender o comportamento de viés e variância do modelo.

Vamos assumir que os dados seguem o modelo

$$y = \langle x, \beta \rangle + \varepsilon,$$

com $\mathbb{E}[\varepsilon] = 0$ e $\text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2$ e os pontos x estão fixos, ou seja, a aleatoriedade é apenas sobre o erro ε . Seja $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y$ a solução obtida por mínimos quadrados. Então:

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

isto é, o estimador é não-viesado.

Agora vamos estimar o risco dado que estamos utilizando o estimador $\hat{\beta}$, ou seja:

$$R(\hat{\beta}) = \frac{1}{n} \mathbb{E} [\|y - X\hat{\beta}\|^2],$$

Precisamos ter atenção redobrada na aleatoriedade da expressão acima, isso porque o erro que existe no nosso dataset no momento da estimação de $\hat{\beta}$ é potencialmente diferente do erro utilizado no cálculo do risco. Podemos representar isso da seguinte forma

$$R(\hat{\beta}) = \frac{1}{n} \mathbb{E} [\|y' - X(X^T X)^{-1} X^T y\|^2].$$

Novamente, temos um y' que será utilizado no cálculo do risco, e um y que é utilizado no cálculo de $\hat{\beta}$. Suponha então que $y' = X\beta + \epsilon'$ e que $y = X\beta + \epsilon$. Logo, a expressão acima fica:

$$\begin{aligned} R(\hat{\beta}) &= \frac{1}{n} \mathbb{E} [\|y' - X(X^T X)^{-1} X^T y\|^2] \\ &= \frac{1}{n} \mathbb{E} [\|X\beta + \epsilon' - X(X^T X)^{-1} X^T (X\beta + \epsilon)\|^2] \\ &= \frac{1}{n} \mathbb{E} [\|\epsilon' - X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon\|^2] \\ &= \frac{1}{n} \mathbb{E} [\|\epsilon'\|^2] - \frac{2}{n} \mathbb{E} [\langle \epsilon', X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon \rangle] + \frac{1}{n} \mathbb{E} [\epsilon^T X(X^T X)^{-1} X^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] \\ &= \sigma^2 - \frac{2}{n} \mathbb{E} [\epsilon'^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] + \frac{1}{n} \mathbb{E} [\epsilon^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] \end{aligned}$$

Agora note que temos dois casos possíveis:

- Se $\epsilon' = \epsilon$, isto é, $y = y'$, temos que a expressão acima fica:

$$\begin{aligned} R(\hat{\beta}) &= \sigma^2 - \frac{1}{n} \mathbb{E} [\epsilon^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] \\ &= \sigma^2 - \frac{1}{n} \mathbb{E} [\text{tr}(\epsilon^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon)] \\ &= \sigma^2 - \frac{1}{n} \mathbb{E} [\text{tr}(\epsilon \epsilon^T X(X^T X)^{-1} X^T)] \\ &= \sigma^2 - \frac{\sigma^2 p}{n} \end{aligned}$$

e como estamos usando o mesmo y para estimar e avaliar o modelos, essa quantidade se refere ao **erro de treinamento!**

- Se ϵ' e ϵ são independentes, isto é, y e y' são independentes, então

$$\mathbb{E} [\epsilon'^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] = \mathbb{E} [\epsilon'^T] \mathbb{E} [X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] = 0$$

e portanto a expressão fica:

$$\begin{aligned} R(\hat{\beta}) &= \sigma^2 \frac{1}{n} \mathbb{E} [\epsilon^T X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon] \\ &= \sigma^2 + \frac{\sigma^2 p}{n}. \end{aligned}$$

Nesse caso, como o y utilizado para treinamento e o y' utilizado para estimação do risco são diferentes, a quantidade acima se refere ao **erro de teste!**

- O erro de treinamento esperado é $(1 - \frac{p}{n}) \sigma^2$, enquanto o erro de teste esperado é $(1 + \frac{p}{n}) \sigma^2$. Isso mostra que o erro de treinamento subestima o erro de teste em $\frac{2\sigma^2 p}{n}$, caracterizando o *overfitting*. Essa diferença pode ser usada para seleção de modelos.
- Para que o risco excessivo seja pequeno comparado a σ^2 , é necessário que $\frac{p}{n}$ seja pequeno. Isso dificulta a aplicação direta de mínimos quadrados em situações de alta dimensionalidade, onde $p \approx n$ ou $p \gg n$. Nesses casos, técnicas de regularização, como regressão ridge ou penalizações com norma- ℓ_1 , são necessárias.

3.4 Um pouco de inferência

Perceba que a teoria acima não depende de informações sobre os dados — a única coisa que fizemos foi encontrar a melhor aproximação de y no espaço gerado pelas colunas de X . Ou seja, tratamos X e y como vetores fixos, e a projeção ortogonal $P_{\text{Ran } X}y$ é puramente uma construção geométrica.

Suponha agora que temos um modelo probabilístico associado aos dados:

$$Y = \langle x, \beta \rangle + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, 1),$$

onde $x \in \mathbb{R}^p$ é um vetor fixo (não aleatório), $\beta \in \mathbb{R}^p$ é o vetor de parâmetros desconhecido, e ε é um erro aleatório com distribuição normal padrão.

Se coletamos n observações (x_i, Y_i) , $i = 1, \dots, n$, podemos escrever o modelo vetorialmente como:

$$y = X\beta + \varepsilon,$$

onde:

- $y \in \mathbb{R}^n$ é o vetor de respostas;
- $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ é a matriz cujas linhas são os vetores x_i^T ;
- $\varepsilon \sim N(0, I_n)$ é o vetor de erros independentes com variância 1.

Neste caso, a estimativa de mínimos quadrados:

$$\hat{\beta} = (X^* X)^{-1} X^* y$$

é também o *estimador de máxima verossimilhança* de β sob o modelo gaussiano. Além disso, por ser combinação linear de variáveis gaussianas, $\hat{\beta}$ é também uma variável aleatória com distribuição normal.

Teorema 1. Se $y = X\beta + \varepsilon$, com $\varepsilon \sim N(0, I_n)$, então:

$$\hat{\beta} = (X^* X)^{-1} X^* y \sim N\left(\beta, (X^* X)^{-1}\right).$$

Demonstração. Note que:

$$\hat{\beta} = (X^*X)^{-1}X^*y = (X^*X)^{-1}X^*(X\beta + \varepsilon) = \beta + (X^*X)^{-1}X^*\varepsilon.$$

Como $\varepsilon \sim N(0, I_n)$, e $(X^*X)^{-1}X^*\varepsilon$ é uma combinação linear de gaussianas, então:

$$\hat{\beta} \sim N\left(\beta, (X^*X)^{-1}X^*X(X^*X)^{-1}\right) = N\left(\beta, (X^*X)^{-1}\right).$$

□

Essa propriedade permite que façamos *inferência estatística* sobre os coeficientes β . Por exemplo, para testar a hipótese nula:

$$H_0 : \beta_j = 0,$$

podemos usar o fato de que:

$$\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma_j^2), \quad \text{com } \sigma_j^2 = [(X^*X)^{-1}]_{jj}.$$

Ou seja, o valor padronizado

$$Z_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\sigma_j^2}} \sim N(0, 1) \quad \text{sob } H_0.$$

Isso nos permite construir intervalos de confiança e calcular valores- p .

Exemplo 2. Suponha que queremos um intervalo de confiança para β_j com nível de confiança $1 - \alpha$. Como $\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma_j^2)$, temos:

$$\mathbb{P}\left(\hat{\beta}_j - z_{\alpha/2}\sqrt{\sigma_j^2} \leq \beta_j \leq \hat{\beta}_j + z_{\alpha/2}\sqrt{\sigma_j^2}\right) = 1 - \alpha,$$

onde $z_{\alpha/2}$ é o quantil superior de ordem $1 - \alpha/2$ da normal padrão.

Para mais detalhes sobre inferência de parâmetros, ver ([James et al., 2013](#), Capítulo 3).

Bibliografia

[Bach \(2024\)](#)

Capítulo 4

Introdução à classificação via regressão logística

4.1 Classificador de Bayes

Sejam $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ amostras independentes e identicamente distribuídas, onde $X_i \in \mathbb{R}^p$ representa um vetor de características e $Y_i \in \{0, 1\}$ é o rótulo associado. O objetivo é construir um classificador $\hat{g} : \mathbb{R}^p \rightarrow \{0, 1\}$ que prediga Y a partir de X .

Uma forma comum de avaliar o desempenho de um classificador g é por meio da **função de perda 0–1**, definida por

$$L(g(x), y) = \begin{cases} 0, & \text{se } g(x) = y, \\ 1, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

O **risco verdadeiro** associado a g é dado por

$$R(g) = \mathbb{E}[L(g(X), Y)],$$

onde a esperança é tomada em relação à distribuição conjunta de (X, Y) .

Como vimos anteriormente, no contexto de regressão com perda quadrática, a função ótima é dada por

$$g^*(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x],$$

isto é, a média condicional de y dado X .

No caso de classificação binária com perda 0–1, a função ótima assume uma forma diferente. Vamos agora investigar qual é a forma da função g^* que minimiza o risco verdadeiro.

Teorema 2 (Classificador de Bayes e risco 0–1). *Seja $\eta(x) = \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$. O classificador de Bayes g^* é definido por*

$$g^*(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } \eta(x) \geq 0,5, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Denotamos por R^* o menor risco verdadeiro possível, isto é,

$$R^* = \inf_g \mathbb{E}[L(g(X), Y)].$$

Então, valem os seguintes resultados:

(a) $R(h^*) = R^*$, ou seja, h^* minimiza o risco verdadeiro e é um classificador de Bayes.

(b) Para qualquer classificador h , o excesso de risco satisfaz

$$R(h) - R^* = 2 \mathbb{E}_X [|\eta(X) - 0,5| \cdot \mathbb{I}\{h(X) \neq h^*(X)\}].$$

Demonstração. **Item (a).** Note que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[L(g(x), Y)] &= \mathbb{E}[\mathbb{I}\{g(X) \neq Y\}] \\ &= \mathbb{E}_X[\mathbb{E}[\mathbb{I}\{g(X) \neq Y\} | X = x]]. \end{aligned}$$

Vamos analisar a expressão dentro da esperança condicional em X . Temos:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\mathbb{I}\{g(X) \neq Y\} | X = x] &= \mathbb{P}(g(X) \neq Y | X = x) \\ &= \mathbb{P}(0 \neq Y | X = x) \mathbb{I}\{g(x) = 0\} + \mathbb{P}(1 \neq Y | X = x) \mathbb{I}\{g(x) = 1\} \\ &= \mathbb{P}(Y = 1 | X = x) \mathbb{I}\{g(x) = 0\} + \mathbb{P}(Y = 0 | X = x) \mathbb{I}\{g(x) = 1\} \\ &= \eta(x) \mathbb{I}\{g(x) = 0\} + (1 - \eta(x)) \mathbb{I}\{g(x) = 1\}. \end{aligned}$$

Nosso objetivo é encontrar a função g que **minimiza** essa expressão. Para isso, basta decidir, para cada x , se devemos escolher $g(x) = 0$ ou $g(x) = 1$. Analisamos caso a caso:

- Se $\eta(x) \geq 0,5$, então $1 - \eta(x) \leq \eta(x)$. Nesse caso, a expressão é minimizada escolhendo $g(x) = 1$, pois isso anula o termo com $\eta(x)$, restando apenas o menor entre os dois.
- Se $\eta(x) < 0,5$, então $\eta(x) < 1 - \eta(x)$, e a expressão é minimizada com $g(x) = 0$.

Portanto, a função g^* definida no teorema de fato minimiza o risco verdadeiro, o que conclui a demonstração do item (a).

Item (b). Queremos mostrar que, para qualquer classificador g ,

$$R(h) - R^* = 2 \mathbb{E}_X [|\eta(X) - 0,5| \cdot \mathbb{I}\{h(X) \neq h^*(X)\}].$$

Começamos com a definição do excesso de risco:

$$\begin{aligned} R(h) - R(g^*) &= \mathbb{E}_X [\eta(X) \mathbb{I}\{g(X) = 0\} + (1 - \eta(X)) \mathbb{I}\{g(X) = 1\}] \\ &\quad - \mathbb{E}_X [\eta(X) \mathbb{I}\{g^*(X) = 0\} + (1 - \eta(X)) \mathbb{I}\{g^*(X) = 1\}]. \end{aligned}$$

Note que a expressão dentro da esperança é nula quando $g(x) = g^*(x)$, logo só precisamos analisar o que acontece quando $g(x) \neq g^*(x)$.

- Se $g^*(x) = 1$, só precisamos analisar o caso de $g(x) = 0$ e daí temos que

$$\begin{aligned} R(h) - R(g^*) &= \mathbb{E}_X [\eta(X) \mathbb{I}\{g(X) = 0\} + (1 - \eta(X)) \mathbb{I}\{g(X) = 1\}] \\ &\quad - \mathbb{E}_X [\eta(X) \mathbb{I}\{g^*(X) = 0\} + (1 - \eta(X)) \mathbb{I}\{g^*(X) = 1\}] \\ &= -(1 - \eta(X)) + \eta(X) \\ &= 2\eta(x) - 1. \end{aligned}$$

Note que como assumimos que $g^*(x) = 1$, então $\eta(x) \geq 0,5$ e portanto $2\eta(x) - 1 \geq 0$.

- Se $g^*(x) = 0$, concluímos de forma análoga que

$$R(h) - R(g^*) = 1 - 2\eta(x).$$

Nesse caso, como $g^*(x) = 0$, temos que $\eta(x) < .5$ e dessa forma $1 - 2\eta(x) \geq 0$. De fato, podemos expressar a solução de forma geral na seguinte forma:

$$R(h) - R^* = 2 \mathbb{E}_X [|\eta(X) - 0,5| \cdot \mathbb{I}\{h(X) \neq h^*(X)\}].$$

Isso prova o item (b).

□

A expressão do item (b) nos dá uma intuição importante: o excesso de risco é mais sensível a erros de classificação quando $\eta(X)$ está longe de 0.5, ou seja, quando a incerteza sobre a classe é baixa. Nesses pontos, errar significa contrariar uma alta confiança, o que resulta em um aumento maior no risco. Por outro lado, se $\eta(X)$ está próximo de 0,5, mesmo que $g(X) \neq g^*(X)$, o impacto no risco é pequeno. Assim, o termo $|\eta(X) - 0,5|$ atua como um peso que penaliza mais fortemente os erros onde a decisão ótima é mais evidente.

4.1.1 O Modelo Logístico

Uma vez entendido o papel da função $\eta(x) = \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$ como componente central da regra de Bayes, torna-se natural buscar maneiras de aproximar essa função a partir dos dados via um estimador g . Um dos modelos mais clássicos para esse fim é a **regressão logística**.

A ideia é modelar diretamente a probabilidade condicional $\mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$ como uma função dos preditores. Um primeiro impulso seria utilizar um modelo linear do tipo $g(x) = \langle \beta, x \rangle$, mas essa abordagem apresenta um problema fundamental: a função linear pode assumir valores fora do intervalo $[0, 1]$, o que é inaceitável para probabilidades.

Para contornar essa limitação, adotamos uma função que mapeia qualquer valor real para o intervalo $(0, 1)$. Na regressão logística, usamos a função logística:

$$g(x) = \frac{e^{\langle \beta, x \rangle}}{1 + e^{\langle \beta, x \rangle}}.$$

É fácil ver que

$$1 - g(x) = \frac{1}{1 + e^{\langle \beta, x \rangle}}.$$

Essa formulação garante que $g(x) \in (0, 1)$ para todo $x \in \mathbb{R}^p$. Podemos reescrever essa expressão como

$$\frac{g(x)}{1 - g(x)} = e^{\langle \beta, x \rangle}.$$

A razão $g(x)/[1 - g(x)]$ é chamada de *odds* e pode assumir qualquer valor entre 0 e ∞ . Valores de odds próximos de 0 indicam probabilidades muito baixas, enquanto valores muito altos indicam alta probabilidade da classe positiva. Por exemplo, $g(x) = 0,2$ implica uma odds

de $\frac{0,2}{1-0,2} = 1/4$, o que corresponde a 1 em cada 5 indivíduos da classe positiva. Já $g(x) = 0,9$ implica uma odds de $\frac{0,9}{1-0,9} = 9$, ou seja, 9 em cada 10.

Odds são tradicionalmente usadas em vez de probabilidades em contextos como apostas, pois se relacionam mais diretamente com estratégias de decisão.

Tomando o logaritmo de ambos os lados da expressão anterior, obtemos:

$$\log \left(\frac{g(x)}{1-g(x)} \right) = \langle \beta, x \rangle.$$

A expressão à esquerda é chamada de *log odds* ou *logito*. Observamos, assim, que o modelo de regressão logística possui um logito linear em x , o que permite tanto uma interpretação estatística clara quanto facilidade de ajuste computacional.

4.1.2 Estimando os Coeficientes da Regressão

Os coeficientes β no modelo logístico são desconhecidos e devem ser estimados a partir dos dados de treinamento disponíveis. Embora uma abordagem possível seja o uso de mínimos quadrados não lineares, o método mais comum e preferido é o de *máxima verossimilhança*, por apresentar melhores propriedades estatísticas.

A intuição básica por trás do uso da máxima verossimilhança para ajustar um modelo de regressão logística é a seguinte: buscamos encontrar um vetor β tal que a probabilidade predita $\hat{g}(x_i)$ para cada observação se aproxime o máximo possível dos valores reais observados $Y_i \in \{0, 1\}$.

Em outras palavras, queremos que $\hat{g}(x_i) \approx 1$ para os indivíduos com $Y_i = 1$, e $\hat{g}(x_i) \approx 0$ para os indivíduos com $Y_i = 0$. Essa ideia pode ser formalizada por meio de uma função chamada *função de verossimilhança*, dada por:

$$\ell(\beta) = \prod_{i:Y_i=1} g(x_i) \prod_{i:Y_i=0} (1-g(x_i)).$$

Mais especificamente, podemos reescrever a função de verossimilhança como:

$$\prod_{k=1}^n \left(\frac{e^{\beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i x_{k,i}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i x_{k,i}}} \right)^{y_k} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i x_{k,i}}} \right)^{1-y_k}.$$

Essa forma incorpora tanto os casos em que $Y_k = 1$ quanto $Y_k = 0$ em uma única expressão compacta.

Tomando o logaritmo da função de verossimilhança, obtemos a **log-verossimilhança**:

$$\log \ell(\beta) = \sum_{k=1}^n \left[y_k \log \left(\frac{e^{\beta_0 + \sum_{i=1}^d \beta_i x_{k,i}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{i=1}^d \beta_i x_{k,i}}} \right) + (1 - y_k) \log \left(\frac{1}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{i=1}^d \beta_i x_{k,i}}} \right) \right].$$

Simplificando os logaritmos, essa expressão pode ser reescrita como:

$$\log \ell(\beta) = \sum_{k=1}^n \left[y_k \langle \beta, x_k \rangle - \log \left(1 + e^{\langle \beta, x_k \rangle} \right) \right],$$

onde $x_k \in \mathbb{R}^d$ inclui o termo de intercepto (ou seja, supomos $x_k = (1, x_{k,1}, \dots, x_{k,d})$) e $\beta \in \mathbb{R}^{d+1}$.

4.2 Um pouco de otimização - O método de Newton

Antes de maximizar a log-verossimilhança, introduzimos o **Método de Newton**. O Método de Newton é um algoritmo iterativo usado para encontrar raízes de uma função. No caso univariado, sua implementação segue os seguintes passos:

1. Encontre a reta tangente à função $f(x)$ no ponto atual (x_n, y_n) , com:

$$y = f'(x_n)(x - x_n) + f(x_n).$$

2. Calcule a interseção da reta tangente com o eixo x , isto é, determine x_{n+1} tal que $f(x_{n+1}) = 0$. Para isso, impomos:

$$0 = f'(x_n)(x_{n+1} - x_n) + f(x_n),$$

o que resulta em:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

3. Avalie a função no novo ponto:

$$y_{n+1} = f(x_{n+1}).$$

4. Verifique o critério de parada: se $y_{n+1} - y_n \approx 0$, então:

return y_{n+1} (convergência atingida).

5. Caso contrário, atualize o ponto:

$$x_n \leftarrow x_{n+1}, \quad y_n \leftarrow y_{n+1},$$

e volte ao passo 1.

Para uma ilustração, ver o seguinte [gif](#).

Em resumo, o Método de Newton para uma variável consiste em atualizar iterativamente o ponto atual segundo a fórmula

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},$$

até que a diferença entre x_n e x_{n+1} seja suficientemente pequena, isto é, até que $|x_n - x_{n+1}| \approx 0$. Esse procedimento corresponde a encontrar o ponto onde a função f se anula, aproximando-se da raiz por meio das tangentes locais.

Se f é uma função fortemente convexa com hessiana Lipschitz contínua, então, desde que o ponto inicial x_0 esteja suficientemente próximo de $x_* = \arg \min f(x)$, a sequência x_0, x_1, x_2, \dots gerada pelo Método de Newton converge para o minimizador (necessariamente único) x_* de f com taxa de convergência quadrática.

Embora o Método de Newton seja frequentemente apresentado como um algoritmo para encontrar raízes de funções (isto é, soluções de $f(x) = 0$), ele também pode ser usado para encontrar pontos críticos de uma função $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, ou seja, pontos onde o gradiente $\nabla f(x)$ se anula.

Para maximizar uma função f , podemos aplicar o Método de Newton à equação $\nabla f(x) = 0$. Nesse caso, a atualização iterativa assume a forma:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k),$$

onde $\nabla f(x_k)$ é o gradiente de f no ponto x_k , e $\nabla^2 f(x_k)$ é a hessiana (a matriz de derivadas segundas).

Se a matriz hessiana for negativa definida, então x_k está em uma vizinhança de um ponto de máximo local de f , e a iteração de Newton caminha nessa direção. O método é particularmente eficiente quando f é suave (duas vezes diferenciável) e fortemente côncava, pois a convergência é rápida e quadrática nas proximidades do máximo.

Em problemas de otimização como a regressão logística, onde queremos maximizar a log-verossimilhança, esse procedimento é especialmente útil: basta aplicar o Método de Newton à função log-verossimilhança $\log \ell(\beta)$ para obter uma sequência de estimativas para os coeficientes β .

Para maximizar a log-verossimilhança de uma regressão logística, usamos o Método de Newton aplicando-o à função

$$\ell(\beta) = \sum_{i=1}^n \left[Y_i \langle \beta, x_i \rangle - \log \left(1 + e^{\langle \beta, x_i \rangle} \right) \right].$$

- **Gradiente:** o vetor gradiente da log-verossimilhança em relação a $\beta \in \mathbb{R}^d$ é dado por:

$$\nabla \ell(\beta) = \sum_{i=1}^n (Y_i - g(x_i)) x_i,$$

onde $g(x_i) = \frac{e^{\langle \beta, x_i \rangle}}{1 + e^{\langle \beta, x_i \rangle}}$ é a predição do modelo logístico no ponto x_i . Essa expressão pode ser escrita matricialmente como:

$$\nabla \ell(\beta) = X^\top (Y - \hat{g}),$$

em que $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ é a matriz de design, $Y \in \mathbb{R}^n$ o vetor de respostas e $\hat{g} \in \mathbb{R}^n$ o vetor das probabilidades preditas.

- **Hessiana:** a matriz hessiana da log-verossimilhança é dada por:

$$\nabla^2 \ell(\beta) = -X^\top W X,$$

onde $W \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz diagonal com elementos

$$W_{ii} = g(x_i)(1 - g(x_i)).$$

Exercício 7. Prove a expressão do gradiente e hessiana em dimensão 1 e se convença que vale para dimensões maiores.

Note que a hessiana é negativa definida sempre que $0 < g(x_i) < 1$, o que garante que estamos maximizando uma função côncava. O método de Newton atualiza os parâmetros pela regra:

$$\beta_{k+1} = \beta_k - [\nabla^2 \ell(\beta_k)]^{-1} \nabla \ell(\beta_k).$$

No notebook que você encontra [aqui](#), apresentamos uma implementação do método de Newton para resolver o problema de regressão logística via maximização da verossimilhança.

Exercício 8. Entenda o código acima.

4.3 Outras métricas de avaliação

Nem sempre a função de risco $R(g) = \mathbb{E}[\mathbb{I}(Y \neq g(X))] = \mathbb{P}(Y \neq g(X))$ fornece uma visão completa da qualidade de um classificador g . Em certos contextos, como detecção de doenças raras, o risco pode parecer pequeno mesmo quando o desempenho do modelo está longe do ideal.

Considere, por exemplo, um cenário em que $Y = 1$ representa um paciente doente, e $Y = 0$, um paciente saudável. Suponha que, numa amostra de 1.000 indivíduos, apenas 10 estejam doentes. Um classificador trivial que sempre prediz $g(x) = 0$ (isto é, que todos são saudáveis) terá risco muito baixo, pois $\mathbb{P}(Y = 1)$ é pequena. No entanto, tal modelo falha completamente em identificar os casos realmente relevantes — os pacientes doentes.

Para melhor avaliar o desempenho de classificadores, especialmente em situações de desbalanceamento de classes, é comum recorrer ao uso de *matrizes de confusão*, que distinguem corretamente os diferentes tipos de acerto e erro. A seguir, apresentamos um exemplo típico:

Predição	Valor real	
	$Y = 0$	$Y = 1$
$g(x) = 0$	VN (negativo verdadeiro)	FN (falso negativo)
$g(x) = 1$	FP (falso positivo)	VP (positivo verdadeiro)

Tabela 4.1: Matriz de confusão.

A partir dessa tabela, podemos definir diversas métricas de desempenho. Uma delas é:

- **Sensibilidade** (ou *recall*):

$$\text{Sensibilidade} = \frac{VP}{VP + FN}$$

que representa a proporção de indivíduos doentes corretamente identificados pelo classificador.

- **Especificidade:**

$$\text{Especificidade} = \frac{VN}{VN + FP}$$

Mede a proporção de indivíduos saudáveis corretamente identificados como tais.

- **Valor preditivo positivo (ou precisão):**

$$VPP = \frac{VP}{VP + FP}$$

Indica, entre os exemplos classificados como positivos, quantos de fato são positivos.

- **Valor preditivo negativo:**

$$VPN = \frac{VN}{VN + FN}$$

Representa a proporção de negativos corretos entre os exemplos classificados como negativos.

- **Medida F1:**

$$F1 = \frac{2 \cdot \text{Recall} \cdot \text{Precision}}{\text{Recall} + \text{Precision}}$$

que é a média harmônica entre sensibilidade (S) e precisão (VPP), sendo útil para balancear ambas as medidas.

Considere novamente o classificador constante $g(x) \equiv 0$. Neste caso, ele nunca prevê a classe positiva. Isso resulta em sensibilidade igual a zero (pois nenhum positivo é detectado) e especificidade igual a um (todos os negativos são corretamente identificados). Apesar de apresentar um bom desempenho segundo a especificidade, esse modelo é incapaz de detectar os casos relevantes (os positivos), tornando seu uso questionável.

Por isso, é fundamental considerar múltiplas métricas, principalmente em contextos de desequilíbrio entre classes — como em problemas médicos, onde a classe positiva pode representar uma condição rara.

As estatísticas derivadas da matriz de confusão devem ser interpretadas como estimativas amostrais de probabilidades condicionais. Por exemplo, a sensibilidade estima $\mathbb{P}(g(X) = 1 \mid Y = 1)$, enquanto a especificidade estima $\mathbb{P}(g(X) = 0 \mid Y = 0)$. Para garantir validade e evitar vieses, especialmente sobreajuste, é importante que essas métricas sejam calculadas em uma amostra separada de teste ou validação.

4.4 Ajuste do limiar de decisão

Classificadores probabilísticos, como a regressão logística, produzem uma estimativa da probabilidade condicional $g(x) = \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$. Para converter essa predição contínua em uma decisão binária (classe 0 ou 1), é necessário escolher um *limiar de corte* $t \in [0, 1]$. O valor padrão mais comum é $t = 0,5$, ou seja, prediz-se a classe positiva sempre que $g(x) \geq 0,5$.

No entanto, esse limiar pode ser ajustado de forma estratégica. Em particular, quando as classes estão desbalanceadas — por exemplo, se a classe positiva é rara — o uso de um limiar padrão pode resultar em desempenho insatisfatório. Um classificador pode, por exemplo, raramente atribuir probabilidades maiores que 0,5 à classe positiva, mesmo quando está relativamente confiante, simplesmente porque a classe é rara nos dados.

Ao reduzir o limiar t , tornamo-nos mais propensos a prever a classe positiva, o que tende a aumentar a **sensibilidade (recall)** — isto é, aumentamos a chance de detectar os verdadeiros positivos. Por outro lado, essa mudança normalmente reduz a **precisão (VPP)**, já que mais exemplos negativos podem ser erroneamente classificados como positivos.

De modo análogo, aumentar o limiar tende a aumentar a precisão, mas à custa da sensibilidade.

Limiar t	Recall	Precisão
baixo ($\downarrow t$)	alto	baixo
alto ($\uparrow t$)	baixo	alto

Esse comportamento reflete um trade-off clássico. Em aplicações médicas, por exemplo, pode-se preferir alta sensibilidade para evitar deixar passar casos positivos, mesmo que isso implique

em mais falsos positivos. Já em sistemas de recomendação, pode ser mais importante manter alta precisão, mesmo que alguns casos positivos sejam perdidos.

Na prática, o limiar ideal pode ser escolhido com base em uma métrica combinada (como F1-score) ou por análise da curva ROC ou curva precisão-recall, conforme os objetivos do problema.

4.4.1 Escolhendo o limiar de decisão

A escolha do limiar t é, em muitos casos, uma decisão crítica e depende diretamente do contexto e dos custos associados aos diferentes tipos de erro. Não existe um valor universalmente ótimo: o melhor limiar depende dos objetivos do problema, das consequências práticas dos erros e da distribuição das classes. Abaixo exibimos algumas possibilidades para encontrar o corte ótimo.

Maximizar F1

Uma forma prática de selecionar t é por meio da otimização de alguma métrica de desempenho, como a **F1-score**, que busca um equilíbrio entre precisão e recall. O limiar ótimo nesse caso seria:

$$t^* = \arg \max_t \text{F1-score}(t).$$

Curva ROC

A **curva ROC** (Receiver Operating Characteristic) é uma ferramenta gráfica amplamente utilizada para avaliar o desempenho de classificadores binários. Ela é construída variando o limiar de decisão t e observando como isso afeta duas métricas fundamentais:

- **Taxa de verdadeiros positivos (TVP) ou sensibilidade:**

$$\text{TVP} = \frac{\text{VP}}{\text{VP} + \text{FN}},$$

que mede a proporção de positivos corretamente identificados.

- **Taxa de falsos positivos (TFP):**

$$\text{TFP} = \frac{\text{FP}}{\text{FP} + \text{VN}},$$

que mede a proporção de negativos incorretamente classificados como positivos.

A curva ROC é um gráfico onde a TFP é colocada no eixo horizontal e a TVP no eixo vertical. Cada ponto da curva corresponde ao desempenho do classificador para um determinado limiar $t \in [0, 1]$.

O comportamento da curva é o seguinte:

- Para limiares muito baixos (por exemplo, $t \approx 0$), o classificador tende a prever quase tudo como positivo. Isso resulta em uma TVP alta, mas também em uma TFP alta.
- Para limiares muito altos (por exemplo, $t \approx 1$), o classificador quase nunca prevê a classe positiva. Assim, tanto a TVP quanto a TFP são baixas.
- Conforme o limiar varia, a curva se forma conectando esses pares (TFP, TVP).

Um classificador perfeito atingiria o ponto $(0, 1)$, ou seja, sem falsos positivos e com todos os verdadeiros positivos detectados. Na prática, quanto mais a curva ROC se aproxima do canto superior esquerdo, melhor é o desempenho do classificador.

Uma métrica associada à curva ROC é a **área sob a curva** (AUC — Area Under the Curve). O valor da AUC varia de 0 a 1:

- AUC = 1 indica um classificador perfeito;
- AUC = 0,5 corresponde a um classificador aleatório (linha diagonal);
- AUC < 0,5 sugere que o classificador está pior que o acaso (e poderia ser melhorado invertendo as predições).

A curva ROC é especialmente útil quando queremos analisar o comportamento do classificador sob diferentes limiares, ou quando o custo dos erros de diferentes tipos não é simétrico. No entanto, em contextos com classes desbalanceadas, a curva ROC pode ser menos informativa — nesses casos, a curva precisão-recall costuma oferecer uma análise mais sensível.

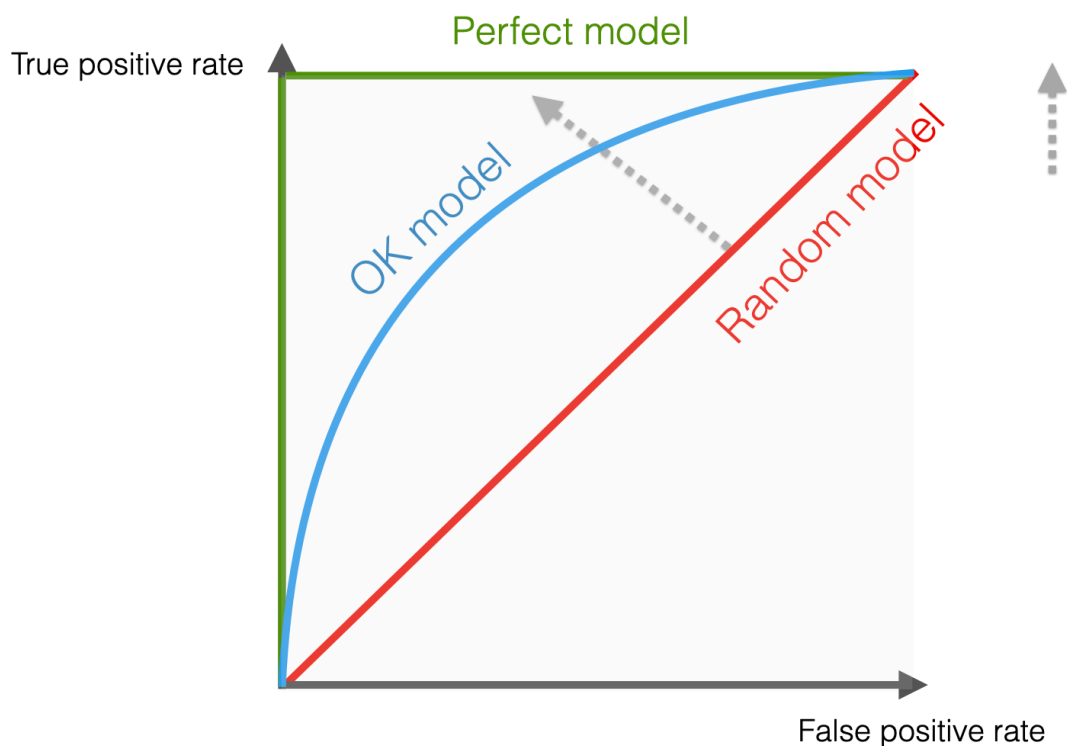


Figura 4.1: Curva ROC

Exercício 9. Acesse [esse site aqui](#) e brinque com a simulação de escolha de corte para classificação.

Curva Precisão-Recall

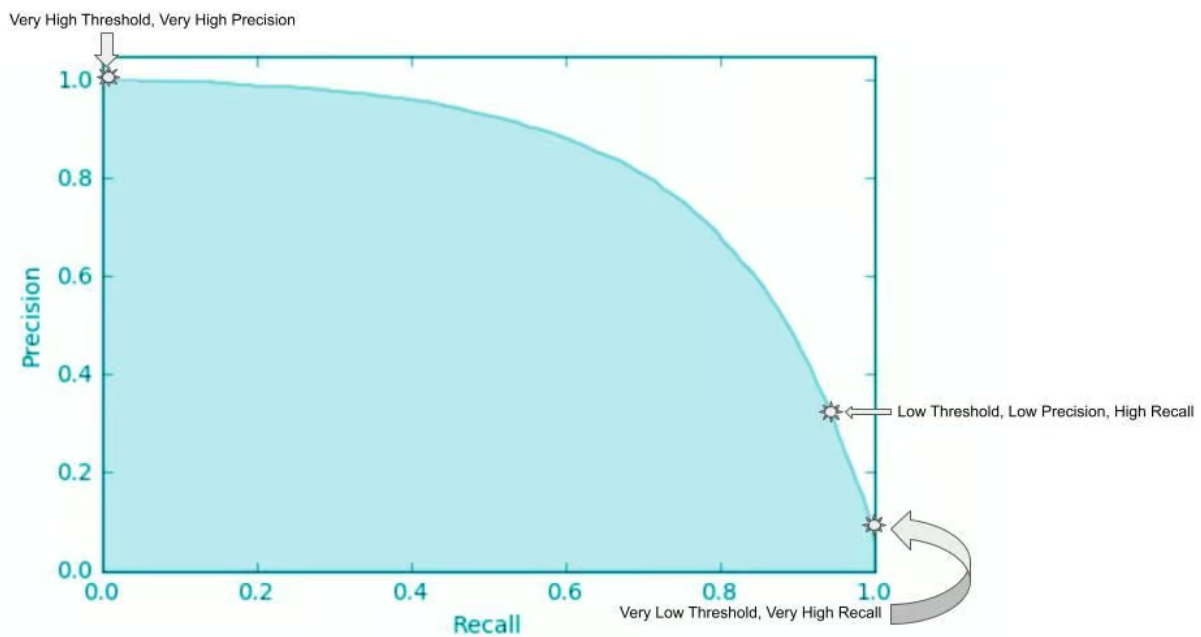
A **curva precisão-recall** é outra ferramenta gráfica fundamental para avaliar classificadores binários, especialmente em cenários onde as classes estão desbalanceadas — ou seja, quando a classe positiva é muito menos frequente que a negativa.

Enquanto a curva ROC mostra o trade-off entre sensibilidade (ou taxa de verdadeiros positivos) e a taxa de falsos positivos, a curva precisão-recall foca diretamente em duas métricas de interesse: Precision e Recall.

Para construir a curva, variamos o limiar de decisão $t \in [0, 1]$ usado para converter probabilidades em classificações, e calculamos os pares (Recall, Precisão) correspondentes a cada valor de t . Ao plotar esses pontos no plano, obtemos a curva precisão-recall.

Quanto mais a curva se aproxima do canto superior direito (alta precisão e alto recall), melhor é o desempenho do classificador. A área sob a curva (PR AUC — Precision-Recall Area Under Curve) pode ser usada como uma medida global de desempenho, assim como a AUC da curva ROC.

Em cenários onde a classe positiva é rara, a curva ROC pode dar uma falsa sensação de bom desempenho, pois o classificador pode ter uma taxa de falsos positivos muito baixa simplesmente porque há poucos exemplos positivos para errar. Já a curva precisão-recall é mais sensível a esse tipo de situação: ela penaliza mais severamente classificadores que não conseguem manter boa precisão ao tentar capturar mais positivos.



Exercício 10. Rode o seguinte [código](#) e faça alterações para se familiarizar com a parte computacional.

Capítulo 5

KNN

Idealmente, gostaríamos sempre de prever respostas qualitativas usando o classificador de Bayes, que é ótimo em termos teóricos. No entanto, na prática, não conhecemos a distribuição condicional de Y dado X , o que torna impossível a construção direta do classificador de Bayes. Por isso, ele é tratado como um padrão-ouro inatingível, servindo apenas como referência para avaliar outros métodos.

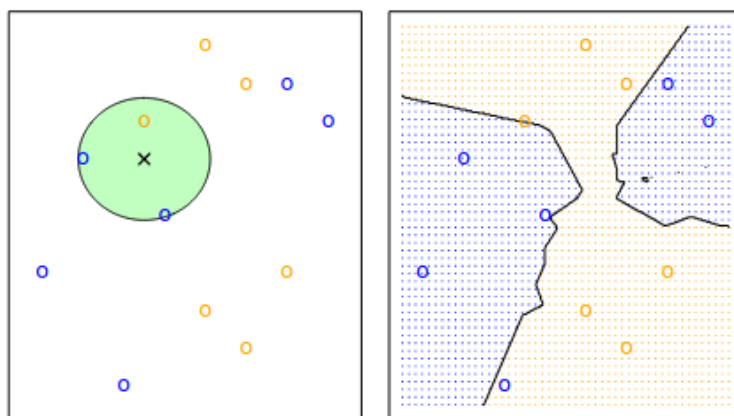


Figura 5.1: KNN com $k = 3$.

Diversas abordagens tentam estimar a distribuição condicional de Y dado X , e classificam uma nova observação atribuindo-a à classe com maior *probabilidade estimada*. Um método simples e amplamente utilizado é o dos *K-vizinhos mais próximos* (KNN). Dado um valor de K e uma nova observação x_0 , o KNN identifica os K pontos mais próximos de x_0 no conjunto de treinamento. Denotando esse subconjunto por \mathcal{N}_0 , a probabilidade condicional da classe j é estimada como:

$$\mathbb{P}(Y = j \mid X = x_0) = \frac{1}{K} \sum_{i \in \mathcal{N}_0} \mathbb{I}(y_i = j).$$

Por fim, o KNN atribui à observação x_0 a classe com a maior probabilidade estimada.

Por exemplo, suponha que escolhemos $K = 3$, e que os três vizinhos mais próximos de x_0 sejam dois da classe azul e um da laranja. A probabilidade estimada para a classe azul será $2/3$,

e para a classe laranja, $1/3$. Assim, o KNN classificará x_0 como pertencente à classe azul. Ao variar K , as fronteiras de decisão do classificador também mudam.

Apesar de ser uma abordagem bastante simples, o KNN pode gerar classificadores que se aproximam surpreendentemente bem do classificador de Bayes. Por exemplo, em um conjunto de dados simulado, com $K = 10$, o erro de teste do KNN foi de aproximadamente 0.1363, muito próximo do erro de Bayes, que era 0.1304.

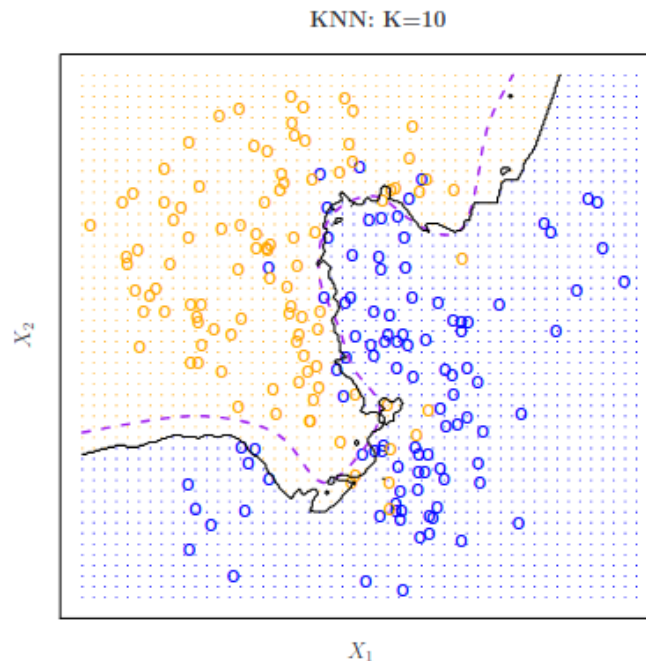


Figura 5.2: A curva preta representa a fronteira de decisão do classificador KNN, utilizando $K = 10$. A fronteira de decisão de Bayes é indicada pela linha tracejada roxa. As duas fronteiras são bastante semelhantes.

O valor de K influencia fortemente o desempenho do KNN. Quando $K = 1$, o modelo se torna extremamente flexível, adaptando-se até aos ruídos dos dados – o que resulta em baixo viés, mas alta variância. Já para valores muito grandes de K , o classificador se torna excessivamente rígido, levando a uma maior taxa de erro devido ao viés elevado. Nesse cenário, os dados são "suavizados" demais, ignorando padrões mais sutis.

Essa relação entre viés e variância se manifesta de forma clássica no gráfico de erro de teste versus $1/K$: à medida que K aumenta, a variância diminui e o viés cresce, formando uma curva em formato de U. O ponto ideal de K é geralmente aquele que minimiza o erro de teste – frequentemente em torno de $K = 10$.

Escolher corretamente o nível de flexibilidade (ou complexidade) do modelo é essencial tanto em tarefas de regressão quanto de classificação.

Note que dado um ponto de teste $x \in \mathbb{R}^p$, o algoritmo ingênuo compara esse ponto com todos os pontos do conjunto de treinamento para calcular a resposta prevista. Isso resulta em uma complexidade de $\mathcal{O}(np)$ por ponto de teste em \mathbb{R}^p . Quando p é grande, esse custo se torna elevado tanto em tempo quanto em memória. Existem técnicas de indexação para busca de vizinhos mais próximos (possivelmente aproximadas), como as chamadas *k-d trees*, que apresentam

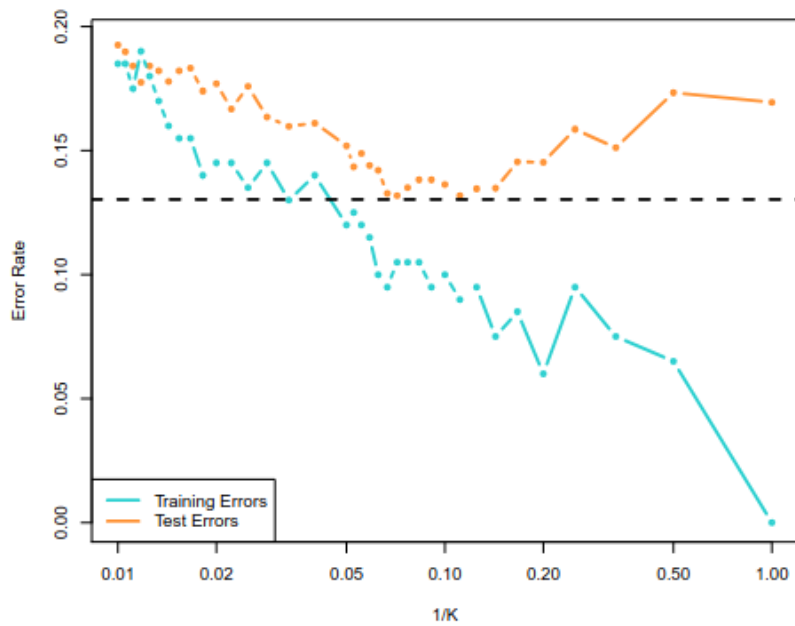


Figura 5.3: A taxa de erro de treinamento do KNN (em azul, 200 observações) e a taxa de erro de teste (em laranja, 5.000 observações) nos dados da Figura 2.13, à medida que o nível de flexibilidade (avaliado por $1/K$ em escala log

complexidade logarítmica em n (embora com tempo adicional de compilação) e uso de memória que pode crescer exponencialmente com a dimensão.

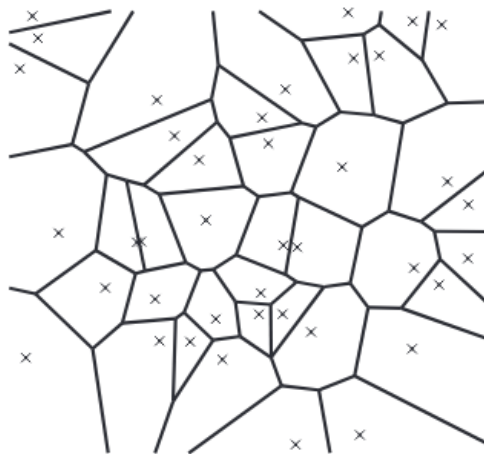


Figura 5.4: Diagrama de Voronoi associado ao algoritmo KNN. Cada região representa o conjunto de pontos que seriam classificados da mesma forma com base no vizinho mais próximo.

KNN para regressão

O método de regressão KNN é bastante semelhante ao classificador KNN. Dado um valor de K e um ponto de predição x_0 , a regressão KNN identifica as K observações de treinamento

mais próximas de x_0 , representadas por \mathcal{N}_0 . Em seguida, estima $f(x_0)$ utilizando a média das respostas correspondentes. Em outras palavras,

$$\hat{f}(x_0) = \frac{1}{K} \sum_{x_i \in \mathcal{N}_0} y_i.$$

A figura abaixo ilustra dois ajustes do KNN sobre um conjunto de dados com $p = 2$ preditores. O ajuste com $K = 1$ aparece no painel à esquerda, enquanto o painel da direita mostra o ajuste com $K = 9$. Observa-se que, para $K = 1$, o KNN interpola perfeitamente as observações de treinamento, resultando em um ajuste com descontinuidades abruptas. Para $K = 9$, o ajuste continua sendo uma função por partes, mas o uso da média sobre nove vizinhos suaviza as regiões constantes, produzindo uma predição mais suave.

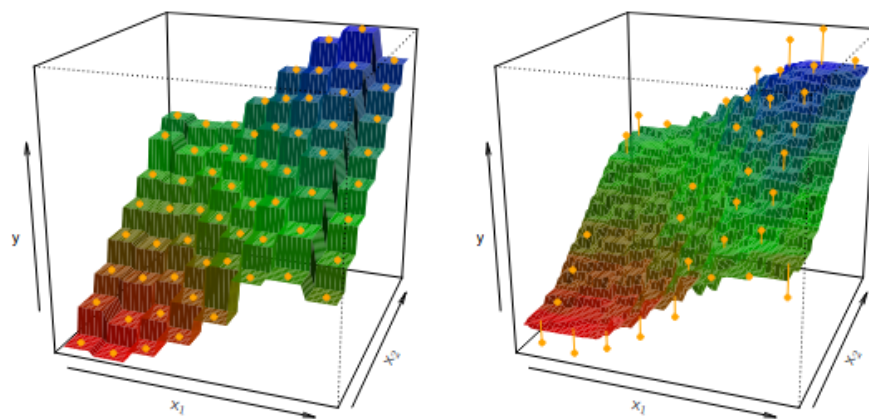


Figura 5.5: Knn para conjunto de 64 pontos. Do lado esquerdo $K = 1$ e do lado direito $K = 9$.

De modo geral, o valor ideal de K está ligado ao compromisso entre viés e variância. Um valor pequeno de K resulta em um modelo altamente flexível, com baixo viés mas alta variância, pois a predição em uma dada região depende fortemente de uma única observação. Já valores maiores de K reduzem a variância, mas podem aumentar o viés.

O que é treinado no KNN?

Diferentemente de muitos algoritmos de aprendizado supervisionado, o *K-Nearest Neighbors* (KNN) não realiza um processo explícito de treinamento no sentido tradicional de ajustar parâmetros internos a partir dos dados. No KNN, o chamado *treinamento* consiste simplesmente em armazenar o conjunto de dados de treino, ou seja, memorizar os pares (X_i, Y_i) .

Durante a fase de predição, dado um novo ponto X , o algoritmo identifica os K pontos mais próximos entre os dados armazenados, com base em uma medida de distância (como a distância Euclidiana). Em seguida, para tarefas de regressão, a predição é obtida calculando a média (ou outro agregador) dos valores Y_i correspondentes a esses vizinhos. Para tarefas de classificação, a predição é feita atribuindo a classe mais frequente entre os vizinhos.

Assim, o KNN é considerado um método *lazy learner*, pois posterga todo o trabalho de generalização até o momento da predição, ao contrário de métodos como regressão linear ou redes neurais, que constroem um modelo explícito durante o treinamento.

Regressão Linear vs. KNN

Em que situações a regressão linear — uma abordagem paramétrica — supera métodos não paramétricos como o KNN? A resposta é simples: *uma abordagem paramétrica terá melhor desempenho se sua forma funcional estiver próxima da verdadeira relação entre as variáveis*.

A figura abaixo mostra um exemplo com dados gerados a partir de um modelo linear unidimensional. As linhas pretas representam a função verdadeira $f(X)$, enquanto as curvas azuis indicam os ajustes feitos pelo KNN com $K = 1$ e $K = 9$. O ajuste com $K = 1$ é muito irregular, enquanto o ajuste com $K = 9$ é bem mais suave e se aproxima melhor da função real.

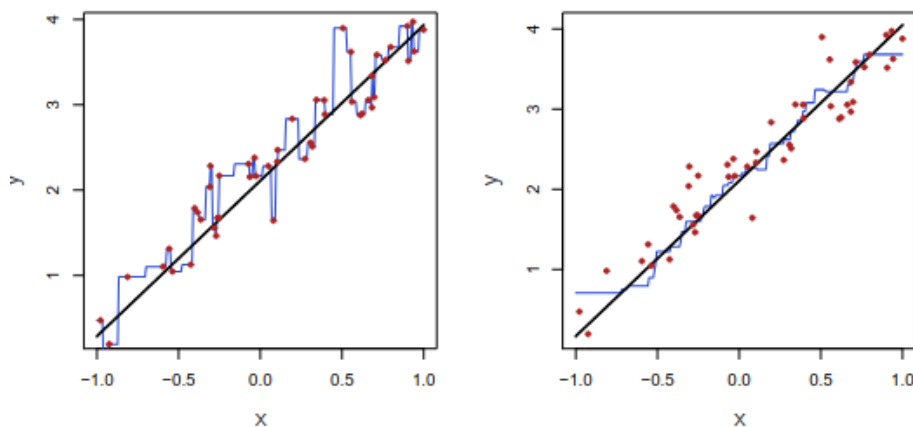


Figura 5.6: Ajustes de $\hat{f}(X)$ usando regressão KNN em um conjunto de dados unidimensional com 50 observações. A relação verdadeira é representada pela linha preta contínua. **Esquerda:** A curva azul corresponde a $K = 1$ e interpola os dados de treinamento, passando exatamente pelos pontos. **Direita:** A curva azul corresponde a $K = 9$ e fornece um ajuste mais suave.

Como a relação subjacente é linear, é difícil para um método não paramétrico competir. A flexibilidade extra do KNN aumenta a variância da predição, sem uma compensação no viés. A linha azul tracejada na figura abaixo representa o ajuste feito por regressão linear — quase perfeito nesse caso. O painel da direita da mesma figura mostra que a regressão linear supera o KNN em termos de erro médio quadrático (MSE) de teste. A linha verde na figura representa esse erro do KNN conforme o valor de $1/K$. Os erros do KNN são consistentemente maiores que os da regressão linear, exceto quando K é grande, situação em que o desempenho do KNN se aproxima do da regressão linear. No entanto, com K pequeno, o KNN tem desempenho significativamente pior.

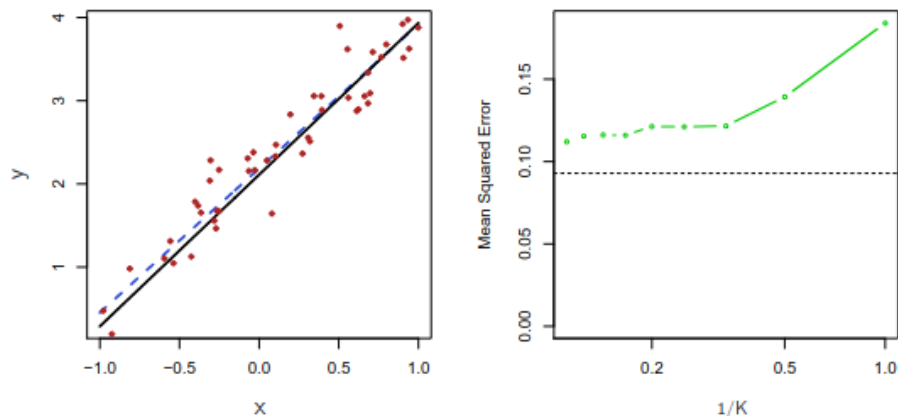


Figura 5.7: **Esquerda:** A linha tracejada azul representa o ajuste por mínimos quadrados. Como $f(X)$ é de fato linear (representada pela linha preta), a regressão linear fornece uma excelente estimativa de $f(X)$. **Direita:** A linha horizontal tracejada indica o erro quadrático médio (MSE) de teste da regressão linear, enquanto a linha verde contínua mostra o MSE do KNN como função de $1/K$ (em escala logarítmica). A regressão linear alcança um erro de teste menor que o KNN, pois a relação é linear. No caso da regressão KNN, os melhores resultados ocorrem para valores altos de K , o que corresponde a valores pequenos de $1/K$.

Na prática, a relação entre X e Y raramente é exatamente linear. A figura abaixo explora o desempenho da regressão linear e do KNN em situações com diferentes níveis de não-linearidade. Quando a relação verdadeira é quase linear (linha superior), a regressão linear mantém o menor erro de teste. Conforme a não-linearidade aumenta (linha inferior), o KNN supera substancialmente a regressão linear em todos os valores de K . Note que o MSE do KNN permanece estável, enquanto o da regressão linear cresce significativamente. Esse comportamento ressalta que, em contextos não lineares, métodos não paramétricos podem ser preferíveis.

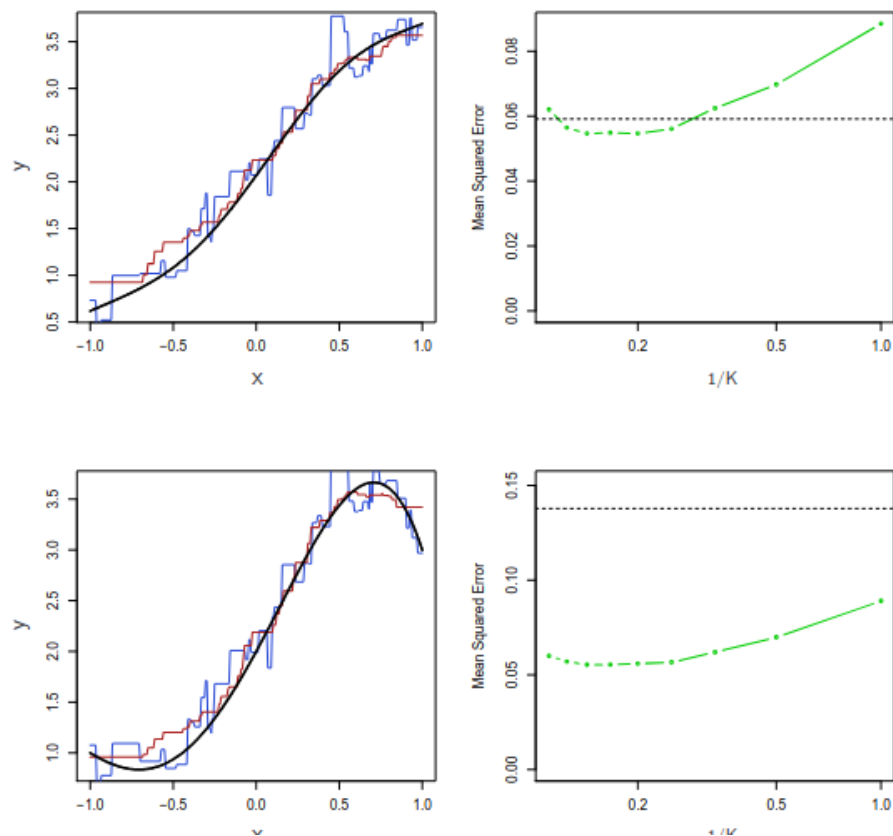


Figura 5.8: **Acima à esquerda:** Em um cenário com relação levemente não linear entre X e Y (linha preta contínua), são exibidos os ajustes do KNN com $K = 1$ (azul) e $K = 9$ (vermelho). **Acima à direita:** Para esse caso levemente não linear, mostra-se o erro quadrático médio (MSE) de teste para a regressão linear (linha preta horizontal) e para o KNN com diferentes valores de $1/K$ (linha verde). **Abaixo à esquerda e à direita:** Como no painel superior, mas considerando agora uma relação fortemente não linear entre X e Y .

O exemplos anteriores mostram que o KNN tende a ter desempenho ligeiramente inferior à regressão linear em relações lineares, mas muito superior quando a relação é não-linear. Em situações reais, como geralmente não conhecemos a forma da relação verdadeira, o KNN pode ser uma escolha segura: no pior caso, será apenas ligeiramente inferior à regressão linear, mas pode superar substancialmente em casos não-lineares.

Exercício 11. Entender o código [aqui](#).

Vale destacar que ambas as figuras consideram apenas o caso com $p = 1$ preditor. Em dimensões mais altas, o KNN tende a ter desempenho pior que a regressão linear, devido à **maldição da dimensionalidade**.

Capítulo 6

Modelos baseados em árvores

Neste capítulo, descrevemos os métodos baseados em árvores para tarefas de regressão e classificação. Essas abordagens consistem em *estratificar* ou *segmentar* o espaço dos preditores em um número reduzido de regiões simples. Para fazer uma predição em uma nova observação, utilizamos geralmente a média (em regressão) ou a moda (em classificação) das respostas das observações de treinamento que pertencem à mesma região. Como as regras de divisão utilizadas podem ser representadas na forma de uma árvore, essas abordagens são conhecidas como métodos de *árvore de decisão*.

6.1 Árvores de decisão

Os métodos baseados em árvores são simples e de fácil interpretação. No entanto, muitas vezes não alcançam o mesmo desempenho preditivo que os melhores métodos supervisionados. Por isso, além das árvores de decisão, introduzimos também técnicas como *bagging*, *florestas aleatórias*, *boosting* e *Bayesian additive regression trees*.

Essas técnicas envolvem a construção de múltiplas árvores que, em seguida, são combinadas para gerar uma predição por consenso. Veremos que, embora a combinação de muitas árvores possa resultar em ganhos expressivos de acurácia preditiva, isso costuma vir acompanhado de uma redução na interpretabilidade do modelo.

O processo de construção de uma árvore de regressão pode ser dividido, grosseiramente, em duas etapas:

1. Dividimos o espaço dos preditores — isto é, o conjunto de valores possíveis para X_1, X_2, \dots, X_p — em J regiões distintas e não sobrepostas, R_1, R_2, \dots, R_J .
2. Para cada observação que cai em uma região R_j , fazemos a mesma predição, que consiste simplesmente na média das respostas Y_i associadas às observações de treino que pertencem àquela região.

Por exemplo, suponha que, na Etapa 1, obtemos duas regiões, R_1 e R_2 . Se a média das respostas nas observações de treino de R_1 é 10, e em R_2 é 20, então para uma nova observação x :

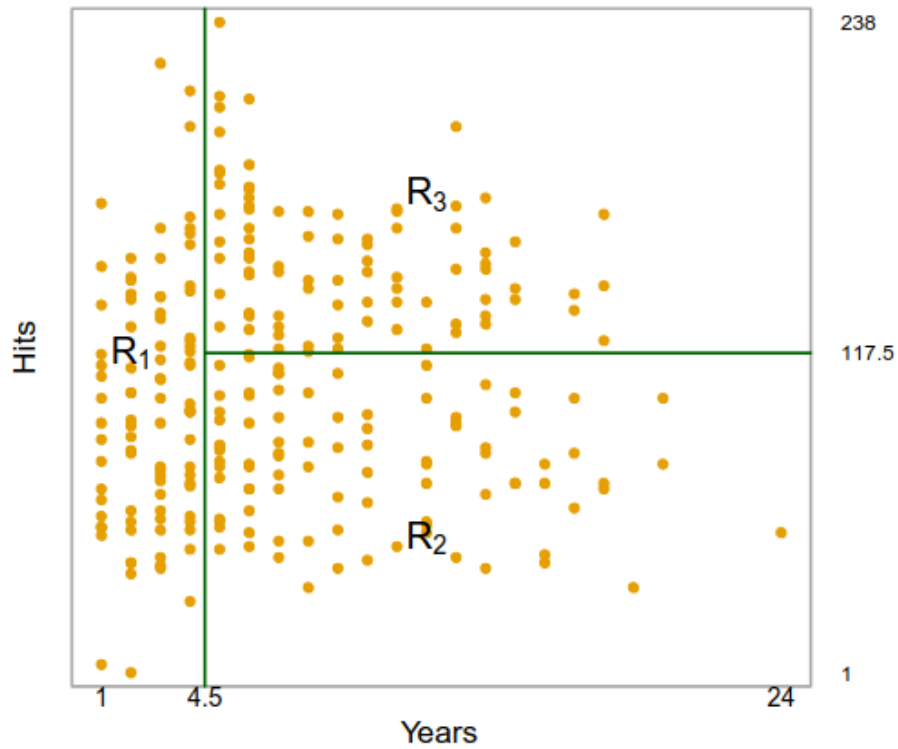


Figura 6.1: Uma possível partição usando árvores

$$\hat{Y} = \begin{cases} 10, & \text{se } x \in R_1, \\ 20, & \text{se } x \in R_2. \end{cases}$$

Na prática, as regiões R_1, \dots, R_J são escolhidas como retângulos de alta dimensão (chamados *boxes*) por simplicidade e facilidade de interpretação. O objetivo é minimizar a soma dos erros quadráticos (RSS):

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2, \quad (6.1)$$

onde \hat{y}_{R_j} é a média das respostas das observações de treino em R_j .

6.1.1 Divisão Binária Recursiva

Como é computacionalmente inviável testar todas as possíveis partições, adotamos uma abordagem gulosa (*greedy*) e de cima para baixo (*top-down*), conhecida como **divisão binária recursiva**. A cada passo, escolhemos a melhor divisão possível naquele momento, sem necessariamente garantir que seja a melhor árvore globalmente.

Para realizar a divisão binária recursiva, escolhemos um preditor X_j e um ponto de corte s tal que a divisão do espaço dos preditores em duas regiões,

$$R_1(j, s) = \{X \mid X_j < s\} \quad \text{e} \quad R_2(j, s) = \{X \mid X_j \geq s\},$$

gere a maior redução possível no erro quadrático (RSS). O objetivo é encontrar os valores de j e s que minimizem:

$$\sum_{i: x_i \in R_1(j,s)} (y_i - \hat{y}_{R_1})^2 + \sum_{i: x_i \in R_2(j,s)} (y_i - \hat{y}_{R_2})^2,$$

onde \hat{y}_{R_1} e \hat{y}_{R_2} são as médias das respostas nas regiões correspondentes.

Esse processo é feito de forma gulosa: a cada passo, procuramos a melhor divisão possível localmente, sem considerar futuras divisões. Começamos com toda a base de dados como uma única região e, a cada iteração, escolhemos a divisão que mais reduz o RSS. Ao invés de dividir sempre o espaço completo, passamos a dividir uma das regiões existentes.

O processo continua até que algum critério de parada seja atingido, como por exemplo: nenhuma região contendo mais que cinco observações.

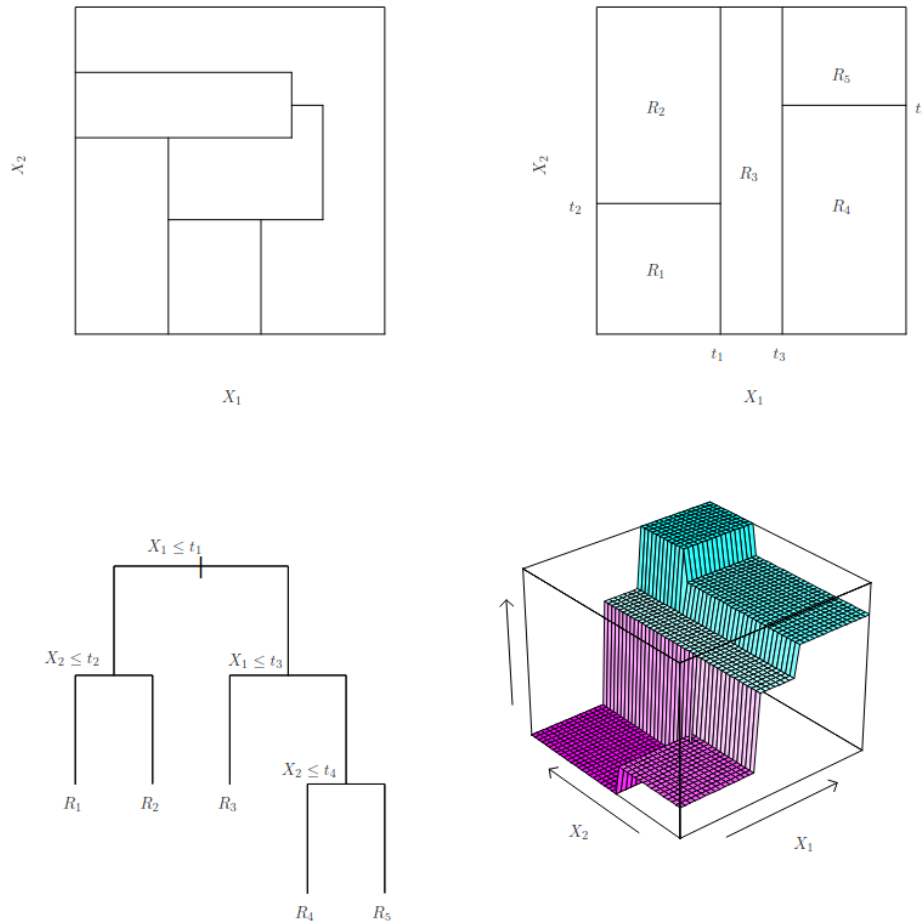


Figura 6.2: **Cima à esquerda:** Uma partição do espaço bidimensional dos preditores que **não poderia** ser obtida por divisão binária recursiva. **Cima à direita:** Resultado de uma divisão binária recursiva em duas dimensões. **Embaixo à esquerda:** Árvore de decisão correspondente à partição mostrada acima à direita. **Embaixo à direita:** Superfície de predição correspondente à árvore, destacando os degraus definidos pelas regiões.

Uma vez criadas as regiões R_1, \dots, R_J , a predição para uma nova observação é dada pela

média das respostas das observações de treinamento que pertencem à mesma região.

6.1.2 Poda de Árvores (Tree Pruning)

O processo de divisão recursiva pode produzir boas previsões no conjunto de treinamento, mas tende a sofrer com *overfitting*, levando a um mau desempenho no conjunto de teste. Isso ocorre porque a árvore resultante pode ser complexa demais.

Uma árvore menor, com menos divisões (isto é, com menos regiões R_1, \dots, R_J), pode ter menor variância e interpretação mais simples, ao custo de um leve aumento de viés. Uma alternativa ao crescimento total da árvore é interromper o processo quando a redução no RSS (soma dos erros quadráticos) gerada por uma divisão não ultrapassar um certo limiar.

Uma abordagem mais eficaz é crescer uma árvore grande T_0 , e depois podá-la para obter uma *subárvore*. A meta é selecionar a subárvore que leva ao menor erro de teste. Podemos estimar esse erro usando validação cruzada ou um conjunto de validação.

No entanto, como o número de subárvores possíveis é muito grande, utilizamos o método de **poda por complexidade de custo** (ou *cost-complexity pruning*, também chamado *weakest link pruning*).

Definimos uma sequência de árvores indexadas por um parâmetro de ajuste $\alpha \geq 0$. Para cada valor de α , escolhemos a subárvore $T \subseteq T_0$ que minimiza:

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha |T|, \quad (8.4)$$

onde:

- $|T|$ é o número de nós terminais (ou regiões) da subárvore T ,
- R_m é a região associada ao m -ésimo nó terminal,
- \hat{y}_{R_m} é a média das respostas em R_m ,
- α penaliza árvores mais complexas.

Quando $\alpha = 0$, essa equação reduz-se ao erro de treinamento. À medida que α aumenta, a penalização por complexidade aumenta, favorecendo árvores menores.

O aumento de α causa a poda sucessiva dos galhos da árvore T_0 , de forma aninhada e previsível. Podemos então selecionar o melhor valor de α usando validação cruzada.

Uma vez escolhido α , a subárvore correspondente é então treinada no conjunto completo.

Algorithm 1 Construção de uma Árvore de Regressão com Poda

-
- 1: Use divisão binária recursiva para crescer uma árvore grande no conjunto de treino, parando apenas quando cada nó terminal tiver menos que um número mínimo de observações.
 - 2: Aplique a poda por complexidade de custo (*cost complexity pruning*) à árvore grande, gerando uma sequência de subárvores ótimas em função de α .
 - 3: Use validação cruzada com K blocos para escolher α :
 - 4: **for** cada bloco $k = 1, \dots, K$ **do**
 - 5: (a) Repita os Passos 1 e 2 usando todos os dados exceto o k -ésimo bloco.
 - 6: (b) Avalie o erro quadrático médio de predição no k -ésimo bloco, como função de α .
 - 7: **end for**
 - 8: Para cada valor de α , calcule o erro médio nos K blocos e selecione o α que minimiza esse erro médio.
 - 9: Retorne a subárvore do Passo 2 correspondente ao α escolhido.
-

Exercício 12. Alterar o código [aqui](#) para usar k -fold.

6.1.3 Árvores de Classificação

Uma *árvore de classificação* é muito parecida com uma árvore de regressão, com a diferença de que ela é usada para prever uma resposta qualitativa em vez de uma quantitativa. Em uma árvore de regressão, a resposta prevista para uma observação é a média das respostas Y das observações de treinamento que pertencem ao mesmo nó terminal. Já no caso de uma árvore de classificação, a previsão corresponde à classe mais frequente entre as observações de treinamento do nó terminal. Além de determinar a classe predita para cada região terminal, também é comum analisar as proporções das classes entre as observações de treinamento que caem em cada região.

O processo de construção de uma árvore de classificação é bastante similar ao utilizado em árvores de regressão, baseando-se em divisões binárias recursivas. No entanto, como estamos lidando com variáveis qualitativas, não podemos usar a soma de quadrados residual (RSS) como critério para realizar as divisões. Uma alternativa natural ao RSS é a *taxa de erro de classificação*, que mede a proporção de observações em uma região que não pertencem à classe mais frequente. Formalmente, ela é dada por:

$$E = 1 - \max_k \hat{p}_{mk}, \quad (6.2)$$

onde \hat{p}_{mk} representa a proporção de observações de treinamento na região m que pertencem à classe k .

Apesar de sua simplicidade, a taxa de erro de classificação não é suficientemente sensível para orientar o crescimento da árvore de maneira eficiente. Por essa razão, outras duas métricas são geralmente preferidas. A primeira é o *índice de Gini*, definido como:

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}). \quad (6.3)$$

O índice de Gini mede a variabilidade total entre as K classes. Ele assume valores baixos quando as proporções \hat{p}_{mk} estão próximas de zero ou um, indicando que o nó é puro.

Outra medida bastante utilizada é a *entropia*, que é dada por:

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log \hat{p}_{mk}. \quad (6.4)$$

Assim como o índice de Gini, a entropia também assume valores pequenos quando o nó é puro. De fato, os valores numéricos do índice de Gini e da entropia costumam ser bastante próximos.

Na prática, ao construir uma árvore de classificação, costuma-se utilizar o índice de Gini ou a entropia para avaliar a qualidade de uma divisão, já que essas métricas são mais sensíveis à pureza dos nós do que a taxa de erro de classificação. Qualquer uma dessas três métricas pode ser empregada no processo de *poda* da árvore. No entanto, quando o objetivo final é maximizar a acurácia de predição da árvore final, a taxa de erro de classificação geralmente é preferida para guiar a poda.

Cálculo prático de Gini e Entropia

Suponha que, em um nó m , existam 10 observações distribuídas entre duas classes: Classe 0 com 4 observações e Classe 1 com 6 observações. Assim, as proporções de cada classe são:

$$\hat{p}_{m,0} = \frac{4}{10} = 0,4, \quad \hat{p}_{m,1} = \frac{6}{10} = 0,6.$$

O índice de Gini é definido por:

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

Para este exemplo, temos:

$$G = (0,4)(1 - 0,4) + (0,6)(1 - 0,6) = 0,4 \times 0,6 + 0,6 \times 0,4 = 0,24 + 0,24 = 0,48.$$

A entropia é dada por:

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log_2 \hat{p}_{mk}.$$

Logo:

$$D = - (0,4 \log_2(0,4) + 0,6 \log_2(0,6)).$$

Calculando os logaritmos:

$$\log_2(0,4) \approx -1,3219, \quad \log_2(0,6) \approx -0,73697.$$

Portanto:

$$D = - (0,4 \times (-1,3219) + 0,6 \times (-0,73697)) = -(-0,52876 - 0,44218) = 0,97094.$$

Como exemplo extremo, considere um nó puro com apenas observações da Classe 1. Neste caso, temos:

$$\hat{p}_{m,0} = 0, \quad \hat{p}_{m,1} = 1.$$

Assim, o índice de Gini será:

$$G = 0 \times (1 - 0) + 1 \times (1 - 1) = 0,$$

e a entropia será:

$$D = -(0 \times \log(0) + 1 \times \log(1)) = 0.$$

Na notação \hat{p}_{mk} , o índice m representa o nó terminal considerado e k indica a classe. Por exemplo, $\hat{p}_{3,0}$ é a proporção de observações da classe 0 no nó 3.

Vamos fazer um exemplo completo. Considere o seguinte conjunto de dados:

X	Classe
1	Azul
2	Vermelho
3	Azul
4	Vermelho
5	Azul

Suponha que realizamos um corte em $X = 3,5$.

Os dados ficam divididos da seguinte forma:

- **Grupo à esquerda** ($X \leq 3,5$): observações $\{1, 2, 3\}$, contendo 2 Azuis e 1 Vermelho. A proporção de Azuis é $p = \frac{2}{3}$, resultando em um índice de Gini:

$$G_{\text{esq}} = 1 - \left(\frac{2}{3}\right)^2 - \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{4}{9} \approx 0,444.$$

- **Grupo à direita** ($X > 3,5$): observações $\{4, 5\}$, com 1 Azul e 1 Vermelho. A proporção de Azuis é $p = \frac{1}{2}$, e o índice de Gini é:

$$G_{\text{dir}} = 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0,5.$$

O índice de Gini ponderado da divisão é:

$$G = \frac{3}{5} \cdot 0,444 + \frac{2}{5} \cdot 0,5 = 0,466.$$

Durante o crescimento da árvore, nosso objetivo é realizar divisões que minimizem o Gini ou a entropia, já que valores baixos dessas métricas indicam maior pureza dos nós. Portanto, entre todas as divisões possíveis, escolhe-se aquela que leva ao menor valor de Gini ou entropia nos nós resultantes. Isso equivale a buscar o maior ganho de pureza após o corte.

Intuitivamente, o índice de Gini e a entropia são medidas da *impureza* de um nó. Ambas indicam o quão misturadas estão as classes dentro do nó. Quando todas as observações no nó pertencem à mesma classe, dizemos que o nó é puro, e tanto o Gini quanto a entropia valem zero. À medida que a mistura entre as classes aumenta, os valores de Gini e entropia aumentam. O índice de Gini pode ser interpretado como a probabilidade de uma classificação errada se

atribuirmos aleatoriamente uma classe a uma observação do nó, com base nas proporções das classes. Já a entropia mede a quantidade de *incerteza* ou *informação* necessária para descrever a classe de uma observação do nó. Nós com alta entropia têm alta incerteza, enquanto nós com baixa entropia contêm observações predominantemente de uma única classe.

Considere uma variável aleatória Y que assume valores em um conjunto finito $\mathcal{Y} = \{y_1, y_2, \dots, y_K\}$, com probabilidades associadas p_1, p_2, \dots, p_K , onde $p_k = \mathbb{P}(Y = y_k)$ e $\sum_{k=1}^K p_k = 1$. A entropia da distribuição de Y é dada por

$$H(Y) = - \sum_{k=1}^K p_k \log_2(p_k).$$

A entropia mede o grau de incerteza ou imprevisibilidade da variável Y . Ela é pequena quando uma classe domina, com probabilidade próxima de um, e é grande quando as probabilidades são semelhantes entre as classes.

Agora mostramos que a entropia é maximizada quando todas as classes têm a mesma probabilidade. Usamos a desigualdade de Jensen, lembrando que a função $\log_2(x)$ é côncava. Escrevendo a entropia como

$$H(Y) = \mathbb{E} \left[\log_2 \frac{1}{p(Y)} \right],$$

aplicamos Jensen com a variável aleatória $Z = 1/p(Y)$, obtendo

$$H(Y) \leq \log_2 \mathbb{E} \left[\frac{1}{p(Y)} \right].$$

A esperança $\mathbb{E}[1/p(Y)]$ pode ser escrita como

$$\mathbb{E} \left[\frac{1}{p(Y)} \right] = \sum_{k=1}^K p_k \cdot \frac{1}{p_k} = \sum_{k=1}^K 1 = K.$$

Portanto,

$$H(Y) \leq \log_2 K.$$

A igualdade ocorre quando p_k é constante para todos os k , ou seja, quando $p_k = 1/K$. Isso prova que a distribuição uniforme é a que maximiza a entropia.

6.1.4 Árvores versus modelos lineares

Árvores de regressão e classificação apresentam uma natureza bastante diferente em relação aos métodos clássicos de regressão e classificação discutidos nos Capítulos 3 e 4. Por exemplo, a regressão linear assume um modelo do tipo

$$f(X) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j,$$

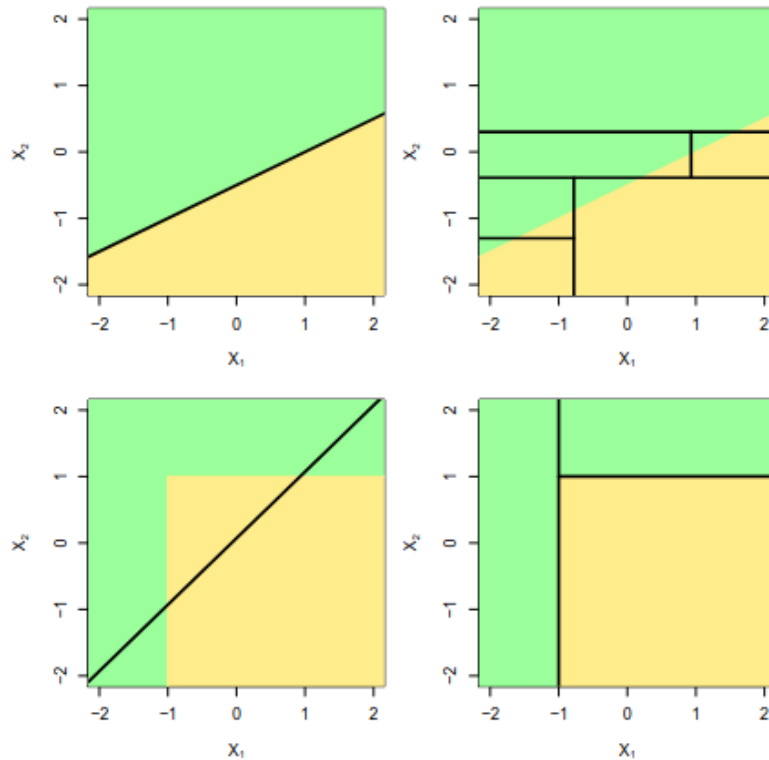
enquanto uma árvore de regressão assume um modelo da forma

$$f(X) = \sum_{m=1}^M c_m \cdot 1_{(X \in R_m)},$$

onde R_1, \dots, R_M representam uma partição do espaço de preditores.

Qual abordagem é melhor depende do problema. Se a relação entre as variáveis preditoras e a resposta pode ser bem aproximada por um modelo linear, como na equação acima, métodos como a regressão linear tendem a ter bom desempenho e podem superar uma árvore de regressão, que não explora essa estrutura linear. No entanto, se a relação entre os preditores e a resposta é altamente não-linear e complexa, como indicado pelo segundo modelo, as árvores de decisão podem apresentar desempenho superior aos métodos lineares.

Um exemplo ilustrativo é apresentado na Figura abaixo. No primeiro caso, a fronteira de decisão real é linear. O modelo linear (painel superior esquerdo) supera a árvore de decisão (painel superior direito), que realiza cortes paralelos aos eixos. No segundo caso, a fronteira de decisão verdadeira é não-linear. O modelo linear falha em capturar a fronteira real (painel inferior esquerdo), enquanto a árvore de decisão consegue uma boa separação (painel inferior direito).



É importante observar que outros fatores além do erro de teste também podem influenciar a escolha de um método de aprendizado estatístico. Em algumas situações, a interpretabilidade e a facilidade de visualização podem tornar as árvores uma escolha preferida, mesmo que o erro de predição não seja o menor possível.

6.1.5 Vantagens e Desvantagens das Árvores

Árvores de decisão, tanto para regressão quanto para classificação, possuem diversas vantagens em relação aos métodos clássicos discutidos anteriormente.

- Árvores de decisão são, em geral, muito fáceis de explicar e interpretar. Muitas vezes, elas são ainda mais intuitivas do que modelos lineares. Alguns autores sugerem que as árvores refletem melhor o modo como as pessoas tomam decisões em situações práticas.
- Além disso, podem ser representadas graficamente, o que torna sua interpretação acessível mesmo para não especialistas, especialmente quando as árvores são pequenas.
- Árvores também lidam de forma natural com preditores qualitativos, sem exigir a criação de variáveis indicadoras (dummies).
- No entanto, as árvores frequentemente não atingem o mesmo nível de acurácia preditiva que outros métodos de regressão e classificação mais sofisticados.
- Outra limitação importante é a instabilidade: pequenas alterações nos dados podem levar a mudanças significativas na estrutura da árvore estimada.

Uma forma de superar essas limitações é combinar muitas árvores de decisão usando métodos como *Bagging* e *Florestas aleatórias*. Esses métodos serão apresentados na próxima seção e podem melhorar substancialmente o desempenho preditivo das árvores.

6.2 Bagging

As árvores de decisão discutidas anteriormente sofrem de alta variância. Isso significa que, se dividirmos o conjunto de treinamento em duas partes aleatórias e ajustarmos uma árvore de decisão em cada parte, os resultados obtidos podem ser bastante diferentes. Por outro lado, procedimentos com baixa variância produzem resultados semelhantes quando aplicados repetidamente a diferentes conjuntos de dados. A regressão linear, por exemplo, tende a apresentar baixa variância, especialmente quando a razão entre n e p é moderadamente grande.

Bootstrap aggregation, ou *bagging*, é um procedimento geral para reduzir a variância de um método de aprendizado estatístico. Essa técnica é particularmente útil no contexto de árvores de decisão.

Lembre que, para um conjunto de n observações independentes Z_1, \dots, Z_n , cada uma com variância σ^2 , a variância da média \bar{Z} das observações é dada por σ^2/n . Ou seja, a média de várias observações reduz a variância.

Inspirado por esse princípio, uma maneira natural de reduzir a variância e aumentar a acurácia de teste é gerar muitos subconjuntos de treinamento, ajustar um modelo preditivo em cada um e então calcular a média das previsões. Se denotarmos as previsões como $\hat{f}^1(x), \hat{f}^2(x), \dots, \hat{f}^B(x)$, a previsão agregada é:

$$\hat{f}_{\text{avg}}(x) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \hat{f}^b(x).$$

Na prática, não temos acesso a múltiplos conjuntos de treinamento independentes. Em vez disso, usamos o *bootstrap*, gerando B conjuntos de treinamento *bootstrap* amostrados com reposição do conjunto original. Ajustamos o modelo em cada conjunto para obter $\hat{f}^{*b}(x)$ e, finalmente, calculamos a média:

$$\hat{f}_{\text{bag}}(x) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \hat{f}^{*b}(x).$$

Esse procedimento é chamado de *bagging*.

Ao aplicar o bagging em árvores de regressão, construímos B árvores em conjuntos de treinamento bootstrap e combinamos as previsões. Essas árvores são crescidas profundamente e não são podadas. Portanto, cada árvore individual tem **alta variância e baixo viés**. Ao combinar as árvores, a variância é reduzida substancialmente, enquanto o viés permanece baixo. Assim:

O bagging reduz a variância sem aumentar significativamente o viés.

Para problemas de classificação, a extensão é direta. Para cada observação de teste, registramos a classe predita por cada uma das B árvores e usamos o voto majoritário para determinar a classe final.

Além da intuição básica, podemos obter uma fórmula explícita para a variância da predição agregada. Suponha que cada árvore $\hat{f}^b(x)$ tenha variância σ^2 , e que a correlação entre as predições de duas árvores quaisquer seja ρ . Então, a variância da média das árvores é:

$$\text{Var}(\hat{f}_{\text{bag}}(x)) = \rho\sigma^2 + \frac{(1-\rho)\sigma^2}{B}.$$

Para valores grandes de B , o segundo termo se aproxima de zero e a variância total se reduz a $\rho\sigma^2$.

Isso mostra que o bagging reduz a variância, mas a redução depende da correlação ρ entre as árvores. Quanto menor a correlação, maior será a redução de variância ao aplicar o bagging.

Essa ideia não é restrita a árvores de decisão. Em princípio, qualquer modelo com alta variância pode se beneficiar do bagging. No entanto, árvores de decisão são especialmente adequadas porque têm *baixo viés e alta variância*, características que tornam possível reduzir a variância sem sacrificar a acurácia. Além disso, no contexto de florestas aleatórias e bagging de árvores, costuma-se crescer as árvores até a pureza máxima dos nós. Isso aumenta ainda mais a variância individual das árvores e, conseqüentemente, o potencial de redução de variância ao aplicar o bagging.

6.2.1 Estimativa do Erro Out-of-Bag (OOB)

Existe uma maneira bastante simples de estimar o erro de teste de um modelo bagged, sem precisar realizar validação cruzada ou utilizar um conjunto de validação separado. O ponto chave do bagging é que cada árvore é ajustada usando subconjuntos bootstrap das observações originais. Em média, cada árvore usa aproximadamente dois terços das observações para treinamento. O restante, cerca de um terço, não é utilizado naquela árvore específica e essas observações são chamadas de *out-of-bag* (OOB).

Essa proporção de aproximadamente um terço pode ser calculada da seguinte forma. Cada árvore do bagging é ajustada com um conjunto bootstrap, onde n observações são amostradas com reposição a partir das n observações originais. Para uma observação específica i , a probabilidade de ela não ser escolhida em uma única amostragem é

$$1 - \frac{1}{n}.$$

Como n amostras são feitas para formar o conjunto bootstrap, a probabilidade de que i nunca seja selecionada é

$$\left(1 - \frac{1}{n}\right)^n.$$

Quando n é grande, podemos usar a aproximação

$$\left(1 - \frac{1}{n}\right)^n \approx e^{-1} \approx 0,368.$$

Portanto, cerca de 36,8% das observações não são usadas no ajuste de uma árvore específica e ficam como OOB para essa árvore.

Para estimar o erro OOB, consideramos a predição para a i -ésima observação utilizando apenas as árvores nas quais essa observação foi OOB, ou seja, não foi usada no treinamento daquela árvore. Em média, cada observação será OOB para aproximadamente $0,368 \times B$ árvores, onde B é o número total de árvores do ensemble. Para cada observação, podemos então calcular a predição média (no caso de regressão) ou aplicar uma votação majoritária (no caso de classificação), usando apenas essas árvores.

Esse processo leva a uma predição OOB única para cada observação. Repetindo para todas as n observações do conjunto de dados, podemos calcular o erro quadrático médio OOB (para regressão) ou a taxa de erro OOB (para classificação).

O erro OOB fornece uma estimativa válida do erro de teste do modelo bagged, pois as predições são feitas apenas com árvores que não usaram a observação correspondente em seu treinamento. Quando B é suficientemente grande, o erro OOB torna-se praticamente equivalente ao erro estimado por validação cruzada *leave-one-out*. Isso torna o OOB uma alternativa conveniente e computacionalmente eficiente para estimar o erro de teste, especialmente em grandes conjuntos de dados onde a validação cruzada seria onerosa.

Algorithm 2 Cálculo do erro Out-of-Bag (OOB)

```

1: Dado um conjunto de treinamento com  $n$  observações e um número de árvores  $B$ 
2: for  $b = 1$  até  $B$  do
3:   Sorteie um conjunto bootstrap com  $n$  observações (com reposição)
4:   Ajuste uma árvore  $\hat{f}^{*b}$  usando o conjunto bootstrap
5:   Registre quais observações não foram usadas na árvore  $b$  (estas serão OOB para a árvore  $b$ )
6: end for
7: for cada observação  $i = 1$  até  $n$  do
8:   Identifique todas as árvores onde  $i$  foi OOB
9:   if há pelo menos uma árvore OOB para  $i$  then
10:    Preveja  $\hat{y}_i^{OOB}$  usando as árvores onde  $i$  foi OOB
11:   end if
12: end for
13: Compare  $\hat{y}_i^{OOB}$  com  $y_i$  verdadeiro e calcule o erro médio

```

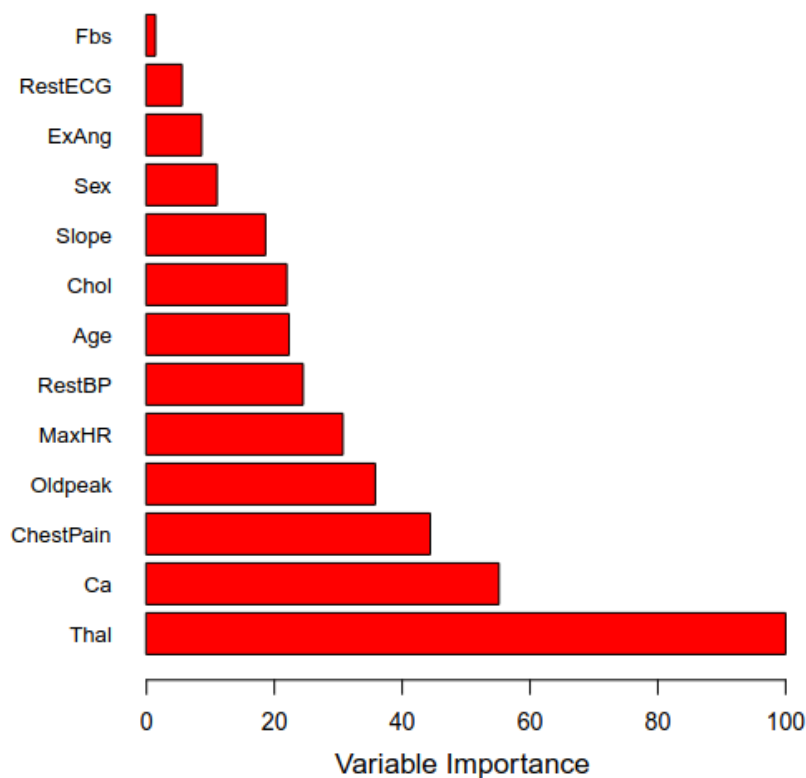
6.2.2 Importância de Variáveis em Modelos Bagged

Como discutido anteriormente, o uso do bagging normalmente resulta em melhoria na acurácia de predição quando comparado ao uso de uma única árvore. No entanto, essa melhoria geralmente ocorre às custas da interpretabilidade do modelo. Uma das vantagens fundamentais das árvores de decisão é sua fácil visualização e a possibilidade de identificar diretamente quais variáveis são mais importantes. Quando combinamos muitas árvores — como no bagging — torna-se impraticável representar visualmente o modelo final ou identificar facilmente as variáveis mais relevantes.

Apesar dessa limitação, é possível obter uma medida global da importância das variáveis em ensembles. Para árvores de regressão, calcula-se a redução total no RSS (soma dos quadrados dos resíduos) atribuída a divisões feitas por cada variável, somando essa quantidade sobre todas as B árvores do ensemble. No caso de árvores de classificação, soma-se a redução no índice de Gini associada a cortes que usam cada variável. Variáveis que resultam em maiores reduções acumuladas são consideradas mais importantes no processo de decisão.

6.3 Random Forests

As *random forests* representam uma extensão do bagging que busca reduzir a correlação entre as árvores, um problema que ocorre naturalmente quando todas as árvores podem escolher livremente entre todas as variáveis disponíveis. No bagging puro, as árvores tendem a usar repetidamente as variáveis mais fortes, levando a árvores altamente correlacionadas e, conseqüentemente, limitando a redução de variância do ensemble. Para mitigar esse problema, as random forests introduzem uma modificação simples, porém eficaz: a cada divisão de uma árvore, um subconjunto aleatório de m variáveis é selecionado entre as p variáveis disponíveis, e apenas essas podem ser usadas no corte.



Essa estratégia força diferentes árvores a considerar diferentes variáveis em suas divisões iniciais, promovendo diversidade entre as árvores e reduzindo a correlação entre elas. Normalmente, o número de variáveis candidatas m é escolhido como $m \approx \sqrt{p}$, embora outros valores possam ser usados dependendo do problema.

A principal diferença entre bagging e random forests reside justamente nessa escolha do tamanho do subconjunto de variáveis em cada divisão. Quando $m = p$, a random forest se reduz ao bagging. Para valores menores de m , as árvores são forçadas a explorar combinações diferentes de variáveis, o que aumenta a diversidade do ensemble e reduz a variância da predição final. Contudo, se m for muito pequeno, isso pode levar a um aumento do viés, já que as árvores podem deixar de considerar variáveis relevantes em divisões cruciais.

6.3.1 Impacto dos Parâmetros B e m

O número de árvores B no ensemble controla a quantidade de modelos combinados. Aumentar B tende a reduzir a variância da predição final, sem aumentar o viés. Já o parâmetro m , que determina o número de variáveis candidatas em cada divisão, regula a decorrelação entre as árvores. Valores menores de m incentivam uma maior diversidade entre as árvores, promovendo redução da variância, especialmente em conjuntos de dados com variáveis altamente correlacionadas. No entanto, uma escolha de m muito pequena pode elevar o viés do modelo.

6.3.2 Uso de Random Forests em Altas Dimensões

O uso de random forests é especialmente benéfico em situações de alta dimensionalidade, isto é, quando o número de preditores p é grande em relação ao número de observações n . Nesses cenários, é comum que muitas variáveis sejam irrelevantes ou altamente correlacionadas. A estratégia de seleção aleatória de variáveis em cada divisão ajuda a evitar que todas as árvores concentrem suas divisões nas mesmas variáveis dominantes, forçando o modelo a considerar uma gama mais ampla de preditores. Isso aumenta a diversidade entre as árvores e melhora a capacidade de generalização do ensemble.

Além disso, random forests lidam bem com problemas onde $p > n$, como em dados genômicos, imagens ou texto, e conseguem tolerar a presença de muitas variáveis ruidosas ou não informativas. Outra vantagem prática é que o método geralmente não requer uma etapa prévia de seleção de variáveis, pois o processo de amostragem aleatória e a própria métrica de importância de variáveis ajudam a mitigar o impacto de preditores irrelevantes.

Exercício 13. Entender os códigos [aqui](#).

Capítulo 7

Seleção de modelos lineares e regularização

No contexto de regressão, o modelo linear padrão é dado por:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p + \epsilon,$$

onde Y é a variável resposta, X_1, \dots, X_p são as variáveis preditoras, e ϵ representa o erro aleatório.

Esse modelo é normalmente ajustado via mínimos quadrados. Apesar de sua simplicidade, o modelo linear apresenta vantagens importantes, especialmente em termos de inferência e interpretabilidade. Em muitos problemas reais, ele é surpreendentemente competitivo mesmo quando comparado a modelos não-lineares mais complexos.

Existem dois principais motivos para substituir o ajuste por mínimos quadrados por outros procedimentos:

- **Performance Preditiva.** Quando a relação entre resposta e preditores é aproximadamente linear, o ajuste por mínimos quadrados resulta em estimadores com viés baixo. Se o número de observações n for muito maior do que o número de variáveis p , ou seja, $n \gg p$, os estimadores também apresentam baixa variância, o que tende a resultar em boa performance em dados de teste.

Entretanto, se n não for muito maior do que p , a variância dos coeficientes aumenta significativamente, levando a overfitting e má generalização. No caso em que $p > n$, não existe solução única para os coeficientes que minimizam os erros quadráticos: há infinitas soluções possíveis.

Cada uma dessas soluções resulta em erro zero nos dados de treino, mas em geral apresentam alto erro nos dados de teste devido à alta variância. Ao *restringir* ou *encolher* os coeficientes estimados, conseguimos reduzir substancialmente a variância, com aumento de viés geralmente desprezível — o que melhora a performance preditiva em dados não vistos.

- **Interpretabilidade do Modelo.** É comum que, em uma regressão com múltiplos preditores, algumas variáveis não estejam realmente associadas à resposta. Incluir essas variáveis *irrelevantes* aumenta a complexidade do modelo e dificulta sua interpretação.

Ao remover essas variáveis — por exemplo, forçando os coeficientes correspondentes a serem zero — obtemos um modelo mais simples e fácil de interpretar. Note que o

Existem muitas alternativas, clássicas e modernas, ao uso de mínimos quadrados para ajustar o modelo linear. Neste capítulo, são discutidas duas alternativas:

- **Seleção de Subconjuntos (Subset Selection):** envolve identificar um subconjunto das p variáveis que acreditamos estarem associadas à resposta. Ajusta-se o modelo linear por mínimos quadrados usando apenas essas variáveis selecionadas.
- **Encolhimento (Shrinkage):** ajusta-se um modelo utilizando todas as p variáveis, mas os coeficientes são *encolhidos* em direção a zero. Esse encolhimento, também chamado de *regularização*, reduz a variância do modelo. Em alguns casos, os coeficientes podem até ser forçados a zero, o que permite realizar seleção de variáveis implicitamente.

7.1 Seleção do melhor subconjunto (Best Subset Selection)

A seleção do melhor subconjunto consiste em ajustar modelos de regressão para todas as combinações possíveis de subconjuntos das p variáveis preditoras. Por exemplo, ajustamos todos os modelos com uma variável, depois com duas, e assim por diante até o modelo com todas as p variáveis. Para cada tamanho de subconjunto k , comparamos todos os modelos de tamanho k e selecionamos aquele com melhor desempenho nos dados de treinamento, geralmente o que possui menor erro residual quadrático (RSS). Em seguida, entre os modelos de tamanhos diferentes, escolhemos aquele que apresenta melhor desempenho preditivo, avaliando-o em dados de validação ou usando critérios como C_p , AIC, BIC ou R^2 ajustado. O procedimento pode ser descrito da seguinte forma:

Algorithm 3 Best Subset Selection

- 1: Defina \mathcal{M}_0 como o modelo nulo, sem preditores, que prediz a média da amostra.
 - 2: **for** $k = 1, 2, \dots, p$ **do**
 - 3: Ajuste todos os $\binom{p}{k}$ modelos com exatamente k preditores.
 - 4: Escolha o melhor modelo \mathcal{M}_k dentre esses, com base no menor Erro Quadrático ou maior R^2 .
 - 5: **end for**
 - 6: Escolha o melhor modelo dentre $\mathcal{M}_0, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_p$ com base em:
 - erro em um conjunto de validação;
 - ou validação cruzada.
-

Uma dificuldade importante desse método está no fato de que RSS e R^2 tendem a melhorar conforme adicionamos mais variáveis, o que favorece modelos mais complexos e com maior risco de sobreajuste. Por isso, é essencial usar critérios que penalizam a complexidade ou avaliar diretamente o erro de teste, via validação cruzada ou conjunto de validação separado.

Apesar de sua simplicidade conceitual, a seleção do melhor subconjunto enfrenta sérias limitações computacionais. O número de modelos possíveis cresce exponencialmente com p , já

que existem 2^p subconjuntos. Por exemplo, com $p = 10$, há cerca de mil modelos possíveis; com $p = 20$, mais de um milhão; e com $p = 40$, torna-se praticamente inviável testar todas as possibilidades, mesmo com computadores modernos.

Vale destacar que o procedimento pode ser estendido para modelos não paramétricos. A seleção dos modelos pode ser guiada por medidas como o erro de validação ou critérios baseados em perda preditiva empírica, calculados em conjuntos de validação ou via validação cruzada. O desempenho de cada subconjunto de variáveis pode ser avaliado com base na capacidade preditiva do modelo ajustado de forma não paramétrica, como estimadores por k -vizinhos mais próximos, árvores de decisão, ou métodos kernel.

7.1.1 Seleção Foward e Backward

Por razões computacionais, a seleção do melhor subconjunto torna-se inviável para valores grandes de p . Além disso, um espaço de busca muito amplo pode levar à seleção de modelos com ótimo desempenho nos dados de treino, mas que não generalizam bem. Isso ocorre porque, quanto mais modelos avaliamos, maior a chance de encontrar um que se ajusta bem ao acaso. Assim, métodos que restringem o espaço de busca, como a *seleção stepwise*, oferecem uma alternativa prática e eficiente.

A **seleção stepwise** explora um número bem menor de modelos do que a busca exaustiva. Um exemplo comum é a **seleção stepwise para frente (forward stepwise selection)**. Nesse procedimento, começamos com o modelo nulo, que não contém nenhuma variável preditora. Em cada etapa, adicionamos à equação a variável que proporciona a maior melhora no ajuste, medida por critérios como R^2 ou RSS. Esse processo se repete até que todas as variáveis estejam no modelo, ou até um critério de parada ser atingido.

A seguir, descrevemos formalmente o procedimento:

Algorithm 4 Forward Stepwise Selection

- 1: Comece com o modelo nulo \mathcal{M}_0
 - 2: **for** $k = 0, 1, \dots, p - 1$ **do**
 - 3: Considere os $p - k$ modelos que adicionam uma nova variável ao modelo \mathcal{M}_k
 - 4: Escolha o modelo \mathcal{M}_{k+1} que oferece a maior melhoria no ajuste (menor RSS ou maior R^2)
 - 5: **end for**
 - 6: Ao final, escolha o melhor modelo entre $\mathcal{M}_0, \dots, \mathcal{M}_p$ com base em erro de validação, AIC, BIC, R^2 ajustado ou validação cruzada
-

Comparado à seleção exaustiva, que requer ajustar 2^p modelos, a seleção forward requer bem menos ajustes. Especificamente, no passo k , consideramos $p - k$ modelos, resultando em um total de:

$$1 + \sum_{k=0}^{p-1} (p - k) = 1 + \frac{p(p+1)}{2}$$

modelos avaliados. Por exemplo, com $p = 20$, a seleção exaustiva requer mais de um milhão de ajustes, enquanto a stepwise requer apenas 211.

Apesar da grande vantagem computacional, a seleção stepwise não garante encontrar o melhor modelo possível. Isso ocorre porque decisões tomadas em etapas anteriores afetam as opções disponíveis nas próximas. Por exemplo, suponha que o melhor modelo com uma variável inclua X_1 , mas o melhor modelo com duas variáveis inclua X_2 e X_3 . Como o método já adicionou X_1 na primeira etapa, o modelo com duas variáveis será forçado a incluir X_1 , podendo assim descartar a melhor combinação possível de duas variáveis. Portanto, o método pode falhar em encontrar o melhor subconjunto global de variáveis.

Ainda assim, na prática, a seleção stepwise costuma apresentar bom desempenho e é uma alternativa útil quando o número de variáveis é grande demais para permitir uma busca exaustiva.

Assim como a seleção stepwise para frente, a *seleção stepwise para trás* (*backward stepwise selection*) é uma alternativa eficiente à seleção do melhor subconjunto. No entanto, ao contrário do método forward, que começa com nenhum preditor e adiciona variáveis uma a uma, o método backward começa com o modelo completo (contendo todas as p variáveis) e vai removendo iterativamente as variáveis menos úteis, uma por vez.

A cada etapa, entre todos os modelos que removem uma variável do modelo atual, escolhe-se aquele com melhor ajuste — tipicamente o de menor erro residual quadrático (RSS) ou maior R^2 . O processo continua até restar apenas o modelo nulo, que não inclui nenhum preditor. O algoritmo é descrito a seguir:

Algorithm 5 Backward Stepwise Selection

- 1: Defina \mathcal{M}_p como o modelo completo, contendo todos os p preditores
 - 2: **for** $k = p, p - 1, \dots, 1$ **do**
 - 3: Considere os k modelos que removem uma das variáveis de \mathcal{M}_k , resultando em modelos com $k - 1$ variáveis
 - 4: Escolha o melhor entre esses modelos e denote-o por \mathcal{M}_{k-1}
 - 5: **end for**
 - 6: Escolha o melhor modelo final entre $\mathcal{M}_0, \dots, \mathcal{M}_p$, com base em erro de validação, AIC, BIC, R^2 ajustado ou validação cruzada
-

Assim como o método forward, a seleção backward avalia um número total de modelos igual a $1 + \frac{p(p+1)}{2}$, o que é muito menor que os 2^p modelos da seleção exaustiva. Isso permite aplicar o método backward mesmo quando p é grande demais para a busca completa.

Uma limitação importante, porém, é que a seleção backward só pode ser usada quando o número de observações n é maior do que o número de variáveis p , pois o modelo inicial completo precisa ser ajustável. Já o método forward pode ser aplicado mesmo quando $p > n$, sendo útil em contextos de alta dimensionalidade.

É importante lembrar que, assim como o forward, o backward também não garante encontrar o melhor subconjunto global de variáveis. O caminho de remoções escolhidas influencia o resultado final, e o método pode ignorar subconjuntos que oferecem ajuste superior por não estarem em sua trajetória de busca.

Exemplo: Seleção de Variáveis com Modelos Não Paramétricos no Python

A seguir, mostramos como aplicar a seleção sequencial de variáveis usando um classificador não paramétrico, o k -Nearest Neighbors (kNN), com o dataset clássico iris. Usamos a classe `SequentialFeatureSelector` da biblioteca `scikit-learn`:

```
from sklearn.feature_selection import SequentialFeatureSelector
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.datasets import load_iris
```

Primeiro, carregamos os dados:

```
X, y = load_iris(return_X_y=True)
```

Aqui, X representa as variáveis preditoras e y representa a variável de resposta (as espécies das flores). Em seguida, definimos o estimador k -NN com 3 vizinhos:

```
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
```

Criamos o seletor sequencial, especificando que queremos selecionar 3 variáveis:

```
sfs = SequentialFeatureSelector(knn, n_features_to_select=3)
```

Ajustamos o seletor aos dados:

```
sfs.fit(X, y)
```

Após o ajuste, podemos verificar quais variáveis foram selecionadas com:

```
sfs.get_support()
# Saída: array([ True, False,  True,  True])
```

A saída indica que as colunas 0, 2 e 3 foram selecionadas (valores `True`), enquanto a coluna 1 foi descartada. Podemos transformar o conjunto original X para conter apenas as colunas selecionadas:

```
sfs.transform(X).shape
# Saída: (150, 3)
```

O novo conjunto de dados contém 150 amostras e apenas 3 variáveis, conforme especificado. Este exemplo mostra como técnicas de seleção de variáveis podem ser usadas com modelos não paramétricos de forma prática e eficiente, utilizando validação interna para guiar a escolha das melhores combinações de preditores.

Comparação de Modelos com Seleção de Variáveis em Pipeline

A seguir, descrevemos um procedimento completo para comparar três modelos de classificação — Regressão Logística, k-Nearest Neighbors (kNN) e Floresta Aleatória — utilizando uma etapa de seleção de variáveis incorporada ao pipeline. A comparação é feita com base no desempenho de validação, e o melhor modelo é então avaliado no conjunto de teste.

1. Importação das bibliotecas e carregamento dos dados.

Utilizamos o conjunto de dados iris, que já está disponível no `scikit-learn`, e dividimos em três partes: treino, validação e teste.

```
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.feature_selection import SequentialFeatureSelector
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score
import numpy as np

X, y = load_iris(return_X_y=True)

# 60% treino, 20% validação, 20% teste
X_temp, X_test, y_temp, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=0)
X_train, X_val, y_train, y_val = train_test_split(X_temp, y_temp, test_size=0.25, random
```

2. Definição dos modelos a serem comparados.

Criamos um dicionário com os três classificadores que desejamos comparar. Eles serão usados dentro dos pipelines com seleção de variáveis.

```
models = {
    "Regressão Logística": LogisticRegression(max_iter=1000),
    "kNN": KNeighborsClassifier(n_neighbors=3),
    "Floresta Aleatória": RandomForestClassifier(random_state=0)
}
```

3. Criação dos pipelines com seleção sequencial de variáveis.

Para cada modelo, criamos um Pipeline que inclui primeiro a seleção de 3 variáveis com `SequentialFeatureSelector`, e depois o classificador.

```
pipelines = {
    name: Pipeline([
        ('select', SequentialFeatureSelector(model, n_features_to_select=3)),
        ('clf', model)
    ])
    for name, model in models.items()
}
```

4. Treinamento e avaliação de cada pipeline no conjunto de validação.

Cada pipeline é ajustado usando apenas os dados de treino. Em seguida, fazemos previsões no conjunto de validação e calculamos a acurácia.

```
for name, pipe in pipelines.items():
    pipe.fit(X_train, y_train)
    y_pred = pipe.predict(X_val)
    acc = accuracy_score(y_val, y_pred)
    print(f"{name}: Acurácia na validação = {acc:.3f}")
```

5. Escolha do melhor modelo e avaliação no conjunto de teste.

Após identificar o modelo com melhor desempenho na validação, reagrupamos os dados de treino e validação para refazer o ajuste final. Em seguida, avaliamos o desempenho final no conjunto de teste.

```
# Exemplo: suponha que a Regressão Logística teve melhor desempenho
best_pipe = pipelines["Regressão Logística"]
```

```
# Avaliamos no teste
y_test_pred = best_pipe.predict(X_test)
print("Acurácia final no teste:", accuracy_score(y_test, y_test_pred))
```

Esse processo garante uma comparação justa entre modelos, pois a seleção de variáveis é feita internamente em cada pipeline, evitando o uso indevido de dados de validação. Além disso, ao separar os conjuntos de dados, conseguimos avaliar corretamente a capacidade de generalização dos modelos.

7.2 Ridge e Lasso

7.2.1 Regressão Ridge (Ridge Regression)

A regressão ridge é uma técnica de regularização que busca ajustar todos os p preditores, mas penalizando coeficientes grandes, o que ajuda a reduzir a variância do modelo.

Lembre que, na regressão linear comum, os coeficientes $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)$ são obtidos minimizando a soma dos erros quadráticos (RSS):

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij} \right)^2.$$

Na regressão ridge, em vez disso, minimizamos a seguinte função de custo:

$$\sum_{i=1}^n \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2,$$

onde $\lambda \geq 0$ é o parâmetro de regularização, que controla a força da penalização. O segundo termo, chamado *penalidade de encolhimento* (*shrinkage penalty*), impõe uma penalização a coeficientes grandes e força os valores de β_j a se aproximarem de zero.

Em notação matricial, assumindo que os dados foram centrados (isto é, sem intercepto β_0), a função a ser minimizada pode ser escrita como:

$$\hat{\beta}^{\text{Ridge}} = \arg \min_{\beta} \{ \|Y - X\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_2^2 \},$$

onde:

- $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ é a matriz de design;
- $Y \in \mathbb{R}^n$ é o vetor resposta;
- $\beta \in \mathbb{R}^p$ é o vetor de coeficientes;
- $\|\cdot\|_2$ denota a norma Euclidiana (ou ℓ_2 -norma).

Essa formulação mostra claramente que o objetivo é encontrar um vetor de coeficientes que, além de se ajustar bem aos dados (minimizando o erro), tenha norma pequena, evitando coeficientes muito grandes.

O parâmetro λ precisa ser ajustado separadamente, geralmente via validação cruzada. Quando $\lambda = 0$, obtemos o modelo de mínimos quadrados ordinários (OLS). À medida que $\lambda \rightarrow \infty$, todos os coeficientes tendem a zero.

A solução do problema de Ridge é dada minimizando:

$$J(\beta) = \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|^2$$

Derivando e igualando a zero:

$$\nabla J = -2X^\top Y + 2(X^\top X + \lambda I)\beta = 0 \Rightarrow \hat{\beta} = (X^\top X + \lambda I)^{-1} X^\top Y$$

A matriz $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}$ é sempre invertível para $\lambda > 0$, mesmo que $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ seja singular. De fato, seja $\mathbf{A} = \mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}$, com $\lambda > 0$. Queremos mostrar que \mathbf{A} é invertível e para isso, vamos mostrar que \mathbf{A} é definida positiva.

Para todo $\mathbf{v} \neq 0$:

$$\mathbf{v}^\top \mathbf{A} \mathbf{v} = \mathbf{v}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v} + \lambda \mathbf{v}^\top \mathbf{v} = \|\mathbf{X} \mathbf{v}\|^2 + \lambda \|\mathbf{v}\|^2$$

Como $\lambda > 0$ e $\|\mathbf{v}\|^2 > 0$, então $\mathbf{v}^\top \mathbf{A} \mathbf{v} > 0$. Logo, \mathbf{A} é definida positiva e, portanto, invertível.

7.2.2 Regressão Lasso

A regressão Lasso (*Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) é uma alternativa à regressão ridge que realiza regularização com norma ℓ_1 . Ela busca minimizar:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{Lasso}} = \arg \min_{\boldsymbol{\beta}} \{ \|\mathbf{Y} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1 \}, \quad \text{onde } \|\boldsymbol{\beta}\|_1 = \sum_{j=1}^p |\beta_j|$$

Comparando com ridge, a diferença é que a penalização com norma ℓ_2 (quadrado dos coeficientes) foi substituída pela norma ℓ_1 . Essa troca faz com que o Lasso produza soluções esparsas — ou seja, com muitos coeficientes exatamente iguais a zero — promovendo assim **seleção de variáveis** automaticamente.

Ao contrário do ridge, o Lasso não possui solução fechada. Isso ocorre porque a função de custo não é diferenciável em pontos onde $\beta_j = 0$ (devido ao valor absoluto). Portanto, a solução é obtida por métodos numéricos como:

- **Coordinate descent (descida por coordenadas):** método iterativo que otimiza um coeficiente por vez, mantendo os outros fixos.
- **Least Angle Regression (LARS):** técnica eficiente que gera o caminho completo de soluções à medida que λ varia.

Enquanto ridge encolhe todos os coeficientes, mas não os zera, o Lasso força alguns coeficientes a serem exatamente zero quando λ é suficientemente grande. Isso facilita a interpretação dos modelos, além de funcionar como um mecanismo de seleção de variáveis.

7.2.3 Formulações Alternativas de Ridge e Lasso

As formulações de Ridge e Lasso com penalização λ também podem ser escritas como problemas com restrições equivalentes. No caso do Lasso, podemos reescrevê-lo como:

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}\|^2 \quad \text{sujeito a} \quad \sum_{j=1}^p |\beta_j| \leq s,$$

e, no caso do Ridge,

$$\min_{\beta} \|Y - X\beta\|^2 \quad \text{sujeito a} \quad \sum_{j=1}^p \beta_j^2 \leq s.$$

Para cada valor de $\lambda > 0$, existe um valor de $s > 0$ tal que as soluções das versões penalizadas e das versões com restrição são equivalentes.

Essas formas ajudam a entender o comportamento geométrico das soluções. No caso em que $p = 2$, a restrição do Lasso define um losango (por ser uma bola da norma ℓ_1), enquanto a do Ridge define um círculo (bola da norma ℓ_2). Como os cantos do losango coincidem com os eixos coordenados, é comum que a solução ótima ocorra exatamente em um desses cantos — ou seja, com algum $\beta_j = 0$. Isso explica por que o Lasso promove esparsidade e realiza implicitamente seleção de variáveis. Já a forma circular do Ridge penaliza todos os coeficientes de forma suave e simétrica, o que leva a coeficientes pequenos, mas raramente nulos.

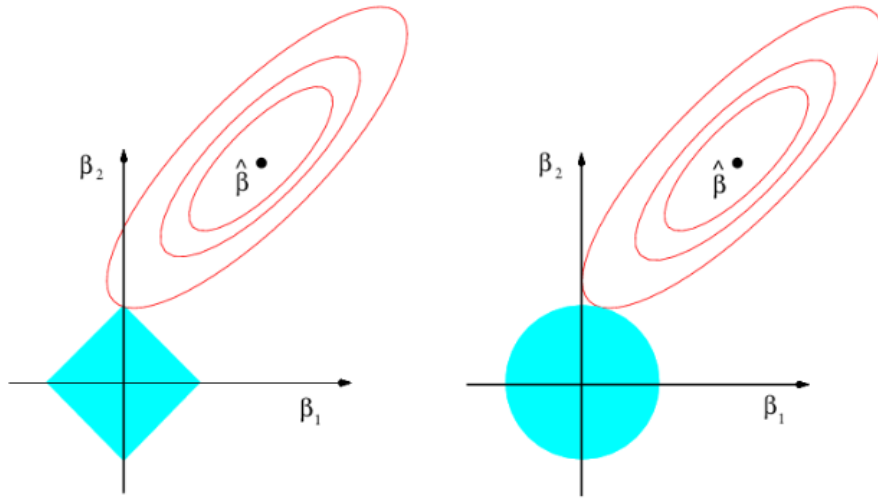


FIGURE 6.7. Contours of the error and constraint functions for the lasso (left) and ridge regression (right). The solid blue areas are the constraint regions, $|\beta_1| + |\beta_2| \leq s$ and $\beta_1^2 + \beta_2^2 \leq s$, while the red ellipses are the contours of the RSS.

Essas formulações também nos permitem interpretar o Lasso como uma aproximação convexa ao problema de seleção de subconjunto. Esse problema pode ser formulado como:

$$\min_{\beta} \|Y - X\beta\|^2 \quad \text{sujeito a} \quad \sum_{j=1}^p I(\beta_j \neq 0) \leq s,$$

onde $I(\cdot)$ é a função indicadora. Essa abordagem procura o menor erro possível utilizando no máximo s variáveis, mas é um problema combinatório e computacionalmente inviável para grandes p . O Lasso substitui essa restrição discreta por uma relaxação contínua via a norma ℓ_1 , tornando o problema convexamente tratável e eficiente de resolver com métodos numéricos.

Para entender essa equivalência, vamos começar com a formulação com restrição do Lasso:

$$\min_{\beta} \|Y - X\beta\|^2 \quad \text{sujeito a} \quad \|\beta\|_1 \leq s$$

Formamos o Lagrangiano com multiplicador $\lambda \geq 0$:

$$\mathcal{L}(\beta, \lambda) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta\|^2 + \lambda (\|\beta\|_1 - s)$$

Como s é constante, minimizar \mathcal{L} em relação a β equivale a minimizar:

$$\min_{\beta} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_1$$

Ou seja, obtemos a formulação penalizada do Lasso. O parâmetro λ atua como multiplicador de Lagrange: para cada valor de s , existe um $\lambda \geq 0$ tal que ambas as formulações têm a mesma solução ótima.

7.2.4 Interpretação via encolhimento

Para entender melhor o comportamento do Ridge e do Lasso, consideramos um caso simples: $n = p$, a matriz de design \mathbf{X} é a identidade \mathbf{I} , e não há intercepto. Nesse cenário, o problema de mínimos quadrados se torna:

$$\min_{\beta_1, \dots, \beta_p} \sum_{j=1}^p (y_j - \beta_j)^2,$$

cuja solução é simplesmente $\hat{\beta}_j = y_j$.

Aplicando a penalização do Ridge, o problema se torna:

$$\min_{\beta_1, \dots, \beta_p} \sum_{j=1}^p (y_j - \beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2,$$

cuja solução analítica é:

$$\hat{\beta}_j^{\text{Ridge}} = \frac{y_j}{1 + \lambda}.$$

Ou seja, cada coeficiente é encolhido proporcionalmente em direção a zero, pela mesma razão.

Para o Lasso, temos:

$$\min_{\beta_1, \dots, \beta_p} \sum_{j=1}^p (y_j - \beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j|,$$

cuja solução é dada por *soft-thresholding*:

$$\hat{\beta}_j^{\text{Lasso}} = \begin{cases} y_j - \lambda/2 & \text{se } y_j > \lambda/2 \\ y_j + \lambda/2 & \text{se } y_j < -\lambda/2 \\ 0 & \text{se } |y_j| \leq \lambda/2 \end{cases}$$

Dessa forma, enquanto o Ridge encolhe todos os coeficientes pela mesma proporção, o Lasso aplica uma redução constante $\lambda/2$, podendo zerar coeficientes com valores absolutos pequenos. Esse mecanismo explica por que o Lasso realiza seleção de variáveis automaticamente, enquanto o Ridge não zera coeficientes, apenas os diminui.

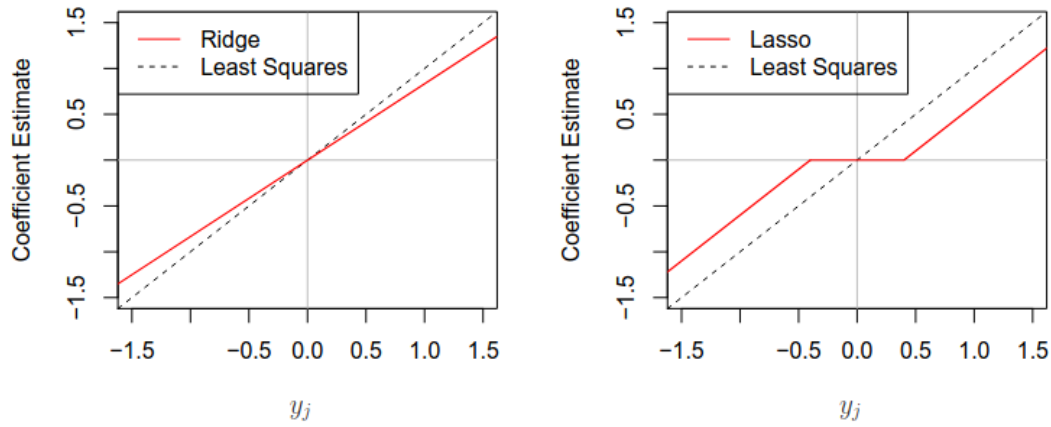


FIGURE 6.10. The ridge regression and lasso coefficient estimates for a simple setting with $n = p$ and \mathbf{X} a diagonal matrix with 1's on the diagonal. Left: The ridge regression coefficient estimates are shrunk proportionally towards zero, relative to the least squares estimates. Right: The lasso coefficient estimates are soft-thresholded towards zero.

Embora o cenário geral (com \mathbf{X} não diagonal) seja mais complexo, a intuição permanece válida: o Ridge suaviza todos os coeficientes, enquanto o Lasso favorece soluções esparsas.

Exercício 14. Encontre o análogo para o caso do best-subset selection.

7.2.5 Interpretação Bayesiana de Ridge e Lasso

A regressão Ridge e o Lasso podem ser vistos como estimativas de *máxima a posteriori* (MAP) em um modelo Bayesiano. Assumimos o modelo linear:

$$Y = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I),$$

onde a verossimilhança é dada por:

$$f(Y | \mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2\right).$$

Perceba que quando não impomos nenhum prior sobre $\boldsymbol{\beta}$, a estimativa de **máxima verossimilhança** (MLE) é:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{MLE}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{Y},$$

que coincide com a solução de mínimos quadrados ordinários.

Agora, se assumirmos um prior sobre os coeficientes $\boldsymbol{\beta}$, obtemos:

$$p(\boldsymbol{\beta} | Y, \mathbf{X}) \propto f(Y | \mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) \cdot p(\boldsymbol{\beta}).$$

A solução MAP é então:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{MAP}} = \arg \max_{\boldsymbol{\beta}} \log f(Y | \mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + \log p(\boldsymbol{\beta}).$$

Duas escolhas clássicas para o prior levam às penalizações de Ridge e Lasso:

- **Ridge:** prior Gaussiano i.i.d., $\beta_j \sim \mathcal{N}(0, \tau^2)$. Isso implica:

$$\log p(\beta) \propto -\frac{1}{2\tau^2} \|\beta\|_2^2,$$

e a solução MAP se torna:

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta} \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_2^2, \quad \text{com } \lambda = \frac{\sigma^2}{\tau^2}.$$

- **Lasso:** prior Laplace (double-exponential), i.i.d., $\beta_j \sim \text{Laplace}(0, b)$. Isso implica:

$$\log p(\beta) \propto -\frac{1}{b} \|\beta\|_1,$$

e a solução MAP é:

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta} \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_1, \quad \text{com } \lambda = \frac{\sigma^2}{b}.$$

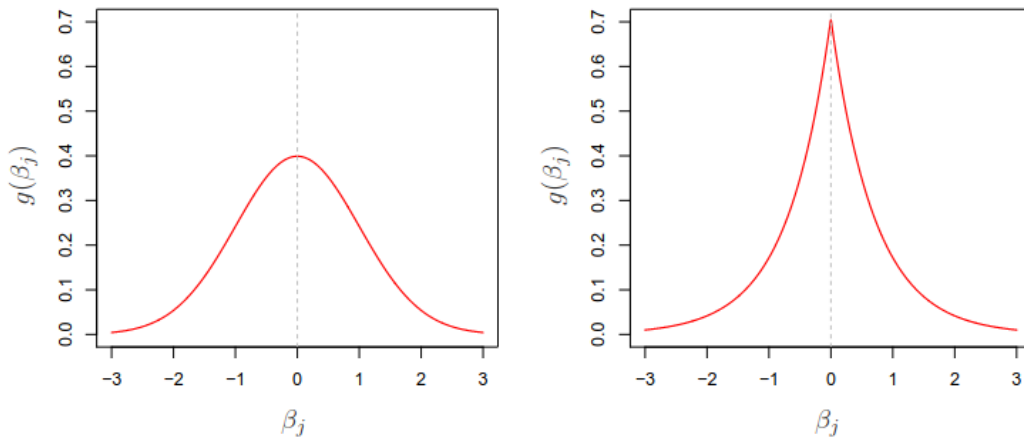


FIGURE 6.11. Left: Ridge regression is the posterior mode for β under a Gaussian prior. Right: The lasso is the posterior mode for β under a double-exponential prior.

Ambos os casos assumem erros Gaussianos, mas impõem diferentes estruturas a priori sobre os coeficientes:

- O prior Gaussiano (Ridge) é suave e disperso: tende a produzir coeficientes pequenos, mas raramente exatamente zero.
- O prior Laplace (Lasso) é pontudo no zero: concentra mais densidade ao redor do zero, promovendo esparsidade.

Assim, Ridge e Lasso são interpretações MAP sob diferentes priors, enquanto mínimos quadrados (ou MLE) assume apenas a verossimilhança sem prior.

Capítulo 8

Tópicos avançados

8.1 Descida dupla

Apêndice A

Revisão

Nesta seção, faremos uma breve revisão de alguns conceitos matemáticos importantes.

A.1 Álgebra linear

Ao longo deste material, adotaremos a seguinte notação:

- n : número de observações.
- p : número de variáveis preditoras.
- x_{ij} : valor da j -ésima variável na i -ésima observação, com $i = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, p$.

Representamos os dados como uma matriz $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}.$$

Cada linha de X é um vetor $x_i \in \mathbb{R}^p$, representando as variáveis da i -ésima observação:

$$x_i = \begin{pmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ \vdots \\ x_{ip} \end{pmatrix}.$$

Também podemos considerar as colunas de X , escritas como $x_j \in \mathbb{R}^n$:

$$x_j = \begin{pmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \vdots \\ x_{nj} \end{pmatrix}.$$

Assim, a matriz X pode ser expressa de duas formas:

$$X = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_p).$$

Também podemos considerar as linhas de X , escritas como $x^i \in \mathbb{R}^p$:

$$x^i = (x_{i1} \ x_{i2} \ \cdots \ x_{ip}).$$

Assim, a matriz X pode ser expressa de duas formas:

$$X = \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ \vdots \\ x^n \end{pmatrix}.$$

O símbolo T representa a transposta de vetores ou matrizes, por exemplo:

$$X^T = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1p} & x_{2p} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}.$$

Denotamos a variável resposta (ou target) por y_i , para a i -ésima observação. O vetor completo de respostas é:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

O conjunto de dados observados é formado por pares $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$.

Exercício 15. Considere o conjunto de dados de salários, exemplificado abaixo:

	year	age	maritl	race	education	region	jobclass	health	health_ins	logwage	wage
0	2006	18	1. Never Married	1. White	1. < HS Grad	2. Middle Atlantic	1. Industrial	1. <=Good	2. No	4.318063	75.043154
1	2004	24	1. Never Married	1. White	4. College Grad	2. Middle Atlantic	2. Information	2. >=Very Good	2. No	4.255273	70.476020
2	2003	45	2. Married	1. White	3. Some College	2. Middle Atlantic	1. Industrial	1. <=Good	1. Yes	4.875061	130.982177
3	2003	43	2. Married	3. Asian	4. College Grad	2. Middle Atlantic	2. Information	2. >=Very Good	1. Yes	5.041393	154.685293
4	2005	50	4. Divorced	1. White	2. HS Grad	2. Middle Atlantic	2. Information	1. <=Good	1. Yes	4.318063	75.043154
...
2995	2008	44	2. Married	1. White	3. Some College	2. Middle Atlantic	1. Industrial	2. >=Very Good	1. Yes	5.041393	154.685293
2996	2007	30	2. Married	1. White	2. HS Grad	2. Middle Atlantic	1. Industrial	2. >=Very Good	2. No	4.602060	99.689464
2997	2005	27	2. Married	2. Black	1. < HS Grad	2. Middle Atlantic	1. Industrial	1. <=Good	2. No	4.193125	66.229408
2998	2005	27	1. Never Married	1. White	3. Some College	2. Middle Atlantic	1. Industrial	2. >=Very Good	1. Yes	4.477121	87.981033
2999	2009	55	5. Separated	1. White	2. HS Grad	2. Middle Atlantic	1. Industrial	1. <=Good	1. Yes	4.505150	90.481913

3000 rows × 11 columns

Descreva quem é a matriz de dados X , quem é n , quem é p , quem é o vetor resposta \mathbf{y} . **Dica:** tem uma pegadinha.

A.1.1 Multiplicações

Nessa seção, vamos estudar fatos importantes sobre multiplicações envolvendo matrizes. Para mais detalhes, o leitor pode ver o excelente livro [Trefethen and Bau \(1997\)](#).

Matriz-vetor

Seja x_j a j -ésima coluna de X , um n -vetor. Então, a equação $y = Xb$ pode ser reescrito como:

$$y = Xb = \sum_{j=1}^p x_j b_j. \quad (\text{A.1})$$

Essa equação pode ser representada esquematicamente da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_p \end{bmatrix} = b_1 \begin{bmatrix} x_1 \end{bmatrix} + b_2 \begin{bmatrix} x_2 \end{bmatrix} + \cdots + b_p \begin{bmatrix} x_p \end{bmatrix}.$$

Na equação acima, y é expresso como uma combinação linear das colunas de X . Dessa forma, podemos resumir essas diferentes descrições do produto matriz-vetor da seguinte forma. Como matemáticos, estamos acostumados a interpretar a fórmula $Xb = y$ como uma afirmação de que X age sobre b para produzir y . A forma acima, por outro lado, sugere a interpretação de que b age sobre X para produzir y .

Matriz-Matriz

Para o produto matriz-matriz $B = AC$, cada coluna de B é uma combinação linear das colunas de A . Para demonstrar esse fato, começamos com a fórmula usual para produtos de matrizes. Se A é uma matriz de dimensão $\ell \times n$ e C é de dimensão $n \times p$, então B será de dimensão $\ell \times p$, com entradas definidas por

$$B_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} C_{kj}. \quad (\text{A.2})$$

Aqui, B_{ij} , A_{ik} e C_{kj} são elementos de B , A e C , respectivamente. Escrito em termos de colunas, o produto é

$$\begin{bmatrix} B_1 & B_2 & \cdots & B_n \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} C_1 & C_2 & \cdots & C_n \end{bmatrix},$$

que implica em:

$$B_j = AC_j = \sum_{k=1}^m C_{kj} A_k. \quad (\text{A.3})$$

Note que isso é só uma generalização da multiplicação anterior, já que $B_j = AC_j$ e podemos utilizar a formulação Matriz-Vetor da seção anterior.

Um exemplo simples de um produto matriz-matriz é o *produto externo*. Este é o produto de um vetor coluna u de dimensão n com um vetor linha v de dimensão p ; o resultado é uma matriz $n \times p$ de posto 1. O produto externo pode ser escrito como:

$$\begin{bmatrix} u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 u & v_2 u & \cdots & v_n u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 u_1 & \cdots & v_n u_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_1 u_m & \cdots & v_n u_m \end{bmatrix}.$$

As colunas são todas múltiplos do mesmo vetor u e, da mesma forma, as linhas são todas múltiplos do mesmo vetor v .

A.1.2 Mudança de base

Ao escrever o produto $b = X^{-1}y$, é importante não deixar que a notação de matriz inversa obscureça o que realmente está acontecendo! Em vez de pensar em b como o resultado da aplicação de X^{-1} a y , devemos entendê-lo como o vetor único que satisfaz a equação $Xb = y$.

Uma coisa importante de se notar é que como $XX^{-1}y = y$, então se $z = X^{-1}y$, temos que:

$$y = \sum z_i x_i,$$

isto é, as coordenadas do vetor $z = X^{-1}y$ indicam os coeficientes necessários para escrever y na base dada pelas colunas de X .

Aplicações

Com as ideias desenvolvidas nessa seção, somos capazes de desenvolver várias transformações de forma rápida. Por exemplo, suponha que queremos uma matriz C cuja primeira coluna é a primeira coluna de A duplicada, e as outras colunas são iguais as de A . Pela Seção de multiplicação Matriz-Matriz, queremos então que

$$\begin{aligned} C_1 &= 2A_1 + 0A_2 + \dots + 0A_n = A[2, 0, \dots, 0]^T \\ &\vdots \\ C_i &= A_i = A[0, 0, \dots, 1, \dots, 0]^T, \end{aligned}$$

logo, $C = AB$ onde $B = \text{diag}(2, 1, \dots, 1)$.

Suponha agora que D é igual a M , porém com a linha 3 somada com a linha 1. Note que a gente só sabe trabalhar com operações nas colunas, então a primeira coisa é transformar linhas em colunas, fazendo A^T , logo

$$\begin{aligned} D_1 &= A_1^T + A_3^T = A^T[1, 0, 1, \dots, 0]^T \\ &\vdots \\ D_i &= A_i^T = A^T[0, 0, \dots, 1, \dots, 0]^T. \end{aligned}$$

Logo,

$$D = A^T \begin{pmatrix} 1, 0, \dots, 0 \\ 0, 1, \dots, 0 \\ 1, 0, \dots, 0 \\ \vdots \\ 0, 0, \dots, 1 \end{pmatrix} = A^T M$$

Como queremos uma expressão em termos de A , podemos fazer $D^T = M^T A$.

Ou seja, operações nas colunas de uma matriz são feitas à direita e operações com linhas são feitas à esquerda transposta.

Exercício 16. Considere: $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. Verifique que as multiplicações definidas acima de fato tem o comportamento esperado descrito no texto.

Exercício 17. Considere: $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. Calcule as multiplicações necessárias para dobrar a coluna 1 somada com menos a coluna 2 e fazer linha 2 mais o dobro da linha 1.

Faça os cálculos explícitos para mostrar que suas multiplicações estão corretas.

A.1.3 Produtos internos

Nos espaços de dimensão 2 ou 3, definimos o comprimento de um vetor \mathbf{x} (ou seja, a distância de sua extremidade até a origem) usando o teorema de Pitágoras. Por exemplo, no espaço \mathbb{R}^3 , temos:

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}.$$

Essa fórmula pode ser naturalmente estendida para qualquer dimensão n , definindo a *norma* de um vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ como:

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}.$$

O termo *norma* é frequentemente usado como uma forma mais técnica ou refinada de se referir ao comprimento de um vetor.

O produto interno que definimos para \mathbb{R}^n e \mathbb{C}^n satisfaz as seguintes propriedades fundamentais:

1. **Simetria (conjugada):** $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \overline{\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle}$; no caso real, isso equivale à simetria usual: $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle$;
2. **Linearidade:** $\langle \alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = \alpha \langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle + \beta \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle$, para todos os vetores $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ e escalares α, β ;
3. **Não-negatividade:** $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$ para todo \mathbf{x} ;
4. **Não-degenerescência:** $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = 0$ se, e somente se, $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

Seja V um espaço vetorial (real ou complexo). Um *produto interno* em V é uma função que associa a cada par de vetores $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ um escalar $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ que satisfaz as propriedades 1 a 4 acima.

No caso real, assumimos que $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ é sempre real. Já em espaços complexos, o produto interno pode assumir valores complexos.

Chamamos de *espaço com produto interno* o par $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ formado por um espaço vetorial V e um produto interno definido sobre ele. Dado um produto interno, podemos definir a norma de um vetor por:

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}.$$

Exemplo 3. Seja $V = \mathbb{R}^n$ ou \mathbb{C}^n . Já vimos que o produto interno pode ser definido como

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{y}^* \mathbf{x} = \sum_{k=1}^n x_k \overline{y_k}.$$

Esse produto interno é conhecido como o produto interno padrão em \mathbb{R}^n ou \mathbb{C}^n .

Ao longo do texto, usaremos a letra \mathbb{F} para representar tanto \mathbb{R} quanto \mathbb{C} . Assim, qualquer afirmação sobre o espaço \mathbb{F}^n é válida para ambos os casos: \mathbb{R}^n e \mathbb{C}^n .

Exemplo 4. Recordemos que, para uma matriz quadrada A , o traço é definido como a soma dos elementos da diagonal principal:

$$\text{tr}(A) := \sum_{k=1}^n a_{k,k}.$$

Seja $M_{m \times n}$ o espaço das matrizes $m \times n$. Definimos o produto interno de Frobenius por:

$$\langle A, B \rangle = \text{tr}(B^* A).$$

É possível verificar que esse produto interno satisfaz as propriedades 1 a 4, ou seja, é de fato um produto interno.

Observe que:

$$\text{tr}(B^* A) = \sum_{j,k} A_{j,k} \overline{B_{j,k}},$$

o que mostra que esse produto interno coincide com o produto interno padrão em \mathbb{C}^{mn} .

Exemplo 5. Seja $V = L^2([a, b])$, o espaço das funções complexas mensuráveis ao quadrado integrável no intervalo $[a, b]$, ou seja:

$$L^2([a, b]) = \left\{ f : [a, b] \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_a^b |f(t)|^2 dt < \infty \right\}.$$

Definimos o produto interno entre duas funções $f, g \in L^2([a, b])$ por:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(t) \overline{g(t)} dt.$$

Esse produto interno satisfaz as propriedades fundamentais (conjugada simetria, linearidade, não-negatividade e não-degenerescência), tornando $L^2([a, b])$ um espaço com produto interno.

A norma induzida por esse produto interno é:

$$\|f\| = \left(\int_a^b |f(t)|^2 dt \right)^{1/2}.$$

Exercício 18. Mostre que nos exemplos acima, os produtos acima de fato satisfazem as propriedades de produto-interno.

A seguir apresentamos alguns resultados importantes sobre produtos internos.

Lema 1. *Seja \mathbf{x} um vetor em um espaço com produto interno V . Então $\mathbf{x} = 0$ se, e somente se,*

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0 \quad \text{para todo } \mathbf{y} \in V. \quad (1.1)$$

Corolário 1. *Sejam \mathbf{x}, \mathbf{y} vetores em um espaço com produto interno V . A igualdade $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ vale se, e somente se,*

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle \quad \text{para todo } \mathbf{z} \in V.$$

Corolário 2. *Sejam $A, B : X \rightarrow Y$ dois operadores lineares. Suponha que*

$$\langle A\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle B\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \quad \text{para todo } \mathbf{x} \in X \text{ e } \mathbf{y} \in Y.$$

Então, $A = B$.

Um dos resultados mais importantes com relação ao produto interno é a desigualdade de Cauchy-Schwarz:

Teorema 3 (Desigualdade de Cauchy-Schwarz). *Sejam \mathbf{x}, \mathbf{y} vetores em um espaço com produto interno. Então:*

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|.$$

Demonstração. Vamos apresentar uma demonstração que, embora não seja a mais curta, revela bem a origem das ideias principais.

Começemos com o caso real. Se $\mathbf{y} = 0$, a desigualdade é trivial. Assim, podemos supor que $\mathbf{y} \neq 0$. Pelas propriedades do produto interno, para qualquer escalar t temos:

$$0 \leq \|\mathbf{x} - t\mathbf{y}\|^2 = \langle \mathbf{x} - t\mathbf{y}, \mathbf{x} - t\mathbf{y} \rangle = \|\mathbf{x}\|^2 - 2t\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + t^2\|\mathbf{y}\|^2.$$

Essa desigualdade vale para todo $t \in \mathbb{R}$, em particular para

$$t = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{y}\|^2},$$

o que nos leva a:

$$0 \leq \|\mathbf{x}\|^2 - \frac{|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|^2}{\|\mathbf{y}\|^2},$$

ou seja,

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|^2 \leq \|\mathbf{x}\|^2 \cdot \|\mathbf{y}\|^2.$$

Portanto, obtemos a desigualdade desejada.

Para o caso complexo, uma das estratégias é considerar o mesmo argumento acima com t complexo (escolhendo, por exemplo, $t = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{y}\|^2}$), ou então proceder de forma análoga usando:

$$\|\mathbf{x} - t\mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 - t\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle - \bar{t}\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + |t|^2\|\mathbf{y}\|^2.$$

A escolha de $t = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{y}\|^2}$ minimiza a expressão acima, o que nos leva novamente a:

$$0 \leq \|\mathbf{x}\|^2 - \frac{|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|^2}{\|\mathbf{y}\|^2},$$

ou seja,

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|.$$

Esse raciocínio mostra completamente a validade da desigualdade. A justificativa anterior serviu apenas para motivar a escolha do valor específico de t . \square

Lema 2 (Desigualdade triangular). *Para quaisquer vetores \mathbf{x}, \mathbf{y} em um espaço com produto interno, vale:*

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|.$$

Demonstração.

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 &= \langle \mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle \\ &= \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 + \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \\ &\leq \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 + 2|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \\ &\leq \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 + 2\|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\| = (\|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|)^2. \end{aligned}$$

Tomando a raiz quadrada dos dois lados, obtemos a desigualdade desejada. \square

Lema 3 (Identidades de polarização). *Sejam $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$. É possível recuperar o produto interno a partir da norma usando as seguintes fórmulas:*

- Se V é um espaço com produto interno real, então:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \frac{1}{4} (\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 - \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2).$$

- Se V é um espaço com produto interno complexo, então:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \frac{1}{4} \sum_{\alpha \in \{1, -1, i, -i\}} \alpha \|\mathbf{x} + \alpha \mathbf{y}\|^2.$$

Exercício 19. Prove *todos* os resultados anteriores que não possuem provas.

A.1.4 Ortogonalidade

Definição 1. Dois vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} são chamados ortogonais (ou também perpendiculares) se

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 0.$$

Usamos a notação $\mathbf{u} \perp \mathbf{v}$ para indicar que os vetores são ortogonais.

Note que, se os vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} forem ortogonais, então vale a seguinte identidade, conhecida como identidade pitagórica:

$$\|\mathbf{u} + \mathbf{v}\|^2 = \|\mathbf{u}\|^2 + \|\mathbf{v}\|^2 \quad \text{se } \mathbf{u} \perp \mathbf{v}.$$

Definição 2. Dizemos que um vetor \mathbf{v} é ortogonal a um subespaço E se \mathbf{v} for ortogonal a todos os vetores $\mathbf{w} \in E$.

Analogamente, dizemos que dois subespaços E e F são ortogonais se todos os vetores de E são ortogonais a todos os vetores de F , ou seja, $\langle \mathbf{e}, \mathbf{f} \rangle = 0$ para todo $\mathbf{e} \in E$ e $\mathbf{f} \in F$.

O próximo lema mostra como verificar se um vetor é ortogonal a um subespaço gerado por um conjunto finito de vetores.

Lema 4. *Seja E o subespaço gerado pelos vetores $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_r$. Então, um vetor \mathbf{v} é ortogonal a E se, e somente se,*

$$\mathbf{v} \perp \mathbf{v}_k, \quad \text{para todo } k = 1, 2, \dots, r.$$

Definição 3. *Um sistema de vetores $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ é dito ortogonal se quaisquer dois vetores distintos do sistema forem ortogonais entre si, ou seja,*

$$\langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_k \rangle = 0 \quad \text{para } j \neq k.$$

Se, adicionalmente, $\|\mathbf{v}_k\| = 1$ para todo k , então o sistema é chamado de ortonormal.

Lema 5 (Identidade de Pitágoras generalizada). *Sejam $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ um sistema ortogonal. Então:*

$$\left\| \sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{v}_k \right\|^2 = \sum_{k=1}^n |\alpha_k|^2 \cdot \|\mathbf{v}_k\|^2.$$

Essa fórmula assume uma forma particularmente simples no caso de sistemas ortonormais, pois nesse caso $\|\mathbf{v}_k\| = 1$ para todo k .

Definição 4. *Um sistema ortogonal (ou ortonormal) $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$, que também forma uma base, é chamado de base ortogonal (ou base ortonormal).*

É claro que, se $\dim V = n$, então qualquer sistema ortogonal de n vetores não nulos em V é automaticamente uma base ortogonal.

Como vimos anteriormente, para encontrar as coordenadas de um vetor em uma base arbitrária, normalmente é necessário resolver um sistema linear. No entanto, no caso de uma base ortogonal, isso pode ser feito de forma muito mais simples.

Suponha que $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ seja uma base ortogonal, e que

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_n \mathbf{v}_n = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbf{v}_j.$$

Tomando o produto interno de ambos os lados com \mathbf{v}_1 , obtemos:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{v}_1 \rangle = \sum_{j=1}^n \alpha_j \langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_1 \langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_1 \|\mathbf{v}_1\|^2.$$

(já que $\langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_1 \rangle = 0$ para $j \neq 1$)

Portanto,

$$\alpha_1 = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{v}_1 \rangle}{\|\mathbf{v}_1\|^2}.$$

De forma semelhante, multiplicando ambos os lados por \mathbf{v}_k , obtemos:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{v}_k \rangle = \sum_{j=1}^n \alpha_j \langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_k \rangle = \alpha_k \|\mathbf{v}_k\|^2,$$

então

$$\alpha_k = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{v}_k \rangle}{\|\mathbf{v}_k\|^2}. \quad (\text{A.4})$$

Para encontrar as coordenadas de um vetor em uma base ortogonal, não é necessário resolver um sistema linear — as coordenadas são dadas diretamente pela fórmula (A.4).

Retomando a definição de projeção ortogonal da geometria clássica no plano (bidimensional), podemos introduzir a seguinte definição. Seja E um subespaço de um espaço com produto interno V .

Definição 5. *Seja \mathbf{v} um vetor. A sua projeção ortogonal sobre o subespaço E , denotada por $P_E \mathbf{v}$, é o vetor \mathbf{w} tal que:*

1. $\mathbf{w} \in E$;
2. $\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp E$.

Usaremos a notação $\mathbf{w} = P_E \mathbf{v}$ para representar a projeção ortogonal de \mathbf{v} sobre E .

Teorema 4. *Seja $\mathbf{w} = P_E \mathbf{v}$ a projeção ortogonal de \mathbf{v} sobre o subespaço E . Então, \mathbf{w} é o ponto de E mais próximo de \mathbf{v} , ou seja, para todo $\mathbf{x} \in E$:*

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| \leq \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|.$$

Além disso, se existir $\mathbf{x} \in E$ tal que

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| = \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|,$$

então $\mathbf{x} = \mathbf{w}$.

Demonstração. Seja $\mathbf{y} = \mathbf{w} - \mathbf{x}$. Então:

$$\mathbf{v} - \mathbf{x} = \mathbf{v} - \mathbf{w} + \mathbf{w} - \mathbf{x} = \mathbf{v} - \mathbf{w} + \mathbf{y}.$$

Como $\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp E$ e $\mathbf{y} \in E$, segue que $\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp \mathbf{y}$. Assim, pelo teorema de Pitágoras:

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|^2 = \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 \geq \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $\|\mathbf{y}\| = 0$, ou seja, $\mathbf{y} = 0$, o que implica $\mathbf{x} = \mathbf{w}$. □

Proposição 1. *Sejam $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_r$ uma base ortogonal do subespaço E . Então, a projeção ortogonal de um vetor \mathbf{v} sobre E é dada por:*

$$P_E \mathbf{v} = \sum_{k=1}^r \alpha_k \mathbf{v}_k, \quad \text{onde} \quad \alpha_k = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle}{\|\mathbf{v}_k\|^2}.$$

Em outras palavras:

$$P_E \mathbf{v} = \sum_{k=1}^r \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle}{\|\mathbf{v}_k\|^2} \mathbf{v}_k. \quad (\text{A.5})$$

Note que a fórmula dos coeficientes α_k coincide com a da equação (A.4), isto é, essa fórmula continua válida mesmo se o sistema $\{\mathbf{v}_k\}$ for apenas ortogonal (e não base), pois ela projeta \mathbf{v} sobre o subespaço gerado pelos vetores.

Demonstração. Definimos:

$$\mathbf{w} := \sum_{k=1}^r \alpha_k \mathbf{v}_k, \quad \text{com} \quad \alpha_k = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle}{\|\mathbf{v}_k\|^2}.$$

Queremos mostrar que $\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp E$. É suficiente mostrar que

$$\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp \mathbf{v}_k, \quad \text{para todo } k = 1, 2, \dots, r.$$

Para isso, calculamos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{v}_k \rangle &= \langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle - \langle \mathbf{w}, \mathbf{v}_k \rangle \\ &= \langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle - \left\langle \sum_{j=1}^r \alpha_j \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_k \right\rangle \\ &= \langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle - \sum_{j=1}^r \alpha_j \langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_k \rangle. \end{aligned}$$

Como o sistema $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r\}$ é ortogonal, temos $\langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_k \rangle = 0$ para $j \neq k$, e $\langle \mathbf{v}_k, \mathbf{v}_k \rangle = \|\mathbf{v}_k\|^2$. Logo:

$$\langle \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{v}_k \rangle = \langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle - \alpha_k \|\mathbf{v}_k\|^2 = \langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle - \langle \mathbf{v}, \mathbf{v}_k \rangle = 0.$$

Portanto, $\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp \mathbf{v}_k$ para todo k , e segue que $\mathbf{v} - \mathbf{w} \perp E$. Assim, $\mathbf{w} = P_E \mathbf{v}$. \square

Observação 2. Retomando a definição de produto interno em \mathbb{C}^n e \mathbb{R}^n , podemos deduzir da fórmula (A.5) que a matriz da projeção ortogonal P_E sobre um subespaço $E \subseteq \mathbb{C}^n$ (ou \mathbb{R}^n) é dada por:

$$P_E = \sum_{k=1}^r \frac{1}{\|\mathbf{v}_k\|^2} \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^*, \quad (\text{A.6})$$

onde os vetores coluna $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_r$ formam uma base ortogonal de E .

Ortogonalização de Gram–Schmidt

Suponha que temos um conjunto linearmente independente de vetores $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$. O método de Gram–Schmidt constrói a partir desse conjunto um sistema ortogonal $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ tal que:

$$\text{span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \text{span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n).$$

Além disso, para todo $r \leq n$, temos:

$$\text{span}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r) = \text{span}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r).$$

O algoritmo segue os seguintes passos:

1. Defina $\mathbf{v}_1 := \mathbf{x}_1$. Seja $E_1 := \text{span}(\mathbf{v}_1)$.

2. Defina

$$\mathbf{v}_2 := \mathbf{x}_2 - P_{E_1} \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_2 - \frac{\langle \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_1 \rangle}{\|\mathbf{v}_1\|^2} \mathbf{v}_1.$$

Seja $E_2 := \text{span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$. Como $\mathbf{x}_2 \notin E_1$, temos $\mathbf{v}_2 \neq 0$.

3. Defina

$$\mathbf{v}_3 := \mathbf{x}_3 - P_{E_2} \mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_3 - \frac{\langle \mathbf{x}_3, \mathbf{v}_1 \rangle}{\|\mathbf{v}_1\|^2} \mathbf{v}_1 - \frac{\langle \mathbf{x}_3, \mathbf{v}_2 \rangle}{\|\mathbf{v}_2\|^2} \mathbf{v}_2.$$

Seja $E_3 := \text{span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$.

4. Suponha que já tenhamos construído vetores ortogonais $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r$, tais que

$$E_r := \text{span}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r) = \text{span}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r).$$

Defina:

$$\mathbf{v}_{r+1} := \mathbf{x}_{r+1} - \sum_{k=1}^r \frac{\langle \mathbf{x}_{r+1}, \mathbf{v}_k \rangle}{\|\mathbf{v}_k\|^2} \mathbf{v}_k.$$

Note que $\mathbf{x}_{r+1} \notin E_r$, então $\mathbf{v}_{r+1} \neq 0$.

Continuando esse processo até $r = n$, obtemos um sistema ortogonal de vetores $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ tal que:

$$\text{span}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n) = \text{span}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n).$$

Exercício 20. Aplique o método de Gram-Schmidt para os vetores $\{(1, 1, 1), (0, 1, 2), (1, 0, 2)\}$.

3.3. Complemento ortogonal. Decomposição $V = E \oplus E^\perp$

Definição 6. Seja E um subespaço de um espaço com produto interno V . O complemento ortogonal de E , denotado por E^\perp , é o conjunto de todos os vetores ortogonais a E :

$$E^\perp := \{\mathbf{x} \in V : \mathbf{x} \perp E\}.$$

Se $\mathbf{x}, \mathbf{y} \perp E$, então qualquer combinação linear $\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}$ também está em E^\perp (consegue ver por quê?). Logo, E^\perp é um subespaço.

Pela definição de projeção ortogonal, qualquer vetor $\mathbf{v} \in V$ admite uma decomposição única da forma:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2, \quad \text{com } \mathbf{v}_1 \in E \text{ e } \mathbf{v}_2 \perp E \text{ (ou seja, } \mathbf{v}_2 \in E^\perp \text{)}.$$

Neste caso, temos $\mathbf{v}_1 = P_E \mathbf{v}$.

Essa afirmação pode ser escrita simbolicamente como:

$$V = E \oplus E^\perp,$$

o que expressa precisamente que todo vetor admite a decomposição única acima.

A proposição a seguir mostra uma propriedade fundamental do complemento ortogonal:

Proposição 2. Seja E um subespaço. Então:

$$(E^\perp)^\perp = E.$$

Exercício 21. Prove **todos** os resultados anteriores que não possuem provas.

A.1.5 Decomposição em valores singulares

Para mais detalhes na parte básica de álgebra linear, ver [Treil \(2015\)](#).

Definição 7. Um operador autoadjunto $A : X \rightarrow X$ é chamado de definido positivo se

$$\langle Ax, x \rangle > 0 \quad \forall x \neq 0,$$

e é chamado de semidefinido positivo se

$$\langle Ax, x \rangle \geq 0 \quad \forall x \in X.$$

Usaremos a notação $A \succ 0$ para operadores definidos positivos e $A \succeq 0$ para operadores semidefinidos positivos.

O teorema a seguir descreve operadores definidos positivos e semidefinidos positivos.

Teorema 5. Seja $A = A^*$. Então:

1. $A \succ 0$ se, e somente se, todos os autovalores de A são positivos.
2. $A \succeq 0$ se, e somente se, todos os autovalores de A são não-negativos.

Corolário 3. Seja $A = A^* \succeq 0$ um operador semidefinido positivo. Então, existe um único operador semidefinido positivo B tal que $B^2 = A$. Tal B é chamado de raiz quadrada (positiva) de A e é denotado por \sqrt{A} ou $A^{1/2}$.

Considere um operador $A : X \rightarrow Y$. O seu quadrado hermitiano A^*A é um operador semidefinido positivo atuando em X . De fato,

$$(A^*A)^* = A^*A^{**} = A^*A$$

e

$$\langle A^*Ax, x \rangle = \langle Ax, Ax \rangle = \|Ax\|^2 \geq 0 \quad \forall x \in X.$$

Portanto, existe uma (única) raiz quadrada semidefinida positiva $R = \sqrt{A^*A}$. Esse operador R é chamado de *módulo* do operador A , e frequentemente é denotado por $|A|$.

Definição 8. Os autovalores de $|A|$ são chamados de valores singulares de A . Em outras palavras, se $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são autovalores de A^*A , então $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n}$ são os valores singulares de A .

Considere um operador $A : X \rightarrow Y$ e denote por $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ os valores singulares de A , contando multiplicidades. Suponha ainda que $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r$ sejam os valores singulares não nulos de A . Isso significa, em particular, que $\sigma_k = 0$ para $k > r$.

Pela definição de valores singulares, os números $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2$ são autovalores de A^*A . Seja $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ uma base ortonormal de autovetores de A^*A , com $A^*A\mathbf{v}_k = \sigma_k^2\mathbf{v}_k$.

Proposição 3. O sistema

$$\mathbf{w}_k := \frac{1}{\sigma_k} A\mathbf{v}_k, \quad k = 1, 2, \dots, r$$

é um sistema ortonormal.

Exercício 22. Prove a proposição acima.

Intuição geométrica

A decomposição em valores singulares (SVD) é uma fatoração matricial importante tanto para o desenvolvimento de algoritmos quanto para a interpretação conceitual em álgebra linear. Um dos principais insights geométricos da SVD é que *a imagem da esfera unitária sob qualquer matriz $n \times p$ é uma hiperelipse*.

Consideramos a matriz A real e o espaço \mathbb{R}^n . A hiperelipse pode ser entendida como a generalização de uma elipse para dimensões superiores. Formalmente, em \mathbb{R}^n , é a superfície obtida ao esticar a esfera unitária em n direções ortogonais $\{u_1, \dots, u_n\}$ por fatores $\sigma_1, \dots, \sigma_n$. Esses fatores são chamados de *semieixos principais* e são as quantidades $\{\sigma_i u_i\}$. Quando A tem posto r , exatamente r dos σ_i serão não nulos. Em particular, se $n \geq p$, no máximo p deles serão positivos.

A esfera unitária S em \mathbb{R}^p é mapeada por A em uma hiperelipse no espaço \mathbb{R}^n . Os valores singulares $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n > 0$ são as medidas dos semieixos principais. Associados a esses valores, temos:

- Os **vetores singulares à esquerda** de A , que são os vetores $\{u_1, \dots, u_p\}$ na imagem AS .
- Os **vetores singulares à direita** de A , que são os vetores $\{v_1, \dots, v_p\} \subset S$, isto é, os vetores da esfera que correspondem às pré-imagens dos semieixos principais.

Temos então que $Av_i = \sigma_i u_i$, que pode ser escrito como $AV = U\Sigma$, como V é unitária, temos então que $A = U\Sigma V^T$.

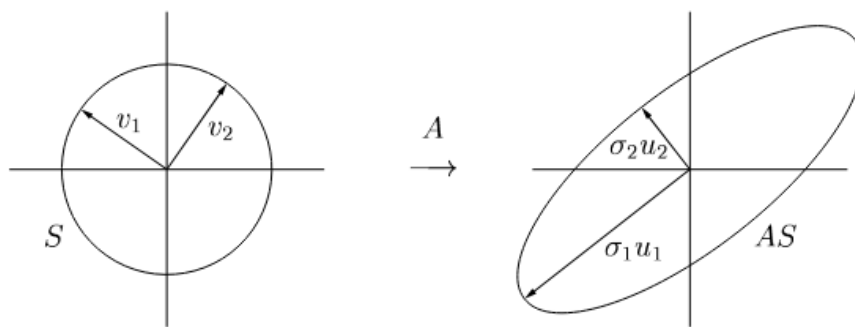


Figure 4.1. SVD of a 2×2 matrix.

Figura A.1: Retirado de (Trefethen and Bau, 1997).

Formalmente, sejam n e p números inteiros quaisquer, sem a necessidade de $n \geq p$. Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$ (não necessariamente de posto completo), a *decomposição em valores singulares* (SVD) de A é uma fatoração da forma:

$$A = U\Sigma V^*,$$

onde:

- $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz unitária;
- $V \in \mathbb{R}^{p \times p}$ é uma matriz unitária;
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times p}$ é uma matriz diagonal (ou quase-diagonal).

Os elementos diagonais σ_j da matriz Σ são não-negativos e ordenados em ordem não crescente, ou seja, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$, com $p = \min(n, p)$.

Teorema 6 (Teorema de Existência e Unicidade). *Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$ admite uma decomposição em valores singulares da forma $A = U\Sigma V^*$. Além disso, os valores singulares $\{\sigma_j\}$ são unicamente determinados. Se A for quadrada e os σ_j forem distintos, então os vetores singulares à esquerda $\{u_j\}$ e à direita $\{v_j\}$ também são unicamente determinados, a menos de sinais.*

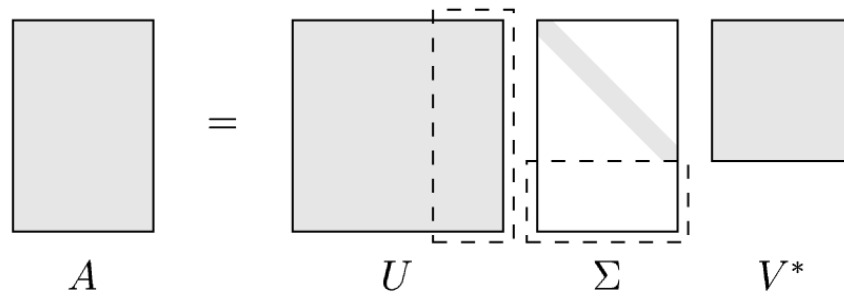


Figura A.2: Ilustração do SVD. Retirado de (Trefethen and Bau, 1997).

TODO: Falar das propriedades da matriz via SVD

Bibliografia

A.2 Probabilidade

Um *espaço de probabilidade* é uma tupla composta por três elementos: o *espaço amostral*, o *conjunto de eventos* e uma *distribuição de probabilidade*:

- **Espaço amostral Ω :** Ω é o conjunto de todos os eventos elementares ou resultados possíveis de um experimento. Por exemplo, ao lançar um dado, $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.
- **Conjunto de eventos \mathcal{F} :** \mathcal{F} é uma σ -álgebra, ou seja, um conjunto de subconjuntos de Ω que contém Ω e é fechado sob complementação e união enumerável (e, consequentemente, também sob interseção enumerável). Um exemplo de evento é: “o dado mostra um número ímpar”.
- **Distribuição de probabilidade \mathbb{P} :** \mathbb{P} é uma função que associa a cada evento de \mathcal{F} um número em $[0, 1]$, tal que $\mathbb{P}[\Omega] = 1$, $\mathbb{P}[\emptyset] = 0$ e, para eventos mutuamente exclusivos A_1, \dots, A_n , temos:

$$\mathbb{P}[A_1 \cup \dots \cup A_n] = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}[A_i].$$

A distribuição de probabilidade discreta associada ao lançamento de um dado justo pode ser definida como $\mathbb{P}[A_i] = 1/6$ para $i \in \{1, \dots, 6\}$, onde A_i é o evento “o dado mostra o valor i ”.

A.2.1 Variáveis aleatórias

Uma variável aleatória X é uma função $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mensurável, ou seja, tal que para qualquer intervalo I , o subconjunto $\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in I\}$ pertence ao conjunto de eventos.

A função de massa de probabilidade de uma variável aleatória discreta X é a função $x \mapsto \mathbb{P}[X = x]$.

Uma distribuição é dita *absolutamente contínua* quando possui uma função densidade de probabilidade f associada, tal que, para todo $a, b \in \mathbb{R}$:

$$\mathbb{P}[a \leq X \leq b] = \int_a^b f(x)dx.$$

Exemplo 6 (Binomial). Uma variável aleatória X segue uma distribuição binomial $B(n, p)$ com $n \in \mathbb{N}$ e $p \in [0, 1]$ se, para $k \in \{0, 1, \dots, n\}$,

$$\mathbb{P}[X = k] = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}.$$

Exemplo 7 (Uniforme). Uma variável aleatória X segue uma distribuição uniforme $U(a, b)$ no intervalo (a, b) se,

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{para } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Exemplo 8 (Normal). Uma variável aleatória X segue uma distribuição normal $N(\mu, \sigma^2)$ com $\mu \in \mathbb{R}$ e $\sigma > 0$ se sua densidade for dada por:

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

A distribuição normal padrão é $N(0, 1)$, com média zero e variância unitária.

Exemplo 9 (Laplace). Uma variável aleatória X segue uma distribuição de Laplace com parâmetro de localização $\mu \in \mathbb{R}$ e parâmetro de escala $b > 0$ se sua densidade for:

$$f(x) = \frac{1}{2b} \exp\left(-\frac{|x - \mu|}{b}\right).$$

A.2.2 Probabilidade condicional e independência

A probabilidade condicional do evento A dado o evento B é definida como a razão entre a probabilidade da interseção $A \cap B$ e a probabilidade de B , desde que $\mathbb{P}[B] \neq 0$:

$$\mathbb{P}[A | B] = \frac{\mathbb{P}[A \cap B]}{\mathbb{P}[B]}.$$

Dois eventos A e B são ditos independentes quando a probabilidade conjunta $\mathbb{P}[A \cap B]$ pode ser fatorada como o produto $\mathbb{P}[A]\mathbb{P}[B]$:

$$\mathbb{P}[A \cap B] = \mathbb{P}[A]\mathbb{P}[B].$$

De forma equivalente, a independência entre A e B pode ser expressa afirmando que $\mathbb{P}[A | B] = \mathbb{P}[A]$, sempre que $\mathbb{P}[B] \neq 0$.

Além disso, uma sequência de variáveis aleatórias é dita *i.i.d.* (independentes e identicamente distribuídas) quando todas as variáveis da sequência são mutuamente independentes e seguem a mesma distribuição de probabilidade.

A.2.3 Algumas fórmulas importantes

$$\mathbb{P}[A \cup B] = \mathbb{P}[A] + \mathbb{P}[B] - \mathbb{P}[A \cap B] \quad (\text{regra da soma})$$

$$\mathbb{P}\left[\bigcup_{i=1}^n A_i\right] \leq \sum_{i=1}^n \mathbb{P}[A_i] \quad (\text{desigualdade da união})$$

$$\mathbb{P}[A | B] = \frac{\mathbb{P}[B | A]\mathbb{P}[A]}{\mathbb{P}[B]} \quad (\text{fórmula de Bayes})$$

$$\mathbb{P}\left[\bigcap_{i=1}^n A_i\right] = \mathbb{P}[A_1]\mathbb{P}[A_2 | A_1] \cdots \mathbb{P}\left[A_n | \bigcap_{i=1}^{n-1} A_i\right] \quad (\text{regra da cadeia})$$

Exercício 23. Prove os resultados acima.

A.2.4 Esperança e desigualdade de Markov

A esperança ou valor esperado de uma variável aleatória X é denotada por $\mathbb{E}[X]$ e, no caso discreto, é definida como

$$\mathbb{E}[X] = \sum_x x \mathbb{P}[X = x]. \quad (\text{C.9})$$

No caso contínuo, quando X possui uma função densidade de probabilidade $f(x)$, a esperança é dada por

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx.$$

Além disso, dado uma função qualquer g , temos que:

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx.$$

Uma propriedade fundamental da esperança é sua linearidade. Isto é, para quaisquer variáveis aleatórias X e Y e constantes $a, b \in \mathbb{R}$, temos:

$$\mathbb{E}[aX + bY] = a\mathbb{E}[X] + b\mathbb{E}[Y]. \quad (\text{C.10})$$

A seguir, apresentamos um limite superior simples para uma variável aleatória não-negativa em função de sua esperança, conhecido como a *Desigualdade de Markov*.

Teorema 7 (Desigualdade de Markov). *Seja X uma variável aleatória não-negativa ($X \geq 0$ quase certamente) com valor esperado $\mathbb{E}[X] < \infty$. Então, para todo $t > 0$, temos:*

$$\mathbb{P}(X \geq t) \leq \frac{\mathbb{E}[X]}{t}.$$

Exercício 24. Prove as desigualdades de Markov.

A.2.5 Variância e a desigualdade de Chebyshev

A variância de uma variável aleatória X é denotada por $\text{Var}[X]$ e definida como

$$\text{Var}[X] = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2].$$

O desvio padrão de X é denotado por σ_X e definido como

$$\sigma_X = \sqrt{\text{Var}[X]}.$$

Para qualquer variável aleatória X e qualquer constante $a \in \mathbb{R}$, as seguintes propriedades básicas são válidas:

$$\text{Var}[X] = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2,$$

$$\text{Var}[aX] = a^2 \text{Var}[X].$$

Além disso, se X e Y forem independentes, então

$$\text{Var}[X + Y] = \text{Var}[X] + \text{Var}[Y].$$

Exercício 25. Prove as identidades acima.

A seguinte desigualdade, conhecida como *Desigualdade de Chebyshev*, fornece um limite para a probabilidade de uma variável aleatória se desviar de sua esperança em função do seu desvio padrão.

Teorema 8 (Desigualdade de Chebyshev). *Seja X uma variável aleatória com valor esperado $\mu = \mathbb{E}[X]$ e variância finita $\text{Var}(X) = \sigma^2$. Então, para todo $\varepsilon > 0$, vale:*

$$\mathbb{P}(|X - \mu| \geq \varepsilon) \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}.$$

Exercício 26. Prove a desigualdade de Chebyshev.

A.2.6 Covariância

A covariância entre duas variáveis aleatórias X e Y é denotada por $\text{Cov}(X, Y)$ e definida por

$$\text{Cov}(X, Y) = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])(Y - \mathbb{E}[Y])].$$

Exercício 27. Prove que

$$\text{Cov}(X, Y) = \mathbb{E}[XY] - \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y].$$

Dizemos que X e Y são *não correlacionadas* quando $\text{Cov}(X, Y) = 0$. Se X e Y forem independentes, então certamente são não correlacionadas, mas a recíproca nem sempre é verdadeira.

Exercício 28. *Seja X uniforme no intervalo $[-1, 1]$ e seja $Y = X^2$. Mostre que $\text{Cov}(X, Y) = 0$ mas X, Y não são independentes.*

Observação 3. Considere uma variável aleatória contínua X centrada em zero, ou seja, $\mathbb{E}[X] = 0$, com densidade de probabilidade par e definida em um intervalo do tipo $(-a, a)$, com $a > 0$. Seja $Y = g(X)$ para uma função g . A questão é: para quais funções $g(X)$ temos $\text{Cov}(X, g(X)) = 0$?

Sabemos que

$$\text{Cov}(X, g(X)) = \mathbb{E}[Xg(X)] - \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[g(X)].$$

Como $\mathbb{E}[X] = 0$, segue que $\text{Cov}(X, g(X)) = \mathbb{E}[Xg(X)]$. Denotando a densidade de X por $f(x)$, temos

$$\text{Cov}(X, g(X)) = \int_{-a}^a xg(x)f(x)dx.$$

Uma maneira de garantir que $\text{Cov}(X, g(X)) = 0$ é exigir que $g(x)$ seja uma função par. Assim, $xg(x)f(x)$ será uma função ímpar e a integral em $(-a, a)$ se anulará, ou seja,

$$\int_{-a}^a xg(x)f(x)dx = 0.$$

Portanto, $\text{Cov}(X, f(X)) = 0$ e como $Y = g(X)$, teremos que ambas são dependentes.

Dessa forma, podemos concluir que a distribuição precisa de X não afeta a condição, desde que $p(x)$ seja simétrica em torno da origem. Qualquer função par $f(\cdot)$ satisfará $\text{Cov}(X, f(X)) = 0$.

A covariância é uma forma bilinear simétrica e semi-definida positiva, com as seguintes propriedades:

- **Simetria:** $\text{Cov}(X, Y) = \text{Cov}(Y, X)$ para quaisquer variáveis X e Y .
- **Bilinearidade:** $\text{Cov}(X + X', Y) = \text{Cov}(X, Y) + \text{Cov}(X', Y)$ e $\text{Cov}(aX, Y) = a \text{Cov}(X, Y)$ para qualquer $a \in \mathbb{R}$.
- **Semi-definida positiva:** $\text{Cov}(X, X) = \text{Var}[X] \geq 0$ para qualquer variável X .

Além disso, vale a desigualdade de Cauchy-Schwarz, que afirma que para variáveis X e Y com variância finita,

$$|\text{Cov}(X, Y)| \leq \sqrt{\text{Var}[X] \text{Var}[Y]}.$$

Perceba a semelhança do resultado acima com a desigualdade de Cauchy-Schwarz!

Exercício 29. Prove os resultados acima.

A matriz de covariância de um vetor de variáveis aleatórias $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$ é a matriz em $\mathbb{R}^{n \times n}$ denotada por $\mathbf{C}(\mathbf{X})$ e definida por

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \mathbb{E} \left[(\mathbf{X} - \mathbb{E}[\mathbf{X}])(\mathbf{X} - \mathbb{E}[\mathbf{X}])^\top \right].$$

Portanto, $\mathbf{C}(\mathbf{X})$ é a matriz cujos elementos são $\text{Cov}(X_i, X_j)$. Além disso, é imediato mostrar que

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \mathbb{E}[\mathbf{X}\mathbf{X}^\top] - \mathbb{E}[\mathbf{X}]\mathbb{E}[\mathbf{X}]^\top.$$

A.2.7 Teoremas assintóticos

Em muitas aplicações de probabilidade e estatística, estamos interessados no comportamento de sequências de variáveis aleatórias quando o número de observações tende ao infinito. Os *teoremas assintóticos* fornecem resultados fundamentais que descrevem como certos estimadores ou somas de variáveis aleatórias se comportam no limite, ou seja, quando o tamanho da amostra n cresce indefinidamente.

Teorema 9 (Lei Fraca dos Grandes Números). *Seja $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ uma sequência de variáveis aleatórias independentes, todas com a mesma esperança μ e variância $\sigma^2 < \infty$. Definindo a média amostral por*

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i,$$

então, para qualquer $\varepsilon > 0$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(|\bar{X}_n - \mu| \geq \varepsilon) = 0.$$

Exercício 30. *Prove a Lei Fraca dos Grandes números utilizando a desigualdade de Chebyshev.*

Teorema 10 (Teorema Central do Limite). *Seja X_1, \dots, X_n uma sequência de variáveis aleatórias i.i.d. com esperança μ e desvio padrão σ . Definimos a média amostral como*

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

e a variância da média como $\sigma_n^2 = \sigma^2/n$. Então, a variável padronizada $(\bar{X}_n - \mu)/\sigma_n$ converge em distribuição para uma normal padrão $N(0, 1)$. Mais precisamente, para todo $t \in \mathbb{R}$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}\left(\frac{\bar{X}_n - \mu}{\sigma_n} \leq t\right) = \int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx.$$

Observação 4. *Apesar dos teoremas assintóticos, como a Lei Fraca dos Grandes Números e o Teorema Central do Limite, serem fundamentais para entender o comportamento de sequências de variáveis aleatórias quando $n \rightarrow \infty$, na prática, em aprendizado de máquina, o número de amostras n nem sempre é grande o suficiente para que esses resultados sejam aplicáveis com segurança. Por outro lado, desigualdades como as de Markov e Chebyshev fornecem limites válidos para qualquer valor finito de n . Essas desigualdades são exemplos de desigualdades de concentração, que nos permitem controlar a probabilidade de desvios em torno da média de uma variável aleatória. A teoria de concentração será crucial em tópicos futuros, pois fornece ferramentas importantes para analisar o desempenho de algoritmos em cenários onde o regime assintótico não pode ser garantido.*

A.2.8 Função geradora de momentos

A esperança $\mathbb{E}[X^p]$ é chamada de p -ésimo momento da variável aleatória X . A *função geradora de momentos* de uma variável aleatória X é uma ferramenta importante, pois permite obter seus diferentes momentos por meio de diferenciação em zero. Essa função é crucial tanto para descrever a distribuição de X quanto para analisar suas propriedades.

A função geradora de momentos de uma variável aleatória X é a função $M_X : t \mapsto \mathbb{E}[e^{tX}]$, definida para os valores de $t \in \mathbb{R}$ tais que a expectativa exista (seja finita).

Exercício 31. *Mostre que se M_X for diferenciável em zero, então o p -ésimo momento de X é dado por $\mathbb{E}[X^p] = M_X^{(p)}(0)$.*

Exercício 32. *Seja X uma variável aleatória com distribuição normal padrão, ou seja, $X \sim N(0, 1)$. Mostre que a função geradora de momentos de X é dada por por:*

$$M_X(t) = e^{\frac{t^2}{2}}.$$

Bibliografia

Apêndice B

Guia de desigualdades

Apêndice C

Ferramentas computacionais

C.1 Git

O **Git** é um sistema de controle de versão distribuído amplamente utilizado no desenvolvimento de software. Ele permite que diversos desenvolvedores trabalhem simultaneamente em um projeto, acompanhando as alterações feitas no código, revertendo mudanças, criando ramificações (*branches*) e colaborando de forma eficiente.

Com o Git, o histórico de alterações de um projeto é armazenado localmente, o que possibilita o trabalho off-line e oferece grande flexibilidade na manipulação de versões.

Principais comandos do Git

A seguir, apresentamos os comandos mais básicos e úteis do Git:

- `git init`
Inicializa um novo repositório Git em um diretório.
- `git clone <URL>`
Clona um repositório remoto (por exemplo, do GitHub) para a máquina local.
- `git status`
Exibe o estado atual do repositório: arquivos modificados, não rastreados etc.
- `git add <arquivo>`
Adiciona um ou mais arquivos ao *staging area*, preparando-os para o commit.
- `git commit -m "mensagem"`
Registra as mudanças preparadas com uma mensagem descritiva.
- `git log`
Mostra o histórico de commits do repositório.
- `git diff`
Exibe as diferenças entre arquivos modificados e o último commit.

- `git branch`
Lista todas as branches do projeto.
- `git checkout <branch>`
Alterna para outra branch existente.
- `git merge <branch>`
Mescla o conteúdo de uma branch à branch atual.
- `git pull`
Atualiza o repositório local com as alterações do repositório remoto.
- `git push`
Envia os commits locais para o repositório remoto.

Exemplo de fluxo básico

```
git init
git add arquivo.txt
git commit -m "Adiciona arquivo inicial"
git remote add origin https://github.com/usuario/repositorio.git
git push -u origin main
```

C.2 Python

C.3 Poetry

Referências Bibliográficas

- Bach, F. (2024). *Learning Theory from First Principles*. Adaptive Computation and Machine Learning series. MIT Press. [28](#)
- Breiman, L. (2001a). Random forests. *Machine Learning*, 45:5–32. [9](#)
- Breiman, L. (2001b). Statistical Modeling: The Two Cultures (with comments and a rejoinder by the author). *Statistical Science*, 16(3):199 – 231. [9](#)
- Hastie, T., Tibshirani, R., and Friedman, J. (2001). *The Elements of Statistical Learning*. Springer Series in Statistics. Springer New York Inc., New York, NY, USA. [6](#), [18](#)
- Izbicki, R. and dos Santos, T. M. (2020). *Aprendizado de máquina: uma abordagem estatística*. [6](#), [8](#), [15](#), [19](#)
- James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R. (2013). *An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R*. Springer. [6](#), [7](#), [28](#)
- Mohri, M., Rostamizadeh, A., and Talwalkar, A. (2018). *Foundations of Machine Learning*. The MIT Press, 2nd edition. [6](#), [10](#)
- Shalev-Shwartz, S. and Ben-David, S. (2014). *Understanding machine learning : from theory to algorithms*. [6](#), [7](#)
- Trefethen, L. N. and Bau, D. (1997). *Numerical Linear Algebra*. SIAM. [83](#), [94](#), [95](#)
- Treil, S. (2015). *Linear Algebra Done Wrong*. [93](#)