# AULA 8: SELEÇÕES DE MODELOS / EXTENSÕES DOS MODELOS LINEARES

Análise Estatística e Modelagem de Dados Ecológicos

Thiago S. F. Silva - tsfsilva@rc.unesp.br

1 de Abril de 2015

Programa de Pós Graduação em Ecologia e Biodiversidade - UNESP

#### OUTLINE

Seleção de variáveis e construção do modelo

Mais extensões dos modelos lineares gerais

Modelos Lineares Generalizados

Mínimos Quadrados Generalizados

SELEÇÃO DE VARIÁVEIS E CONSTRUÇÃO DO MODELO

#### O MÉTODO DE MÚLTIPLAS HIPÓTESES

Atualmente, muito da pesquisa científica e análise de dados se baseia no modelo simplista de testes contra uma hipótese nula "ingênua"(naive) e pouco informativa, e que resulta de uma amálgama entre os métodos propostos por Fisher e Neyman-Pearson.

Vários autores sugerem uma estratégia diferente, onde múltiplas hipóteses podem ser avaliadas comparativamente, a partir da análise da evidencia a favor de cada hipótese.

Cada hipótese pode ser expressa em termos de um modelo estatístico, e a comparação entre modelos oferecerá a evidência que suporta ou não as diferentes hipóteses

Esse processo pode ser chamado de Construção do Modelo.

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- · O que já se sabe sobre o seu problema (arcabouço teórico)?

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- · O que já se sabe sobre o seu problema (arcabouço teórico)?
- · Com base nesse conhecimento, que tipo de relações você espera?

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- · O que já se sabe sobre o seu problema (arcabouço teórico)?
- · Com base nesse conhecimento, que tipo de relações você espera?
- · Essas relações já foram quantificadas em outros estudos, mesmo que para outros sistemas?

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- · O que já se sabe sobre o seu problema (arcabouço teórico)?
- · Com base nesse conhecimento, que tipo de relações você espera?
- · Essas relações já foram quantificadas em outros estudos, mesmo que para outros sistemas?
- O método "escopeta" (shotgun) é, na maioria das vezes, uma perda de tempo e recursos

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- · O que já se sabe sobre o seu problema (arcabouço teórico)?
- · Com base nesse conhecimento, que tipo de relações você espera?
- · Essas relações já foram quantificadas em outros estudos, mesmo que para outros sistemas?
- O método "escopeta" (shotgun) é, na maioria das vezes, uma perda de tempo e recursos
- Você pode gastar o mesmo dinheiro/esforço para coletar 10 réplicas de 10 variáveis...ou 100 réplicas de uma variável

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- · O que já se sabe sobre o seu problema (arcabouço teórico)?
- · Com base nesse conhecimento, que tipo de relações você espera?
- · Essas relações já foram quantificadas em outros estudos, mesmo que para outros sistemas?
- O método "escopeta" (shotgun) é, na maioria das vezes, uma perda de tempo e recursos
- Você pode gastar o mesmo dinheiro/esforço para coletar 10 réplicas de 10 variáveis...ou 100 réplicas de uma variável
- · E não esqueça do esforço de análise!

- 1) Construa o seu modelo conceitual.
- 2)

- 1) Construa o seu modelo conceitual.
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos.

· Quais são as hipóteses?

- 1) Construa o seu modelo conceitual.
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos.

- · Quais são as hipóteses?
- Que informações (variáveis) preciso medir para testar essas hipóteses?

- 1) Construa o seu modelo conceitual.
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos.

- · Quais são as hipóteses?
- Que informações (variáveis) preciso medir para testar essas hipóteses?
- · O desenho experimental é essencial!

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- · Experimentos x estudos observacionais (confirmatórios ou exploratórios).

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
  - Experimentos x estudos observacionais (confirmatórios ou exploratórios).
- · O seu modelo só é valido dentro do escopo das variáveis preditivas.

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- Experimentos x estudos observacionais (confirmatórios ou exploratórios).
- · O seu modelo só é valido dentro do escopo das variáveis preditivas.
- · Generalidade x especificidade.

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
  - Experimentos x estudos observacionais (confirmatórios ou exploratórios).
- O seu modelo só é valido dentro do escopo das variáveis preditivas.
- · Generalidade x especificidade.
- · Tamanho da amostra: qual o tamanho do efeito que você deseja detectar, e com qual nivel de confiança?

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
  - Experimentos x estudos observacionais (confirmatórios ou exploratórios).
- O seu modelo só é valido dentro do escopo das variáveis preditivas.
- · Generalidade x especificidade.
- · Tamanho da amostra: qual o tamanho do efeito que você deseja detectar, e com qual nivel de confiança?
- · Estudos pilotos e ou simulações podem fazer toda a diferença.

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados

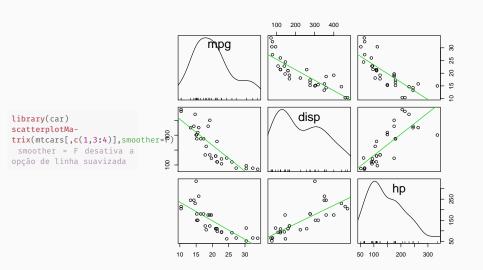
- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- · Estatísticas descritivas (médias, desvios, quantis)

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- · Estatísticas descritivas (médias, desvios, quantis)
- · Histogramas, boxplots, curvas de densidade de distribuição

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- · Estatísticas descritivas (médias, desvios, quantis)
- · Histogramas, boxplots, curvas de densidade de distribuição
- · Gráficos de dispersão (scatterplots) e correlações:
  - · Matrizes de gráficos de dispersão
  - Matrizes de correlação
- Este passo deve ser uma pré-analise dos dados frente às hipóteses pré-estabelecidas, e não o início do processo de formulação de hipóteses!

```
data(mtcars)
print(cor(mtcars), digits=2)
##
        mpg
              cyl disp
                          hp drat
                                      wt gsec vs
                                                         am gear
                                                                   carb
## mpg 1.00 -0.85 -0.85 -0.78 0.681 -0.87 0.419 0.66 0.600 0.48 -0.551
       -0.85 1.00 0.90 0.83 -0.700 0.78 -0.591 -0.81 -0.523 -0.49 0.527
## cvl
## disp -0.85 0.90 1.00 0.79 -0.710 0.89 -0.434 -0.71 -0.591 -0.56 0.395
## hp
       -0.78 0.83 0.79 1.00 -0.449 0.66 -0.708 -0.72 -0.243 -0.13 0.750
## drat 0.68 -0.70 -0.71 -0.45 1.000 -0.71 0.091
                                                0.44 0.713
                                                            0.70 -0.091
       -0.87 0.78 0.89 0.66 -0.712 1.00 -0.175 -0.55 -0.692 -0.58 0.428
## wt.
## gsec 0.42 -0.59 -0.43 -0.71 0.091 -0.17 1.000
                                                0.74 -0.230 -0.21 -0.656
## vs
       0.66 -0.81 -0.71 -0.72 0.440 -0.55 0.745 1.00 0.168
                                                            0.21 -0.570
## am
       0.60 -0.52 -0.59 -0.24 0.713 -0.69 -0.230 0.17 1.000 0.79 0.058
## gear 0.48 -0.49 -0.56 -0.13 0.700 -0.58 -0.213 0.21 0.794 1.00 0.274
## carb -0.55 0.53 0.39 0.75 -0.091 0.43 -0.656 -0.57 0.058 0.27 1.000
```



- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- 5) "Seleção de variáveis" Avaliação das hipóteses

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- 5) "Seleção de variáveis" Avaliação das hipóteses
- · Aqui, os seus modelos serão avaliados comparativamente

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- 5) "Seleção de variáveis" Avaliação das hipóteses
- · Aqui, os seus modelos serão avaliados comparativamente
- Na maioria das vezes, as hipóteses são formuladas post hoc, e as variáveis são adicionadas e removidas durante esse processo.
   Não é o ideal.

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- 5) "Seleção de variáveis" Avaliação das hipóteses
- · Aqui, os seus modelos serão avaliados comparativamente
- Na maioria das vezes, as hipóteses são formuladas post hoc, e as variáveis são adicionadas e removidas durante esse processo.
   Não é o ideal.
- Você pretende explicar a relação entre as variáveis? Comece com o modelo completo e avalie os coeficientes e incertezas (erros e valores p).

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- 5) "Seleção de variáveis" Avaliação das hipóteses
- Cuidado com o efeito da multicolinearidade! Calcule os VIFs, e aplique medidas corretivas se necessário!

- 1) Construa o seu modelo conceitual
- 2) Traduza suas hipóteses em modelos estatísticos
- 3) Colete seus dados
- 4) Faça uma análise exploratória
- 5) "Seleção de variáveis" Avaliação das hipóteses
- · Cuidado com o efeito da multicolinearidade! Calcule os VIFs, e aplique medidas corretivas se necessário!
- O objetivo é prever? Avalie a contribuição de cada variável para o modelo final, e mantenha só as mais importantes. Esta avaliação é mais robusta se houver validação independente.

Para cada conjunto de k=p-1 preditores, existem  $2^{p-1}$  combinações de variáveis.

Para cada conjunto de k = p - 1 preditores, existem  $2^{p-1}$  combinações de variáveis.

Para que possamos determinar quais variáveis realmente contribuem para o modelo final, precisamos de uma medida objetiva.

Para cada conjunto de k=p-1 preditores, existem  $2^{p-1}$  combinações de variáveis.

Para que possamos determinar quais variáveis realmente contribuem para o modelo final, precisamos de uma medida objetiva.

Já conhecemos uma dessas medidas, o ...

Para cada conjunto de k=p-1 preditores, existem  $2^{p-1}$  combinações de variáveis.

Para que possamos determinar quais variáveis realmente contribuem para o modelo final, precisamos de uma medida objetiva.

Já conhecemos uma dessas medidas, o ...  $R^2_{ajustado}$ .

# SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

Para cada conjunto de k=p-1 preditores, existem  $2^{p-1}$  combinações de variáveis.

Para que possamos determinar quais variáveis realmente contribuem para o modelo final, precisamos de uma medida objetiva.

Já conhecemos uma dessas medidas, o ...  $R^2_{ajustado}$ .

Podemos também usar os p-valores de cada coeficiente.

# SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

Para cada conjunto de k = p - 1 preditores, existem  $2^{p-1}$  combinações de variáveis.

Para que possamos determinar quais variáveis realmente contribuem para o modelo final, precisamos de uma medida objetiva.

Já conhecemos uma dessas medidas, o ...  $R^2_{ajustado}$ .

Podemos também usar os p-valores de cada coeficiente.

Mas, por causa da multicolinearidade, os p-valores podem esconder variáveis importantes, mas correlacionadas.

A medida conhecida como AIC (Akaike's Information Criterion) é a mais comumente usada para comparação de modelos.

A medida conhecida como AIC (Akaike's Information Criterion) é a mais comumente usada para comparação de modelos.

O AIC é baseado no método de estimação por máxima verossimilhança, e na teoria da informação.

A medida conhecida como AIC (Akaike's Information Criterion) é a mais comumente usada para comparação de modelos.

O AIC é baseado no método de estimação por máxima verossimilhança, e na teoria da informação.

Definimos o AIC como:

$$2k - 2\ln(L)$$

k é o número de parâmetros.

L é a função de verossimilhança. Minimizamos essa função para encontrar a reta do modelo.

Para a comparação de modelos estimados por OLS, podemos usar a função equivalente:

$$AIC = 2k + n\log(SQ_{Res}/n)$$

Para a comparação de modelos estimados por OLS, podemos usar a função equivalente:

$$AIC = 2k + n\log(SQ_{Res}/n)$$

Interpretação:

Quanto melhor o ajuste do modelo, menor é  $\ln(L)$  ou  $n\log(SQ_{Res}/n)$ 

Para a comparação de modelos estimados por OLS, podemos usar a função equivalente:

$$AIC = 2k + n\log(SQ_{Res}/n)$$

Interpretação:

Quanto melhor o ajuste do modelo, menor é  $\ln(L)$  ou  $n\log(SQ_{Res}/n)$ 

Mas quanto mais parâmetros adicionarmos, maior é 2k

Para a comparação de modelos estimados por OLS, podemos usar a função equivalente:

$$AIC = 2k + n\log(SQ_{Res}/n)$$

Interpretação:

Quanto melhor o ajuste do modelo, menor é  $\ln(L)$  ou  $n\log(SQ_{Res}/n)$ 

Mas quanto mais parâmetros adicionarmos, maior é 2k

O melhor modelo minimiza o valor do AIC, através de uma combinação entre bom ajuste e **parcimônia**.

#### **EXEMPLO: AIC**

```
m1 <- lm(qsec ~ hp, data=mtcars)
summary(m1)$r.squared
## [1] 0.5015804
summary(m1)$adj.r.squared
## [1] 0.4849664
AIC(m1)
## [1] 110.6665
m2 <- lm(gsec ~ hp + wt, data=mtcars)
summary(m2)$r.squared
## [1] 0.6520291
summary(m2)$adj.r.squared
## [1] 0.6280311
AIC(m1,m2)
##
      df AIC
## m1 3 110.6665
## m2 4 101.1682
```

```
m3 <- lm(qsec ~ hp + wt + disp, data=mtcars)
summary(m3)$r.squared

## [1] 0.6808292
summary(m3)$adj.r.squared

## [1] 0.6466324

AIC(m1,m2,m3)

## df AIC

## m1 3 110.6665

## m2 4 101.1682

## m3 5 100.4036
```

# OBSERVAÇÕES IMPORTANTES

Outras medidas de comparação existem (Ex. AICc, BIC)

Diferentemente de testes de significância (*p-values* ou *likelihood* tests), os modelos comparados por AIC, AICc ou BIC não precisam ser aninhados (*nested*).

Contudo, a variáveldependente e suas observações precisam ser exatamente as mesmas. O que estamos avaliando e á capacidade de cada modelo em explicar/prever cada uma dessas variáveis.

Uma alternativa à escolha de um único modelo é o método de *model averaging*. Vários modelos são combinados, ponderados pela força da evidencia de cada um deles.

# OBSERVAÇÕES IMPORTANTES

Outras medidas de comparação existem (Ex. AICc, BIC)

Diferentemente de testes de significância (*p-values* ou *likelihood* tests), os modelos comparados por AIC, AICc ou BIC não precisam ser aninhados (*nested*).

Contudo, a variáveldependente e suas observações precisam ser exatamente as mesmas. O que estamos avaliando e á capacidade de cada modelo em explicar/prever cada uma dessas variáveis.

Uma alternativa à escolha de um único modelo é o método de *model averaging*. Vários modelos são combinados, ponderados pela força da evidencia de cada um deles.

A melhor seleção de variáveis sempre dependerá da concordância do modelo com a teoria, e da aplicação esperada.

Quem vai receber o título: você ou o computador?

#### LEITURAS IMPORTANTES

Johnson JB, Omland KS (2004) Model selection in ecology and evolution. Trends in Ecology Evolution, 19, 101–8.

Whittingham MJ, Stephens P a, Bradbury RB, Freckleton RP (2006) Why do we still use stepwise modelling in ecology and behaviour? The Journal of Animal Ecology, 75, 1182–9.

Anderson D (2008) Model Based Inference in the Life Sciences: A Primer on Evidence. Springer New York, New York, NY, 146 pp.

Burnham KP (2004) Multimodel Inference: Understanding AIC and BIC in Model Selection. Sociological Methods Research, 33, 261–304.

Anderson D, Burnham KP (2000) Null hypothesis testing: problems, prevalence, and an alternative. The Journal of Wildlife Management, 64, 912–923.

Existem métodos automáticos de seleção de variáveis (ex. *stepwise*)

Tema da moda: data mining

Existem métodos automáticos de seleção de variáveis (ex. *stepwise*)

Tema da moda: data mining

Estes métodos podem oferecer contribuições importantes na **análise exploratória** do seu modelo.

Existem métodos automáticos de seleção de variáveis (ex. *stepwise*)

Tema da moda: data mining

Estes métodos podem oferecer contribuições importantes na análise exploratória do seu modelo.

Mas a melhor seleção final de variáveis sempre dependerá da concordância do modelo com a teoria, e da aplicação esperada.

Existem métodos automáticos de seleção de variáveis (ex. stepwise)

Tema da moda: data mining

Estes métodos podem oferecer contribuições importantes na **análise exploratória** do seu modelo.

Mas a melhor seleção final de variáveis sempre dependerá da concordância do modelo com a teoria, e da aplicação esperada.

Quem vai receber o diploma: voce ou o computador?

Stepwise significa passo a passo.

Stepwise significa passo a passo.

O método pode ser aplicado de maneira crescente (*forward*) ou decrescente (*backward*).

Stepwise significa passo a passo.

O método pode ser aplicado de maneira crescente (forward) ou decrescente (backward).

No modo *forward*, começamos com uma única variável, e vamos progressivamente adicionando mais variáveis, testando o ganho em poder explicativo a cada nova adição.

Stepwise significa passo a passo.

O método pode ser aplicado de maneira crescente (*forward*) ou decrescente (*backward*).

No modo *forward*, começamos com uma única variável, e vamos progressivamente adicionando mais variáveis, testando o ganho em poder explicativo a cada nova adição.

No modo *backward*, começamos com todas as variáveis, e vamos progressivamente eliminando cada uma, testando a perda em poder explicativo a cada nova adição.

O método usado para calcular esse "ganho"ou "perda"de informação pode variar de acordo com a escolha do usuário

O método usado para calcular esse "ganho"ou "perda"de informação pode variar de acordo com a escolha do usuário

O método stepwise original é baseado em testes F de significância, e bastante criticado por sua ampla sensitividade à multicolinearidade.

O método usado para calcular esse "ganho"ou "perda"de informação pode variar de acordo com a escolha do usuário

O método stepwise original é baseado em testes F de significância, e bastante criticado por sua ampla sensitividade à multicolinearidade.

O uso de medidas mais robustas como o AIC reduzem, mas não eliminam, esse problema.

O método usado para calcular esse "ganho"ou "perda"de informação pode variar de acordo com a escolha do usuário

O método stepwise original é baseado em testes F de significância, e bastante criticado por sua ampla sensitividade à multicolinearidade.

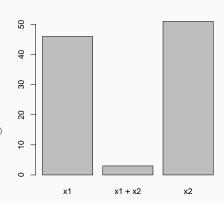
O uso de medidas mais robustas como o AIC reduzem, mas não eliminam, esse problema.

Quando duas variáveis são muito parecidas, a escolha se torna arbitrária, e somente o suporte teórico (i.e. bom senso) pode resolver o problema.

### <u>MÉ</u>TODO STEPWISE

```
form <- vector()

for(i in c(1:100)){
    x1 <- runif(30,0,20)
    x2 <- x1 + rnorm(30,0,1)
    y <- 3 + 2.3*x1 + 2.1*x2 + rnorm(30,0,10)
    m <- lm(y ~ x1 + x2)
    sm <- step(m, trace=0)
    form <- c(form, as.character(formula(sm))[3])
}
barplot(table(factor(form)))</pre>
```



Uma alternativa interessante pode ser combinar o método *stepwise* com métodos de aleatorização. Mas mesmo assim, continua sendo uma análise exploratória.

```
m1 <- lm (qsec ~ ., mtcars)
library(bootStepAIC)
## Loading required package: MASS
m.boot <- boot.stepAIC(m1,mtcars,B = 10, direction="both")</pre>
```

```
m.boot$Covariates

## (%)
## wt 100
## gear 90
## am 80
## vs 80
## cyl 70
## hp 70
## disp 60
## mpg 60
## mpg 60
## carb 20
## drat 20
```

### <u>MÉ</u>TODO STEPWISE

```
m.boot$Sign
##
          + (%)
                 - (%)
## mpg 100.00000
                 0.00000
## vs 100.00000
                 0.00000
## wt
     100.00000 0.00000
## hp
     28.57143 71.42857
## am
       12.50000
                 87.50000
## gear
       11.11111 88.88889
## carb
       0.00000 100.00000
## cyl 0.00000 100.00000
## disp 0.00000 100.00000
## drat 0.00000 100.00000
```

```
m.boot$Significance

## (%)

## carb 100.00000

## wt 100.00000

## year 88.88889

## vs 87.50000

## cyl 85.71429

## disp 83.33333

## am 75.00000

## mpg 66.66667

## hp 57.14286

## drat 50.00000
```

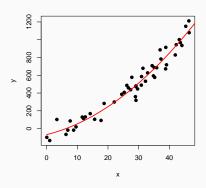
```
m.boot[4:6]
## $OrigModel
##
## Call:
## lm(formula = gsec ~ ., data = mtcars)
##
## Coefficients:
## (Intercept) mpg
                          cvl
                                   disp
                                               hp
                                                            drat
##
   17.776177 0.069048 -0.362678 -0.007501 -0.001563 -0.131064
##
         wt
                   VS
                              am
                                       gear
                                                  carb
## 1.496332 0.970035 -0.901186 -0.201285 -0.273598
##
##
## $OrigStepAIC
##
## Call:
## lm(formula = qsec ~ cyl + disp + wt + vs + am + carb, data = mtcars)
##
## Coefficients:
## (Intercept) cvl disp
                                         wt
                                                  VS
                                                              am
## 18.611144 -0.369984 -0.008899 1.475086 0.968162 -0.902579
## carb
## -0.434722
##
##
## $direction
## [1] "both"
```

```
m.boot[7:8]
## $k
## [1] 2
##
## $BootStepAIC
## $BootStepAIC[[1]]
##
## Call:
## lm(formula = qsec ~ cyl + hp + wt + vs + gear, data = boot.data)
##
## Coefficients:
## (Intercept)
                     cvl
                                 hp
                                             wt
                                                        VS
                                                                  gear
##
     20.55994 -0.29160 -0.01034 0.68602 1.42131
                                                              -0.63289
##
##
## $BootStepAIC[[2]]
##
## Call:
## lm(formula = qsec ~ mpg + cyl + disp + wt + vs + am + gear, data = boot.data)
##
## Coefficients:
## (Intercept)
                                         disp
                   mpg
                               cyl
                                                       wt
                                                                    VS
##
     19.66381
                0.09939 -0.47900 -0.00653 1.02154 0.86578
##
          am
                 gear
##
    -1.35078 -0.65210
##
##
```

MAIS EXTENSÕES DOS MODELOS LINEARES GERAIS

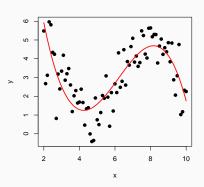
### REGRESSÃO POLINOMIAL

```
set.seed(234)
x <- runif(50,0,50)
y <- 5 + 1.3*x + 0.5*x^2 + rnorm(50,0,100)
m <- lm(y ~ x + I(x^2))
plot(x,y, pch=19)
xnovo <- data.frame( x = seq(0,50,by=0.5))
p <- predict(m,xnovo)
lines(xnovo[,1],p, lwd=2,col='red')</pre>
```



# REGRESSÃO POLINOMIAL

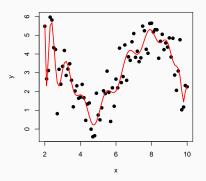
```
set.seed(234)
x <- seq(2,10,by=0.1)
y <- 3 + 2*sin(x) + rnorm(81,0,1)
m <- lm(y ~ poly(x,3))
plot(x,y, pch=19)
xnovo <- data.frame( x = seq(2,10,by=0.1))
p <- predict(m,xnovo)
lines(xnovo[,1],p, lwd=2,col='red')</pre>
```



### REGRESSÃO POLINOMIAL

### Cuidado com polinômios exagerados!

```
set.seed(234)
x <- seq(2,10,by=0.1)
y <- 3 + 2*sin(x) + rnorm(81,0,1)
m <- lm(y ~ poly(x,20))
plot(x,y, pch=19)
xnovo <- data.frame( x = seq(2,10,by=0.1))
p <- predict(m,xnovo)
lines(xnovo[,1],p, lwd=2,col='red')</pre>
```



Como saber se um modelo polinomial é melhor do que um modelo linear, e onde parar?

· Não podemos usar  $\mathbb{R}^2$ , porque ele sempre aumenta...

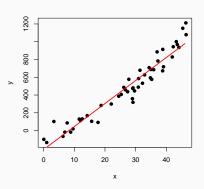
Como saber se um modelo polinomial é melhor do que um modelo linear, e onde parar?

- · Não podemos usar  $\mathbb{R}^2$ , porque ele sempre aumenta...
- $\cdot$  Não podemos usar  $SQ_{reg}$ , porque os residuos ficam cada vez menores com mais termos

Como saber se um modelo polinomial é melhor do que um modelo linear, e onde parar?

- · Não podemos usar  $\mathbb{R}^2$ , porque ele sempre aumenta...
- $\cdot$  Não podemos usar  $SQ_{reg}$ , porque os residuos ficam cada vez menores com mais termos
- · Mas podemos usar o AIC!

```
set.seed(234)
x <- runif(50,0,50)
y <- 5 + 1.3*x + 0.5*x^2 + rnorm(50,0,100)
m1 <- lm(y ~ x)
AIC(m1)
## [1] 602.9227</pre>
```



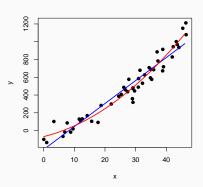
```
m2 <- lm(y ~ poly(x,2))

AIC(m1,m2)

## df AIC

## m1 3 602.9227

## m2 4 580.6495
```



```
m3 <- lm(y ~ poly(x,3))

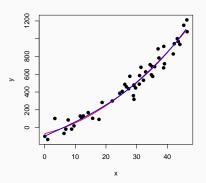
AIC(m1,m2,m3)

## df AIC

## m1 3 602.9227

## m2 4 580.6495

## m3 5 581.8052
```



```
m10 <- lm(y ~poly(x,10))

AIC(m1,m2,m3,m10)

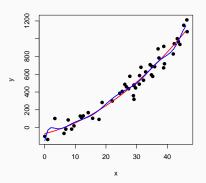
## df AIC

## m1 3 602.9227

## m2 4 580.6495

## m3 5 581.8052

## m10 12 592.0629
```



Limitações dos modelos polinomiais

· Os coeficientes não tem uma interpreteção direta

Limitações dos modelos polinomiais

- · Os coeficientes não tem uma interpreteção direta
  - · Não posso manter  $X_1$  constante e variar X

Limitações dos modelos polinomiais

- · Os coeficientes não tem uma interpreteção direta
  - · Não posso manter  $X_1$  constante e variar X

· Extrapolações são muito pouco confiáveis, pois o efeito dos termos de potência é muito forte fora do escopo

Para comparação de coeficientes com unidades diferentes

· Obtida através de normalização das variáveis:

Para comparação de coeficientes com unidades diferentes

· Obtida através de normalização das variáveis:

$$\cdot \ \, \frac{X - \bar{X}}{s}$$

Para comparação de coeficientes com unidades diferentes

· Obtida através de normalização das variáveis:

$$\frac{X-\bar{X}}{s}$$

 A subtração da média é chamada de centralização dos dados

Para comparação de coeficientes com unidades diferentes

· Obtida através de normalização das variáveis:

$$\cdot \ \, \frac{X - \bar{X}}{s}$$

- A subtração da média é chamada de centralização dos dados
- · A divisão pelo desvio padrão fornece a **normalização** da variância

# Para comparação de coeficientes com unidades diferentes

· Obtida através de normalização das variáveis:

$$\cdot \ \frac{X - \bar{X}}{s}$$

- A subtração da média é chamada de centralização dos dados
- A divisão pelo desvio padrão fornece a normalização da variância
- · Bônus: A estimativa de  $\beta_0$  se torna o valor de E(Y) para os valores médios de X

```
x1 <- runif(20,0,100)
                                                  x1n \leftarrow (x1-mean(x1))/sd(x1)
x2 <- runif(20,0,10)
                                                  x2n \leftarrow (x2-mean(x2))/sd(x2)
v < -5 + 3*x1 + 30*x2 + rnorm(20.0.20)
                                                  mn \leftarrow lm(y \sim x1n + x2n)
m < -lm(v \sim x1 + x2)
                                                  summarv(mn)
summarv(m)
                                                  ##
##
                                                  ## Call:
## Call:
                                                  ## lm(formula = v \sim x1n + x2n)
## lm(formula = v \sim x1 + x2)
                                                  ##
##
                                                  ## Residuals:
## Residuals:
                                                         Min
                                                                  10 Median
                                                                                   30
                                                                                           Max
       Min
##
                1Q Median
                                 30
                                        Max
                                                  ## -49.956 -9.722 5.638 12.781 27.107
## -49.956 -9.722 5.638 12.781 27.107
                                                  ##
##
                                                  ## Coefficients:
## Coefficients:
                                                             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
##
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                                                  ## (Intercept) 280.077 5.131 54.59 < 2e-16 *
## (Intercept) 2.2083 12.2693
                                   0.18 0.859
                                                  ## x1n
                                                               94.397 5.319 17.75 2.09e-12 ***
## x1
         3.1714
                      0.1787 17.75 2.09e-12 ***
                                                  ## x2n
                                                               81.430
                                                                         5.319 15.31 2.24e-11 ***
## x2
       28.0824 1.8342 15.31 2.24e-11 ***
                                                  ## ---
## ---
                                                  ## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05
##
                                                  ## Residual standard error: 22.95 on 17 degrees of
## Residual standard error: 22.95 on 17 degrees of
                                                  ## Multiple R-squared: 0.9741, ^^IAdjusted R-squared
## Multiple R-squared: 0.9741.^^IAdjusted R-squa
                                                  ## F-statistic: 320.1 on 2 and 17 DF, p-value: 3.2
## F-statistic: 320.1 on 2 and 17 DF, p-value: 3.2
```

# MODELOS LINEARES GENERALIZADOS

A **Regressão Logística** inverte o jogo, e prediz uma variável qualitativa usando dados contínuos

- Exemplo: Qual a probabilidade de um aluno ser aceito em um programa de pós-graduação, dada a sua média escolar, nota geral das provas, e avaliação das cartas de recomendação?
- O "truque" é transformar um dado qualitativo (aprovado/não-aprovado) em um dado quantitativo

- · Aprovado/Não-Aprovado  $\sim$  Binomial(n, p)
- $\cdot$  Aprovação possui uma probabilidade p
- · Reprovação possui probabilidade 1-p

- · Aprovado/Não-Aprovado  $\sim$  Binomial(n, p)
- $\cdot$  Aprovação possui uma probabilidade p
- · Reprovação possui probabilidade 1-p
- · Probabilidades possuem valores contínuos, mas ...

- · Aprovado/Não-Aprovado  $\sim$  Binomial(n, p)
- $\cdot$  Aprovação possui uma probabilidade p
- · Reprovação possui probabilidade 1-p
- · Probabilidades possuem valores contínuos, mas ...possuem limites (0,1), que dificultam a modelagem

- · Aprovado/Não-Aprovado  $\sim$  Binomial(n, p)
- $\cdot$  Aprovação possui uma probabilidade p
- · Reprovação possui probabilidade 1-p
- · Probabilidades possuem valores contínuos, mas ...possuem limites (0,1), que dificultam a modelagem
- · Quanto maiores as probabilidades, maior a dificuldade para aumentá-las (i.e. não-linear)

Chances (ou possibilidades, odds)

- · Razão entre probabilidades
- · Para uma distribuição binomial,  $o = \frac{p}{1-p}$

# Chances (ou possibilidades, odds)

- · Razão entre probabilidades
- · Para uma distribuição binomial,  $o = \frac{p}{1-p}$

• Ex.: Se 
$$p = 0.8$$
,  $o = \frac{0.8}{0.2} = 4$ 

· A chance é de 4 para 1

# Chances (ou possibilidades, odds)

- · Razão entre probabilidades
- · Para uma distribuição binomial,  $o = \frac{p}{1-p}$
- Ex.: Se p = 0.8,  $o = \frac{0.8}{0.2} = 4$
- · A chance é de 4 para 1
- · Se p = 0, o = 0; se p = 1, o = Inf(por limite)

## Chances (ou possibilidades, odds)

- · Razão entre probabilidades
- · Para uma distribuição binomial,  $o = \frac{p}{1-p}$
- Ex.: Se p = 0.8,  $o = \frac{0.8}{0.2} = 4$
- · A chance é de 4 para 1
- Se p = 0, o = 0; se p = 1, o = Inf(por limite)
- · Resolvemos metade do problema dos limites (0, 1).

Log das Chances (log odds): transformação logito (logit)

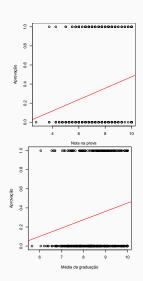
- · logaritmo da chance
- · Se p = 0, o = 0 e  $\log(0) = -Inf(\text{por limite})$
- · Se p = 1, o = Inf e log(Inf) = Inf(por limite)

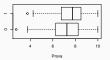
Log das Chances (log odds): transformação logito (logit)

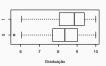
- · logaritmo da chance
- Se p = 0, o = 0 e  $\log(0) = -Inf(por limite)$
- · Se p = 1, o = Inf e log(Inf) = Inf(por limite)
- · Agora podemos escrever  $\log\left(\frac{p(X)}{1-p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$

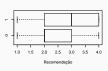
Log das Chances (log odds): transformação logito (logit)

- · logaritmo da chance
- · Se p = 0, o = 0 e  $\log(0) = -Inf(por limite)$
- Se p = 1, o = Inf e log(Inf) = Inf(por limite)
- · Agora podemos escrever  $\log\left(\frac{p(X)}{1-p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$
- $\cdot \text{ Equivale a } p(X) = \frac{e^{\beta_0+\beta_1X}}{e^{\beta_0+\beta_1X}+1} + \varepsilon = \frac{1}{1-e^{\beta_0+\beta_1X}} + \varepsilon$

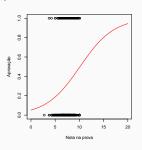




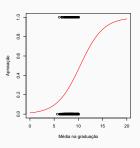




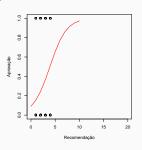
```
m <- glm(aprovado ~ prova, phd, family='binomial')</pre>
summarv(m)
##
## Call:
## glm(formula = aprovado ~ prova, family = "binomial", data = phd)
##
## Deviance Residuals:
      Min
##
              10 Median
                              30
                                     Max
## -1.1623 -0.9052 -0.7547 1.3486 1.9879
##
## Coefficients:
##
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## prova
             ## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
##
  (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
      Null deviance: 499.98 on 399 degrees of freedom
##
## Residual deviance: 486.06 on 398 degrees of freedom
## AIC: 490.06
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```



```
m <- glm(aprovado ~ grad, phd, family='binomial')
summarv(m)
##
## Call:
## glm(formula = aprovado ~ grad, family = "binomial", data = phd)
##
## Deviance Residuals:
      Min
##
                10 Median
                                  30
                                          Max
## -1.1131 -0.8874 -0.7566 1.3305 1.9824
##
## Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
##
## (Intercept) -4.3576 1.0353 -4.209 2.57e-05 ***
## grad
            0.4204
                           0.1195 3.517 0.000437 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
##
  (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
##
      Null deviance: 499.98 on 399 degrees of freedom
## Residual deviance: 486.97 on 398 degrees of freedom
## AIC: 490.97
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```



```
m <- glm(aprovado ~ reco, phd, family='binomial')
summarv(m)
##
## Call:
## glm(formula = aprovado ~ reco, family = "binomial", data = phd)
##
## Deviance Residuals:
      Min
##
                10 Median
                                  30
                                          Max
## -1.1989 -0.9599 -0.7508
                             1.1561
                                       1.9365
##
## Coefficients:
##
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
## (Intercept) -2.2948
                       0.3524 -6.511 7.46e-11 ***
## reco
               0.5863
                           0.1240 4.728 2.26e-06 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 '' 1
##
  (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
##
      Null deviance: 499.98 on 399 degrees of freedom
## Residual deviance: 475.71 on 398 degrees of freedom
## AIC: 479.71
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```



```
m <- glm(aprovado ~ grad + prova + reco, phd, family='binomial')
summarv(m)
##
## Call:
## glm(formula = aprovado ~ grad + prova + reco. family = "binomial".
      data = phd)
##
##
## Deviance Residuals:
      Min
               10 Median
                               30
##
                                      Max
## -1.5802 -0.8848 -0.6382 1.1575 2.1732
##
## Coefficients:
                                                        # exponencial dos coeficientes = odds
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
##
                                                        exp(m$coefficients[2:4])
## (Intercept) -6.24971 1.15573 -5.408 6.39e-08 ***
                                                        ##
                                                               grad
## grad
        0.31081 0.13099 2.373
                                        0.0177 *
                                                        ## 1.364524 1.201435 1.750727
## prova
           ## reco
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
##
## (Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
##
      Null deviance: 499.98 on 399 degrees of freedom
##
## Residual deviance: 459.44 on 396
                                  degrees of freedom
## AIC: 467.44
##
## Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

prova

reco

# A regressão logística é um caso específico dos chamados Modelos Lineares *Generalizados*

- Estendem os modelos lineares gerais para dados não-normais
- Utilizam a chamada função link para relacionar os dados originais com uma distribuição normal

Função Link	Distribuições
Identidade	Normal
Inversa	Exponencial, Gamma
Log	Poisson
Logito	Bernoulli, Binomial, Multinomial

#### EXTENDENDO OS MODELOS LINEARES: GENERALIZED LINEAR MODELS

#### EXTENDENDO OS MODELOS LINEARES: GENERALIZED LINEAR MODELS

Dúvida: usar uma função link não é a mesma coisa que transformar a variável?

· Não exatamente. A função link transforma  $\mathit{E}(\mathit{Y})$ , e não  $\mathit{Y}$ 

#### EXTENDENDO OS MODELOS LINEARES: GENERALIZED LINEAR MODELS

- · Não exatamente. A função link transforma E(Y), e não Y
- · Por exemplo: Função Log
  - · Se você transforma a variável, está estimando E(log(Y))

- · Não exatamente. A função link transforma E(Y), e não Y
- · Por exemplo: Função Log
  - · Se você transforma a variável, está estimando E(log(Y))
  - $\cdot$  Um GLM com função link estima log(E(Y))

- · Não exatamente. A função link transforma E(Y), e não Y
- · Por exemplo: Função Log
  - · Se você transforma a variável, está estimando E(log(Y))
  - $\cdot$  Um GLM com função link estima log(E(Y))
- Os parâmetros serão diferentes, e o GLM produz estimativas mais precisas

Método generalizado de mínimos quadrados para o ajuste de modelos

- Generalized Least Squares (GLS) ≠ Generalized Linear Model (GLM)
- Permite estimar parâmetros quando os resíduos são heteroscedásticos
- Permite estimar parâmetros quando os resíduos são correlacionados

Na regressão por mínimos quadrados ordinários (OLS), assumimos que  $e \sim N(0,s^2)$ 

Como poderíamos modificar a descrição de  $\emph{e}$ , para dados onde a variância cresce com os valores de  $\emph{X}$ ?

Na regressão por mínimos quadrados ordinários (OLS), assumimos que  $e \sim N(0,s^2)$ 

Como poderíamos modificar a descrição de e, para dados onde a variância cresce com os valores de X?

 $e \sim N(0, s^2 \times X)$ : modelo fixo de estrutura de variância

Na regressão por mínimos quadrados ordinários (OLS), assumimos que  $e \sim N(0,s^2)$ 

Como poderíamos modificar a descrição de e, para dados onde a variância cresce com os valores de X?

 $e \sim N(0, s^2 \times X)$ : modelo fixo de estrutura de variância

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

 $e \sim N(0, s_j^2)$ : modelo Varldent de estrutura de variânica (X categórico)

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

 $e \sim N(0, s_j^2)$ : modelo Varldent de estrutura de variânica (X categórico)

 $e \sim N(0, s^2 \times |X_j|^{2\delta})$ : modelo VarPower (não funciona se X tem zeros)

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

 $e \sim N(0, s_j^2)$ : modelo Varldent de estrutura de variânica (X categórico)

 $e \sim N(0, s^2 \times |X_j|^{2\delta})$ : modelo VarPower (não funciona se X tem zeros)

 $e \sim \mathit{N}(0, s^2 \times e^{2\delta \times X})$ : modelo VarExp (funciona se X tem zeros)

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

 $e \sim N(0,s_j^2)$ : modelo Varldent de estrutura de variânica (X categórico)

 $e \sim N(0, s^2 \times |X_j|^{2\delta})$ : modelo VarPower (não funciona se X tem zeros)

 $e \sim N(0, s^2 \times e^{2\delta \times X})$ : modelo VarExp (funciona se X tem zeros)

 $e \sim \mathit{N}(0, s^2 \times (\delta_1 \times |X|^{2\delta_2})^2)$ : modelo VarConstPower

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

 $e \sim N(0,s_j^2)$ : modelo Varldent de estrutura de variânica (X categórico)

 $e \sim N(0, s^2 \times |X_j|^{2\delta})$ : modelo VarPower (não funciona se X tem zeros)

 $e \sim \mathit{N}(0, s^2 \times e^{2\delta \times X})$ : modelo VarExp (funciona se X tem zeros)

 $e \sim N(0, s^2 \times (\delta_1 \times |X|^{2\delta_2})^2)$ : modelo VarConstPower

 $e \sim \mathit{N}(0, s_{j}^{2} \times e^{2\delta_{2} \times X})$ : modelo VarComb

Poderiam haver outros tipos de relação entre Var(e) e X?

 $e \sim N(0, s_j^2)$ : modelo Varldent de estrutura de variânica (X categórico)

 $e \sim N(0, s^2 \times |X_j|^{2\delta})$ : modelo VarPower (não funciona se X tem zeros)

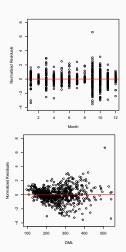
 $e \sim \mathit{N}(0, s^2 \times e^{2\delta \times X})$ : modelo VarExp (funciona se X tem zeros)

 $e \sim N(0, s^2 \times (\delta_1 \times |X|^{2\delta_2})^2)$ : modelo VarConstPower

 $e \sim \mathit{N}(0, s_j^2 \times e^{2\delta_2 \times X})$ : modelo VarComb

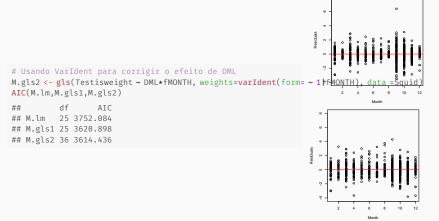
Para saber mais: Zuur et al. (2009). Mixed effects models and extensions in Ecology with R. Springer.

```
# Exemplo de Zuur et al. (2009)m - Lulas <-
library(nlme)
Squid<-read.table(file="Squid.txt",header=TRUE)
Squid$fMONTH=factor(Squid$MONTH)
M1 <- lm(Testisweight ~ DML * fMONTH.data=Squid)
anova(M1)
## Analysis of Variance Table
##
## Response: Testisweight
##
              Df Sum Sq Mean Sq F value
                                             Pr(>F)
## DML
               1 11247.2 11247.2 1732.082 < 2.2e-16 ***
## fMONTH
              11
                  2099.1 190.8 29.388 < 2.2e-16 ***
## DML: fMONTH
              11
                  1678.0
                          152.5
                                  23.492 < 2.2e-16 ***
  Residuals 744
                          6.5
                  4831.1
##
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
```



#### **GLS**

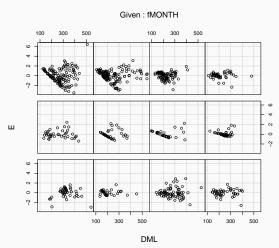




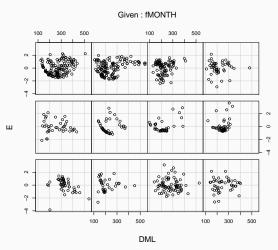
```
# Usando VarPower para corrigir o efeito de DML e MONTH
M.gls3<-gls(Testisweight ~ DML * fMONTH, data = Squid, weights = var-
Power(form=~ DML | fMONTH))
AIC(M.lm, M.gls1, M.gls2, M.gls3)
          df
##
                  AIC
## M.lm 25 3752.084
## M.gls1 25 3620.898
## M.gls2 36 3614.436
## M.gls3 37 3407.511
```

DML

# Resíduos no modelo estimado por OLS



# GLS com varPower(form= DML | fMONTH)



Como poderíamos modificar a descrição de e, para dados onde os valores são correlacionados?

Como poderíamos modificar a descrição de e, para dados onde os valores são correlacionados?

 $e \sim N(0, \rho \times s^2)$ : modelo de correlação simétrico

 $\rho$  é a correlação entre  $X_i$  e  $X_{j \neq i}$ 

Como poderíamos modificar a descrição de e, para dados onde os valores são correlacionados?

 $e \sim N(0, \rho \times s^2)$ : modelo de correlação simétrico

ho é a correlação entre  $X_i$  e  $X_{j 
eq i}$ 

 $e \sim \mathit{N}(0, \rho \times s^2)$ : modelo de correlação autoregressivo (AR) de ordem 1

$$cor(X_i, X_{i-1}) = \rho$$
;  $cor(X_i, X_{i-2}) = \rho^2$ ;  $cor(X_i, X_{i-n}) = \rho^n$ 

Como poderíamos modificar a descrição de e, para dados onde os valores são correlacionados?

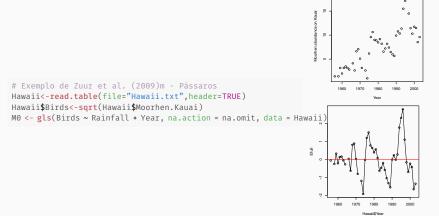
$$e \sim N(0, \rho \times s^2)$$
: modelo de correlação simétrico

ho é a correlação entre  $X_i$  e  $X_{j 
eq i}$ 

 $e \sim N(0, \rho \times s^2)$ : modelo de correlação autoregressivo (AR) de ordem 1

$$cor(X_i, X_{i-1}) = \rho$$
;  $cor(X_i, X_{i-2}) = \rho^2$ ;  $cor(X_i, X_{i-n}) = \rho^n$ 

Existem modelos (bem) mais complexos.





```
90
# Exemplo de Zuur et al. (2009) - Pássaros
                                                                 Å.
M1<-gls(Birds ~ Rainfall + Year, na.action = na.omit,
        correlation = corCompSymm(form =~ Year),
        data=Hawaii)
M2<-gls(Birds ~ Rainfall + Year, na.action = na.omit,
                                                                              Lag
      correlation = corAR1(form =~ Year), data = Hawaii)
AIC(M0,M1,M2)
##
      df
              ATC
      4 228.4798
                                                                ACF
                                                                  2
## M1 5 230.4798
## M2 5 199.1394
```

#### **VOU FICAR DEVENDO ...**

Regressão Robusta

Regressão por Quantil

Regressão Não-Linear

Modelos Aditivos Generalizados (Generalized Additive Models, GAM)

Splines

Mixed Models

#### LEITURAS RECOMENDADAS:

Bolker BM, Brooks ME, Clark CJ, Geange SW, Poulsen JR, Stevens MHH, White J-SS (2009) Generalized linear mixed models: a practical guide for ecology and evolution. Trends in ecology evolution, 24, 127–35.

Yee TW, Mitchell ND (1991) Generalized additive models in plant ecology. Journal of Vegetation Science, 2, 587–602.

Zuur A, Ieno E, Walker N, Saveliev A, Smith G (2009) Mixed Effects Models and Extensions in Ecology with R. Springer.

Pinheiro J, Bates D (2000) Mixed-Effects Models in S and S-PLUS. Springer.