CC-226 Aula 03 - Análise de Regressão

Carlos Henrique Q. Forster - Instituto Tecnológico de Aeronáutica 2008

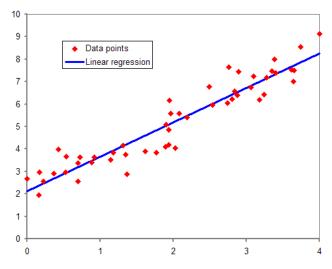
1 Regressão Linear Simples

1.1 Descrição do problema de regressão linear simples

Relação entre duas variáveis x e y.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$

onde β_1 é o coeficiente angular e β_0 é o termo constante.



Modelo de regressão linear simples:

Desejamos estimar os parâmetros β_0 , β_1 e σ^2 .

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$$

onde ε é uma variável aleatória com média $E(\varepsilon) = 0$.

A variância $Var(\varepsilon)$ é dada por σ^2 .

 ε : desvio aleatório ou erro aleatório.

Dado um valor para x o valor esperado de Y é:

$$E(Y) = E(\beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon) = \beta_0 + \beta_1 x + E(\varepsilon) = \beta_0 + \beta_1 x$$
$$Var(Y) = Var(\beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon) = Var(\varepsilon) = \sigma^2$$

1.2 Estimação dos parâmetros de Regressão

n pares observados $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i : \varepsilon_i$$
 são independentes

2

Princípio dos mínimos quadrados Função a minimizar

$$f(b_0, b_1) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (b_0 + b_1 x_i)]^2$$

A solução da minimização é representada utilizando a notação:

$$(\hat{b}_0, \hat{b}_1) = arg \max_{(b_0, b_1)} f(b_0, b_1)$$

Para minimizar, igualamos o gradiente de f com zero.

$$\nabla f = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial f}{\partial b_0} = \sum 2(y_i - b_0 - b_1 x_i)(-1) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial b_1} = \sum 2(y_i - b_0 - b_1 x_i)(-x_i) = 0$$

É obtido o sistema de equações normais:

$$\begin{cases} nb_0 + (\sum x_i) b_1 = \sum y_i \\ (\sum x_i) b_0 + (\sum x_i^2) b_1 \end{cases}$$

A estimativa obtida é resultado desse sistema. O coeficiente angular (slope) estimado é

$$b_1 = \hat{\beta}_1 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$$

O termo constante (y-intercept) estimado é

$$b_0 = \hat{\beta}_0 = \frac{\sum y_i - \hat{\beta}_1 \sum x_i}{n} = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

1.3 Avaliação da regressão

Estimação de σ^2

Resíduos $y_i - \hat{y}_i$ onde $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$.

Soma dos quadrados dos erros (error sum of squares):

$$ESS = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum [y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i)]^2$$

$$= \sum y_i^2 - \hat{\beta}_0 \sum y_i - \hat{\beta}_1 \sum x_i y_i$$

A estimativa de σ^2 é

$$\hat{\sigma}^2 = s^2 = \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 2}$$

Notar a perda de dois graus de liberdade por $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ já estarem definidos. Soma dos quadrados totais (total sum of squares):

$$TSS = S_{yy} = \sum (y_i - \bar{y})^2$$

Coeficiente de determinação (coeficiente de regressão de Pearson)

$$r^2 = 1 - \frac{ESS}{TSS}$$

 r^2 modela a proporção da variância que pode ser explicada pelo modelo de regressão linear simples. Quanto maior r^2 , melhor adaptado ao modelo linear de regressão.

Inferência sobre β_1

Supondo distribuição normal, $\hat{\beta}_1$ é dada por uma combinação linear das variáveis y_i normalmente distribuídas (e, portanto, é uma variável aleatória normalmente distribuída).

$$E(\hat{\beta}_1) = \beta_1$$

$$Var(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$$

Correlação

Coeficiente de correlação amostral

$$r = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}}\sqrt{S_{yy}}}$$

onde

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{\sum x_i \sum y_i}{n}$$

Propriedades de \boldsymbol{r}

- não depende de qual variável é x e qual é y;
- independe das unidades de medida;
- $-1 \le r \le 1$;
- r = 1 indica linha reta com coeficiente angular positivo;

- r = -1 indica linha reta com coeficiente angular negativo;
- r^2 é o coeficiente de determinação.

Regra prática

 $0 \le |r| \le 0,5$ indica correlação fraca.

 $0, 8 \le |r| \le 1$ indica correlação forte.

 $r^2=0,25$ indica que apenas 25% da variação de y observada seria explicada pelo modelo de regressão linear.

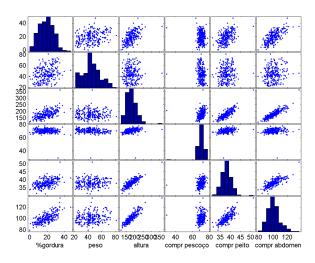
Coeficiente de correlação

$$\rho = \rho(X, Y) = \frac{Cov(X, Y)}{\sigma_x \sigma_y}$$

$$\hat{\rho} = R = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{(y_i - \bar{y})^2}}$$

2 Regressão Linear Múltipla

Exemplo do conjunto de dados "bodyfat" da statlib.



2.1 O modelo de regressão linear múltipla

Modelo

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_m X_m + \varepsilon$$

Onde

$$E(\varepsilon) = 0$$

e

$$Var(\varepsilon) = \sigma^2$$

m é o número de parâmetros e n é o número de padrões de entrada.

Considerando n entradas da forma $(y_i, x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{mi})$

Vamos considerar uma variável adicional X_0 que resulta sempre em 1 e adicioná-la como campo nos padrões de entrada.

A função a minimizar pelo princípio dos mínimos quadrados é:

$$f = \sum_{i} (y_i - \beta_0 x_{0i} - \beta_1 x_{1i} \dots - \beta_m x_{mi})^2$$

Igualando suas derivadas parciais a zero:

$$\frac{f}{\beta_0} = -2\sum_i x_{0i}(y_i - \beta_0 x_{0i} - \beta_1 x_{1i} \dots - \beta_m x_{mi}) = 0$$

$$\frac{f}{\beta_1} = -2\sum_{i} x_{1i}(y_i - \beta_0 x_{0i} - \beta_1 x_{1i} \dots - \beta_m x_{mi}) = 0$$

. . .

Obtemos o sistema de equações normais.

O sistema de equações normais é da forma:

Se substituímos a variável x_0 por 1

2.2 Solução

Vamos escrever o problema de forma vetorial. O vetor ${\bf x}$ é aumentado com um campo de valor 1.

$$\mathbf{x}_i = (1, x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, \dots, x_{mi})$$

O vetor β a ser determinado.

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix}$$

Cada estimativa de saída \hat{y}_i é obtida com

$$\hat{y}_i = \sum_i \beta_j x_{ji} = \mathbf{x}_i \beta$$

Colocamos na forma matricial para todas entradas de i = 1, ..., n:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{31} & \dots & x_{m1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{ji} & \dots & x_{m2} \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

O vetor-coluna y contém todas variáveis de saída da amostra:

$$Y = \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

O sistema a ser resolvido (sub ou super determinado) é

$$X_{(n\times m+1)}\beta_{(m+1\times 1)} = Y_{(n\times 1)}$$

O sistema de equações normais é

$$X^T X \beta = X^T Y$$

Assim, obtemos β :

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

A matriz $X^+ = (X^TX)^{-1}X^T$ é a matriz pseudo-inversa de Moore-Penrose de X. Assim, a estimativa \hat{y} para as entradas x_j se escreve como:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_m x_m$$

Avaliação da regressão múltipla

A variância estimada para a estimativa \hat{y} é

$$\hat{\sigma}_{\beta}^2 = \frac{SQE}{n - (m+1)}$$

Notar que houve perda de m+1 graus de liberdade

O coeficiente de determinação \mathbb{R}^2 deve ser ajustado para a regressão múltipla:

$$R_{ajustado}^{2} = \frac{(n-1)R^{2} - m}{n - (m+1)}$$

Exemplo

Considere duas variáveis x e z das quais queremos inferir y indiretamente. A partir de um conjunto de n padrões (x_i, z_i, y_i) estimamos os parâmetros da regressão.

O modelo do erro é

$$y_i = \beta_0 + x_i \beta_1 + z_i \beta_2 + \varepsilon_i$$

A função a minimizar (princípio dos mínimos quadrados):

$$f = \sum_{i} (y_i - \beta_0 - x_i \beta_1 - z_i \beta_2)^2$$

Igualando as derivadas parciais a zero:

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_0} = -2\sum_i (y_i - \beta_0 - x_i\beta_1 - z_i\beta_2) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_1} = -2\sum_i x_i(y_i - \beta_0 - x_i\beta_1 - z_i\beta_2) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_1} = -2\sum_i z_i(y_i - \beta_0 - x_i\beta_1 - z_i\beta_2) = 0$$

Na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & \dots \\ x_1 & \dots \\ z_1 & \dots \end{bmatrix}_{3 \times n} \begin{bmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_{n \times 3} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}_{3 \times 1} = \begin{bmatrix} 1 & \dots \\ x_1 & \dots \\ z_1 & \dots \end{bmatrix}_{3 \times n} \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1}$$

Multiplicando as matrizes:

$$\begin{bmatrix} 1 & \sum x_i & \sum z_i \\ \sum x_i & \sum (x_i)^2 & \sum x_i z_i \\ \sum z_i & \sum x_i z_i & \sum (z_i)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i z_i \end{bmatrix}$$

A matrix X^TX é simétrica e não-negativa definida, o que permite a decomposição de Cholesky ou a decomposição de auto-valores ou valores singulares (SVD). A pseudo-inversa do MATLAB utiliza a SVD.

Lembrando a decomposição de Cholesky:

$$LL^{T} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{12} & l_{22} & 0 \\ l_{13} & l_{23} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ 0 & l_{22} & l_{23} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11}^{2} & l_{11} l_{12} & l_{11} l_{13} \\ l_{11} l_{12} & l_{12}^{2} + l_{22}^{2} & l_{12} l_{13} + l_{22} l_{23} \\ l_{11} l_{13} & l_{12} l_{13} + l_{22} l_{23} & l_{13}^{2} + l_{23}^{2} + l_{33}^{2} \end{bmatrix}$$

Basta então igualar cada elemento dessa matriz com a matriz a se decompor e determinar um a um os coeficientes l_{ij} . Como a matriz L é triangular, é muito fácil resolver o sistema linear por substituição.

Na prática:

Construo a matriz X:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ & \vdots & \\ 1 & x_n & z_n \end{pmatrix}$$

Construo a matriz X^TX . Construo o vetor-coluna X^TY Decomponho X^TX em LL^T pela decomposição de Cholesky. Resolvo $LL^T\beta=X^TY$ por substituição e retro-substituição. Obtenho os parâmetros do vetor-coluna β .

Outra opção, no MATLAB uso beta=pinv(X) *Y.

2.3 Regressão múltipla para explorar relações entre variáveis

O modelo é utilizado mesmo para variáveis x_i dependentes permitindo previsores quadráticos e análise de interações de variáveis.

Exemplos de modelos:

Modelo de segunda ordem sem interação:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \varepsilon$$

Modelo de primeira ordem com interação:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \varepsilon$$

Modelo de segunda ordem completo:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 + \varepsilon$$

2.4 Complexidade

A solução do sistema linear de m variáveis e m equações é $O(m^3)$.

Se tenho m variáveis e busco as interações duas a duas, então terei $O(m^2)$ variáveis e, portanto, a solução do sistema será $O(m^6)$.

3 Regressão Polinomial

Exemplo (Bishop): dados obtidos de

$$h(x) = \sin(2\pi x) + \varepsilon$$

Vamos supor n = 10 observações (x_i, t_i) .

Chamamos o grau do polinômio de m. A forma do polinômio é

$$y(x, \mathbf{w}) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \ldots + \beta_m x^m = \sum_{i=0}^{M} \beta_j x^j$$

Determinar os valores dos coeficientes (polynomial fitting).

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_M \end{pmatrix}$$

Função de erro a minimizar

$$f(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} [y(x_n, \beta) - t_n]^2$$

Encontrar β^* para o qual f é mínimo. Igualar o gradiente de f a zero.

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_0} = 0, \frac{\partial f}{\partial \beta_1} = 0, \dots, \frac{\partial f}{\partial \beta_m} = 0$$

É obtido o sistema de equações normais (como fizemos anteriormente).

$$\beta_{0}n + \beta_{1}\sum x_{i} + \beta_{2}\sum x_{i}^{2} + \dots + \beta_{m}\sum x_{i}^{m} = \sum y_{i}
\beta_{0}\sum x_{i} + \beta_{1}\sum x_{i}^{2} + \beta_{2}\sum x_{i}^{3} + \dots + \beta_{m}\sum x_{i}^{m+1} = \sum x_{i}y_{i}
\vdots
\beta_{0}\sum x_{i}^{m} + \beta_{1}\sum x_{i}^{m+1} + \dots + \beta_{m}\sum x_{i}^{2m} = \sum x_{i}^{m}y_{i}$$

É o mesmo que a regressão linear múltipla onde cada variável $x_j = x^j$. Avaliação da regressão polinomial

$$ESS = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$TSS = \sum (y_i - \bar{y})^2$$

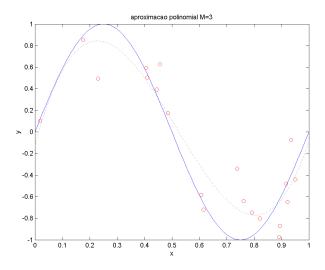
$$\hat{\sigma}^2 = s^2 = \frac{ESS}{n - (m+1)}$$

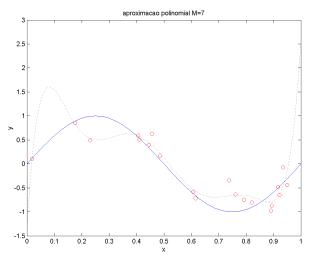
$$R^2 = 1 - \frac{ESS}{TSS}$$

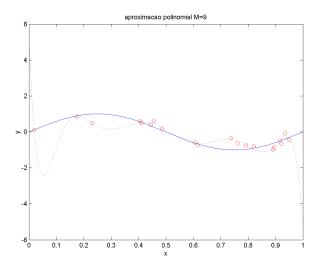
$$R_{ajustado}^2 = 1 - \frac{n-1}{n - (m+1)} \frac{ESS}{TSS}$$

Escolha do grau do polinômio

Como escolher o valor para m Exemplo: no nosso exemplo, m=0 e m=1 são ruins. m=3 é bom. m=9 modela o ruído (overfitting).







Manter M, mas aumentar N melhora o problema de overfitting.

Treinar com um conjunto de 10, mas testar com um conjunto de 100: é boa a generalização?

Critério para teste: erro root-mean-square.

$$E_{RMS} = \sqrt{\frac{2f(\beta^*)}{N}}$$

3.1 Validação cruzada.

Validação cruzada S-fold:

- 1. Particionar o conjunto de amostras em S conjuntos.
- 2. Repito para cada um dos conjuntos:
 - (a) treinar com os demais S-1 conjuntos.
 - (b) testar com o conjunto selecionado (Erro RMS).

4 Aproximação regularizada

Manter o número de parâmetros M, independente do número de amostras N. Termo penalizando a função de erro para manter coeficientes pequenos.

$$\tilde{f}(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} [y(x_n, \beta) - t_n]^2 + \frac{\lambda}{2} ||\beta||^2$$

onde
$$\|\beta\|^2 = \beta^T \beta = {\beta_0}^2 + \ldots + {\beta_M}^2$$
.

onde λ pesa a importância da regularidade da curva em relação ao erro contra os valores amostrais.

Termos em Estatística: "shrinkage" e "ridge regression".

A solução ainda pode ser obtida na forma fechada. Na forma matricial, a regularização que vimos é

$$(X^TX + \lambda I)\beta = X^TY$$

A solução é então:

$$\beta = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y$$

Uma forma mais geral de regularização utiliza a matriz de Tikhonov Γ :

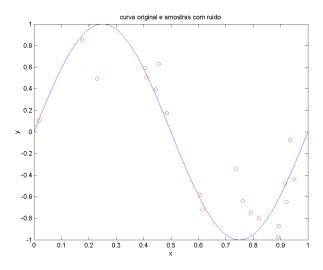
$$\beta = (X^T X + \lambda \Gamma^T \Gamma)^{-1} X^T Y$$

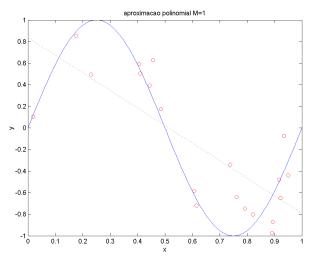
Para sintonizar automaticamente M e λ , em geral, é desperdício utilizar dados adicionais. Mesmo assim, esses parâmetros podem ser sintonizados utilizando validação cruzada. Entretanto, há necessidade de um conjunto adicional para validação do resultado.

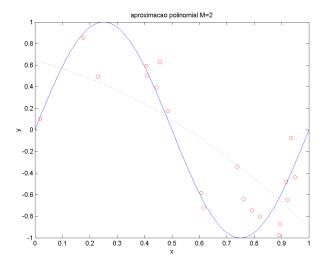
4.1 Código MATLAB

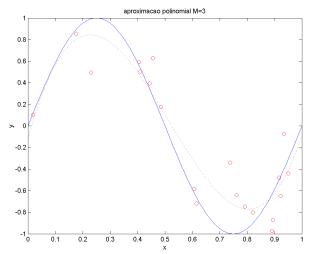
```
%% obter conjunto para treinamento
tam_trein=20 % numero de valores para treinamento
rand('state',0); randn('state',0);
x=rand(tam_trein,1); % 10 valores de x entre 0 e 1
h=sin(2*pi*x)+0.3*randn(tam_trein,1);
%% obter conjunto para testes
xt=0:0.01:1;
ht=sin(2*pi*xt);
%% plotar o original e as amostras
figure;
plot(xt,ht,'b-',x,h,'ro');
xlabel('x');
ylabel('y');
title ('curva original e amostras com ruido');
%% obter aproximacoes polinomiais
for M=[1, 2, 3, 5, 7, 9];
x_mat=[];
for grau=0:M
        x_mat=[x_mat, x.^grau];
end
x mat;
beta=pinv(x_mat)*h
%%plotar a aproximacao
```

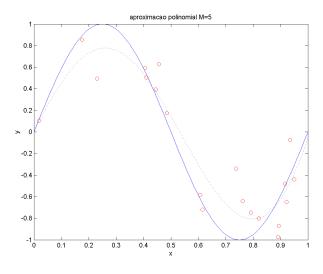
```
poly=flipud(beta);
p=polyval(poly,xt);
figure;
plot(xt,ht,'b-',x,h,'ro',xt,p,'g:');
xlabel('x');
ylabel('y');
title(['aproximacao polinomial M=',num2str(M)]);
end
%% obter aproximacao regularizada
M=9;
lambda=0.001;
x_mat=[];
for grau=0:M
    x_mat=[x_mat,x.^grau];
end
xtx=x_mat'*x_mat;
beta=inv(xtx+lambda*eye(size(xtx)))*(x_mat'*h);
%%plotar aproximacao
poly=flipud(beta);
p=polyval(poly,xt);
figure;
plot(xt,ht,'b-',x,h,'ro',xt,p,'g:');
xlabel('x');
ylabel('y');
title(['aproximacao regularizada M=',num2str(M),' lambda=',num2str(lambda)]);
```

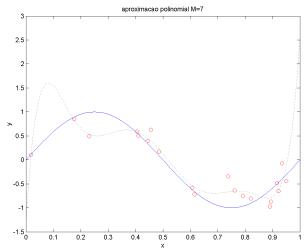


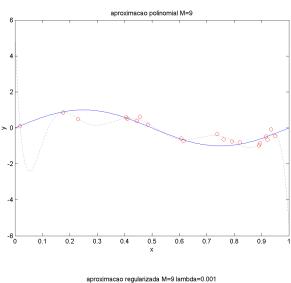


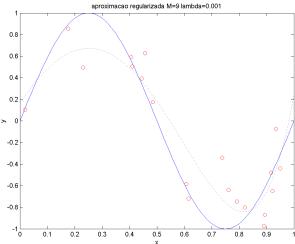












5 Regressão não-linear com bases funcionais

5.1 Radial Basis Function

A regressão linear utilizando bases de funções radiais tem forma:

$$\hat{y} = \beta_1 \phi_1(x) + \beta_2 \phi_2(x) + \beta_3 \phi_3(x)$$

A dimensão de x pode ser maior que 1.

As funções ϕ_j tem a forma:

$$\phi_j = KF(|x - c_j|/KW)$$

KF é uma função de Kernel (por exemplo, uma Gaussiana) e KW é a largura do Kernel. c_i são coordenadas de centro para cada função.

Na prática, c_j e KW ou KW_j são mantidos constantes e só se estimam os valores de β .

Define-se uma matriz Z baseada na computação das funções ϕ_j .

$$Z: z_{ji} = KF(|x_i - c_j|/KW)$$

A solução para os betas é:

$$\beta = (Z^T Z)^{-1} (Z^T Y)$$

5.2 RBF com ajuste não-linear

Utilizar método da descida na direção do Gradiente para ajustar β_j, c_j e KW_j .

6 Heteroscedasticidade

É como se chama quando a variância do ruído não é constante para x. Se temos entradas na forma (x_i, y_i, σ_i^2) , então, o problema de minimização é

$$arg\min_{\beta} \sum \frac{(y_i - \beta x_i)^2}{\sigma_i^2}$$

Trata-se portanto de uma regressão com pesos $\frac{1}{\sigma^2}$.