REGRESSÃO NÃO PARAMÉTRICA

TX 753- Métodos probabilísticos em Engenharia Ambiental

Cybelli Barbosa

Thiago Brandão

REGRESSÃO PARAMÉTRICA

- Relação funcional entre as variáveis explicativa e resposta é supostamente conhecida,
- Podem existir parâmetros com valores desconhecidos, mas estes podem ser estimados,
- Parâmetros livres geralmente possuem interpretação física,
- Objetivo principal é estimar o valor dos parâmetros,
- Os modelos que não são puramente paramétricos são denominados não-paramétricos ou semi-paramétricos.

REGRESSÃO PARAMÉTRICA

Exemplo geral: $y_i = f(\beta, x_i) + \varepsilon_i$

- onde $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de parâmetros a ser estimado,
- $\boldsymbol{x}$ é o vetor de predição,
- o erro, ε, é assumido normal e independentemente distribuído, com média zero e variância desconhecida.

REGRESSÃO NÃO PARAMÉTRICA

- Não há conhecimento *a priori* a respeito da forma da função, e esta pode adquirir um conjunto amplo de formas,

- Objetivo principal não é estimar o valor dos parâmetros, mas reduzir as possibilidades para a forma da função,

- A maioria dos métodos de regressão não paramétrica assume que $\boldsymbol{f}$ é uma função suave e contínua,

- Estimadores podem não possuir interpretação física.

REGRESSÃO NÃO PARAMÉTRICA

Exemplo geral: $y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$

- A função ***f*** é menos especificada, pela falta de dados *a priori*,
- A aproximação não paramétrica é mais flexível pois determina ***f*** a partir de uma família de funções.
- Um caso especial importante do modelo geral é regressão não paramétrica simples, onde existe apenas um preditor: x_i,
- Dificuldade: ajustar e exibir o modelo de regressão não paramétrica geral quando existem muitos preditores.

FOX

EXEMPLO: FARAWAY

Utilização de três conjuntos de dados:

- Exemplo A (simulado): $f(x)=\sin^3(2\pi x^3)$
- Exemplo B (simulado): $f(x)=0$
- Dados reais Old Faithful:

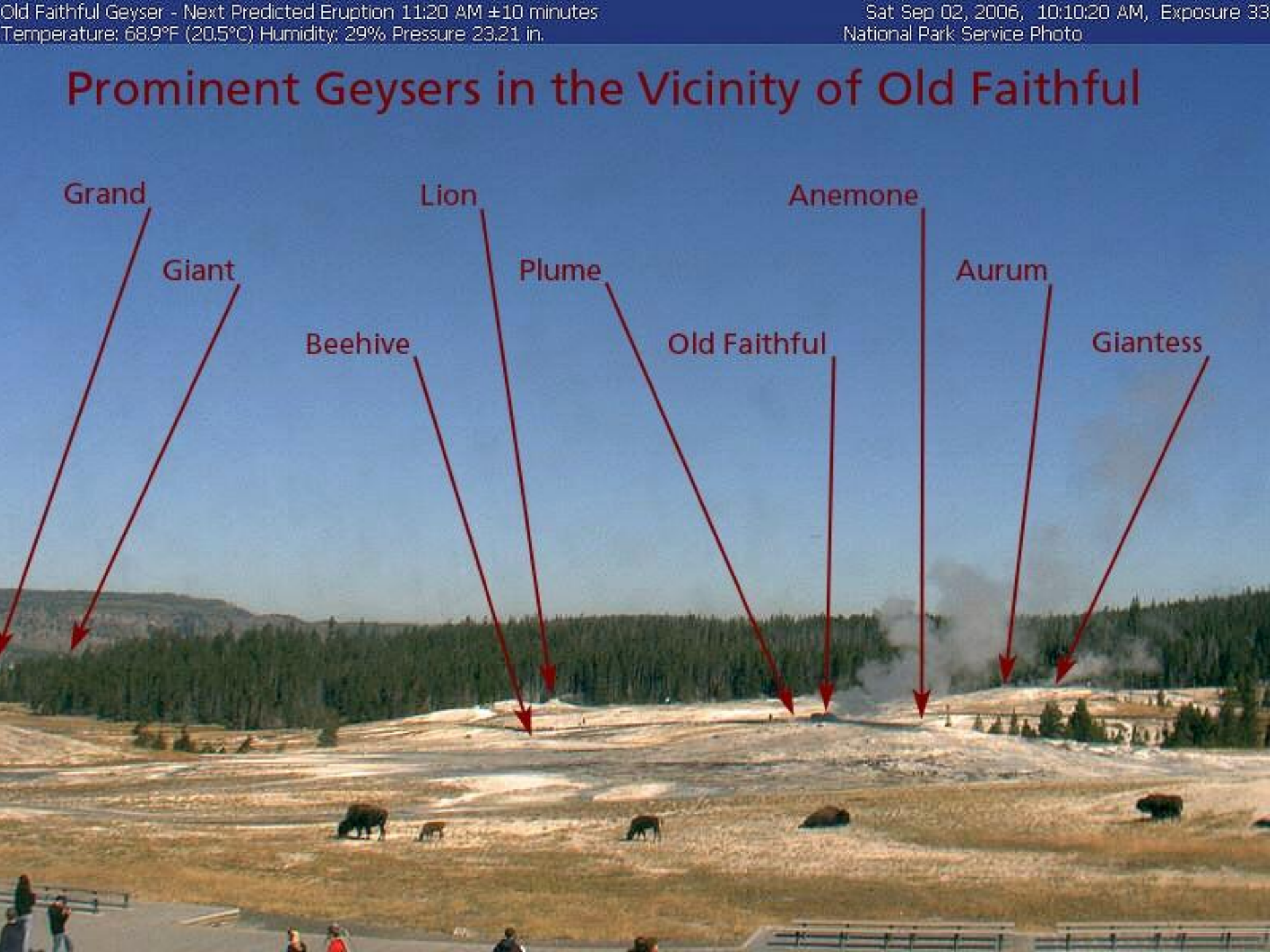
  tempo de espera entre as erupções e a duração da erupção do gêiser Old Faithful em Yellowstone National Park, Wyoming, EUA.

FARAWAY

Old Faithful Geyser - Next Predicted Eruption 11:20 AM ±10 minutes
Temperature: 68.9°F (20.5°C) Humidity: 29% Pressure 23.21 in.

Sat Sep 02, 2006, 10:10:20 AM, Exposure 33
National Park Service Photo

Prominent Geysers in the Vicinity of Old Faithful

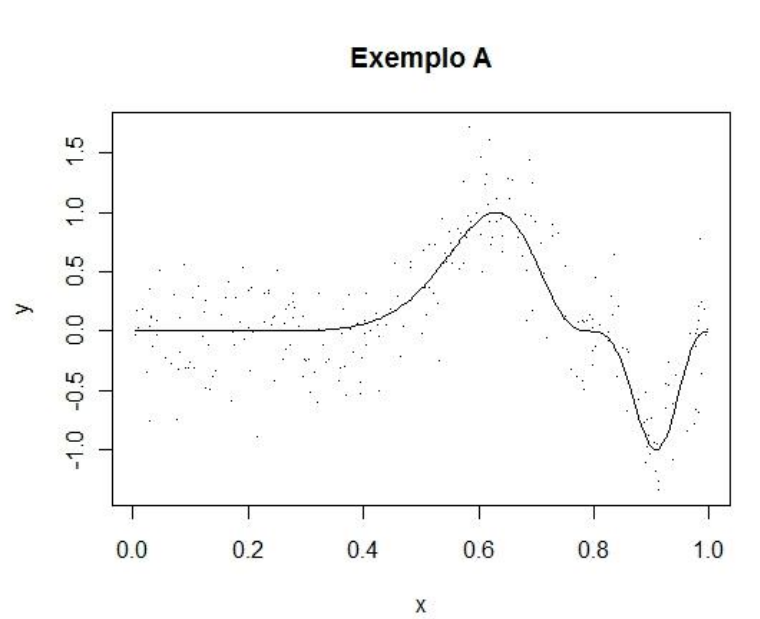


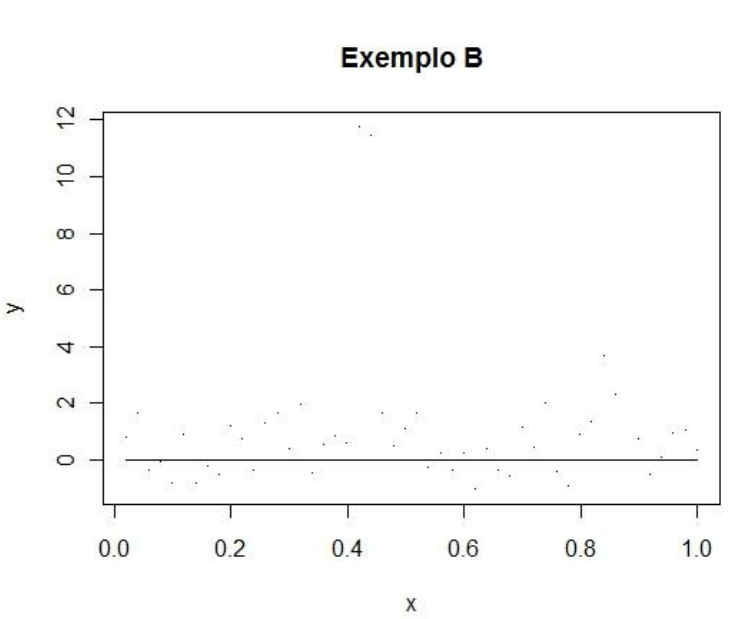
Método do Núcleo
(*Kernel*)

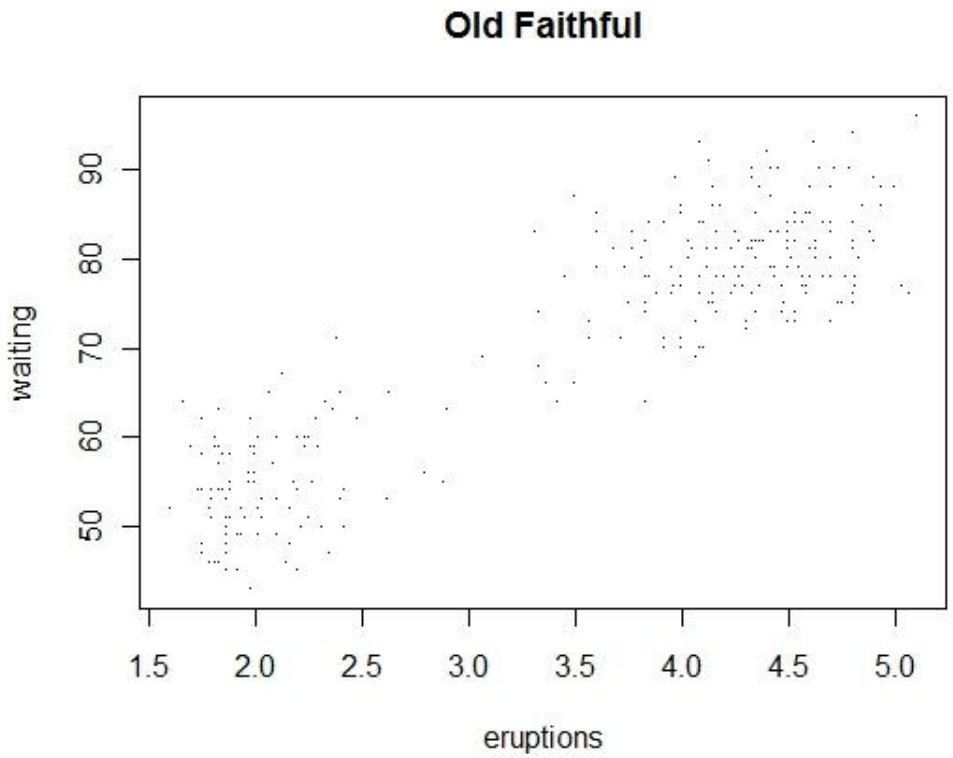
```
>require (faraway)
# dados do exemplo A (simulado): f(x)=sin³(2*pi*x³)
>data(exa)
>plot (y ~ x, exa, main="Exemplo A", pch=".")
>lines (m ~ x, exa)

# dados do exemplo B (simulado): f(x)=0
>data(exb)
>plot (y ~ x, exb, main="Exemplo B", pch=".")
>lines (m ~ x, exb)

# Dados reais Old Faithful:
# eruptions: duração da erupção em minutos.
# waiting: tempo de espera até a próxima erupção, em minutos.
>data(faithful)
>plot (waiting ~ eruptions, faithful, main="Old Faithful", pch=".")
```


Exemplo A
y
x
1.5
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


Exemplo B
y
x
12
10
8
6
4
2
0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


Old Faithful
waiting
eruptions
90
80
70
60
50
1.5
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0
4.5
5.0

ESTIMADORES *KERNEL* $\int K=1$

(janela móvel)

- Geral:

$$\hat{f}_\lambda(x) = \frac{1}{n\lambda}\sum_{j=1}^{n} K\left(\frac{x-x_j}{\lambda}\right) Y_j = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} w_j Y_j \qquad w_j = K\left(\frac{x-x_j}{\lambda}\right)/\lambda$$

λ: largura da banda ou parâmetro de alisamento, controla a suavidade da curva ajustada.

- A melhor escolha de λ fornece:

MSE: *mean squared error*

$$\mathrm{MSE}(x) = E(f(x) - \hat{f}_\lambda(x))^2 = O(n^{-4/5})$$

- Nadaraya-Watson:

utilizado quando o espaçamento da variável explicativa é bastante desigual (intervalos heterogêneos em x).

$$f_\lambda(x) = \frac{\sum_{j=1}^{n} w_j Y_j}{\sum_{j=1}^{n} w_j}$$

- Epanechnikov Kernel:

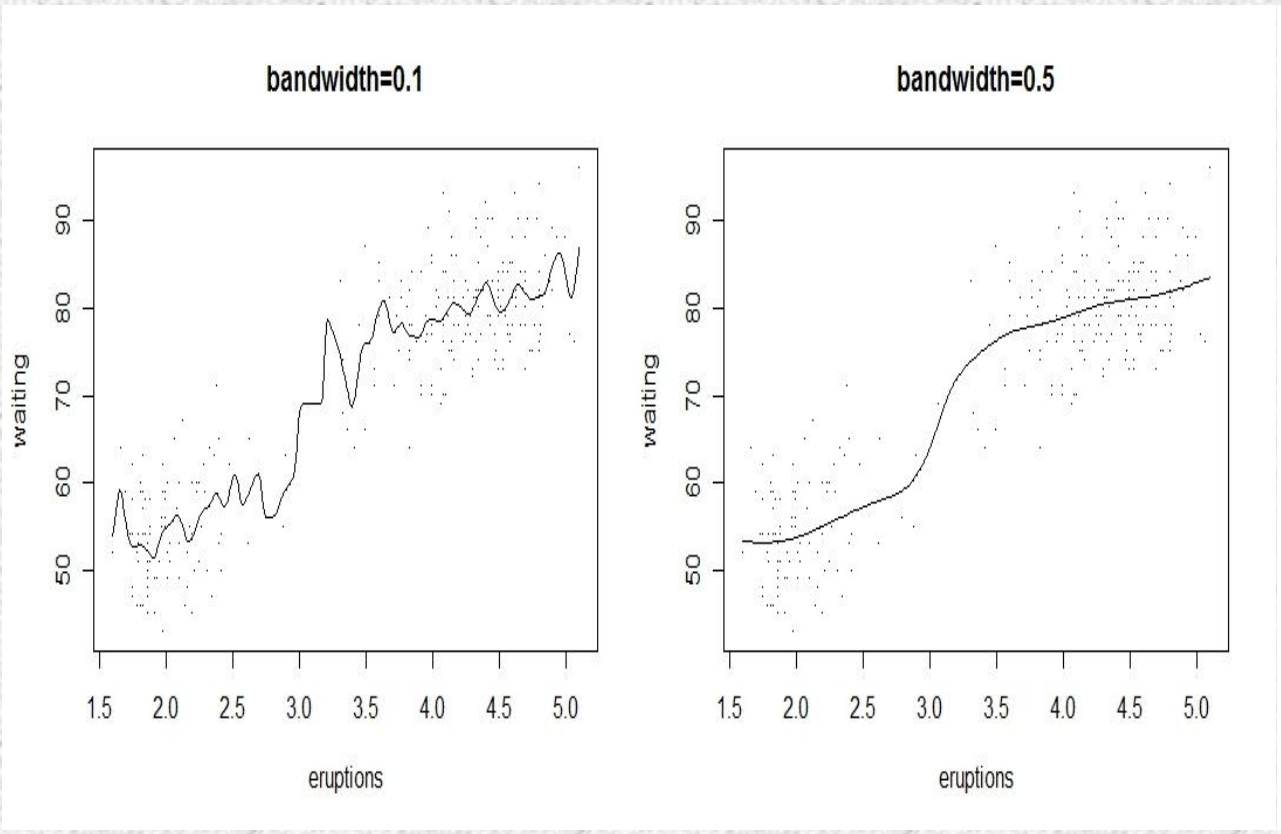
$$K(x) = \begin{cases} \frac{3}{4}(1-x^2) & |x| < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Exemplo do estimador *Kernel* Nadaraya-Watson com 3 diferentes larguras de banda λ:

```
# Estimador Kernel:
# lambda = 0.1:
plot(waiting ~ eruptions, faithful, main="bandwidth=0.1", pch=".")
lines(ksmooth(faithful$eruptions, faithful$waiting, "normal", 0.1))

# lambda = 0.5:
plot(waiting ~ eruptions, faithful, main="bandwidth=0.5", pch=".")
lines(ksmooth(faithful$eruptions, faithful$waiting, "normal", 0.5))

# lambda = 2:
plot(waiting ~ eruptions, faithful, main="bandwidth=2", pch=".")
lines(ksmooth(faithful$eruptions, faithful$waiting, "normal", 2))
```



A figura central (bandwidth=0.5) é a melhor escolha entre as três opções.

- λ pode ser escolhido iterativamente utilizando este método subjetivo,
- Métodos automáticos de seleção da "quantidade de suavização" também são utilizados,
- Método de validação cruzada (CV) é amplamente utilizado, porém tem um alto custo computacional,

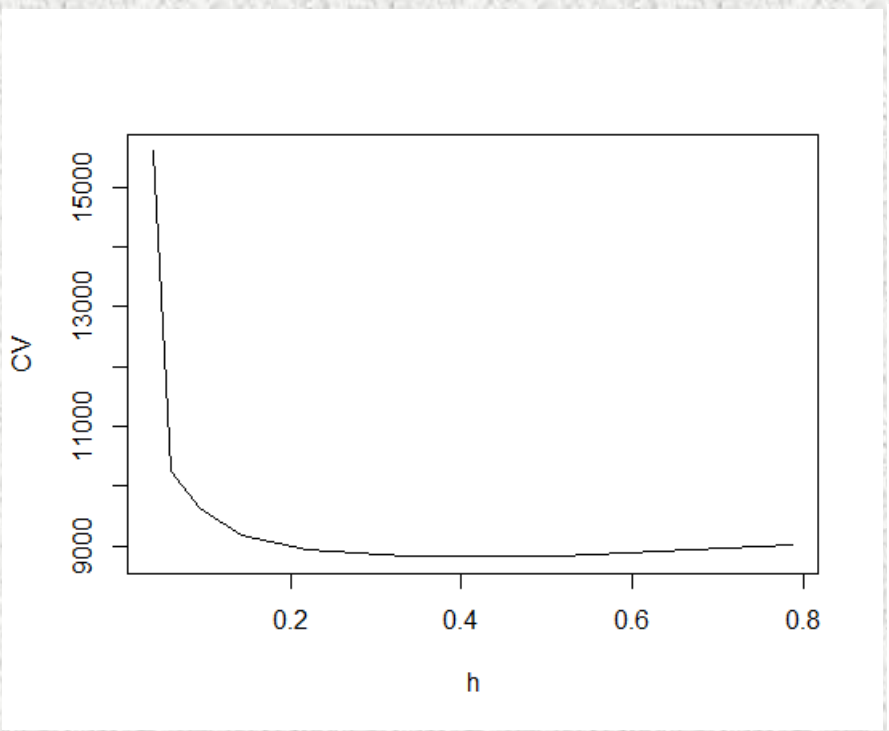
$$CV(\lambda) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(y_j - \hat{f}_{\lambda(j)}(x_j))^2$$

- Validação cruzada generalizada (GCV) é uma aproximação de CV,
- Utilização de métodos automáticos com cautela.

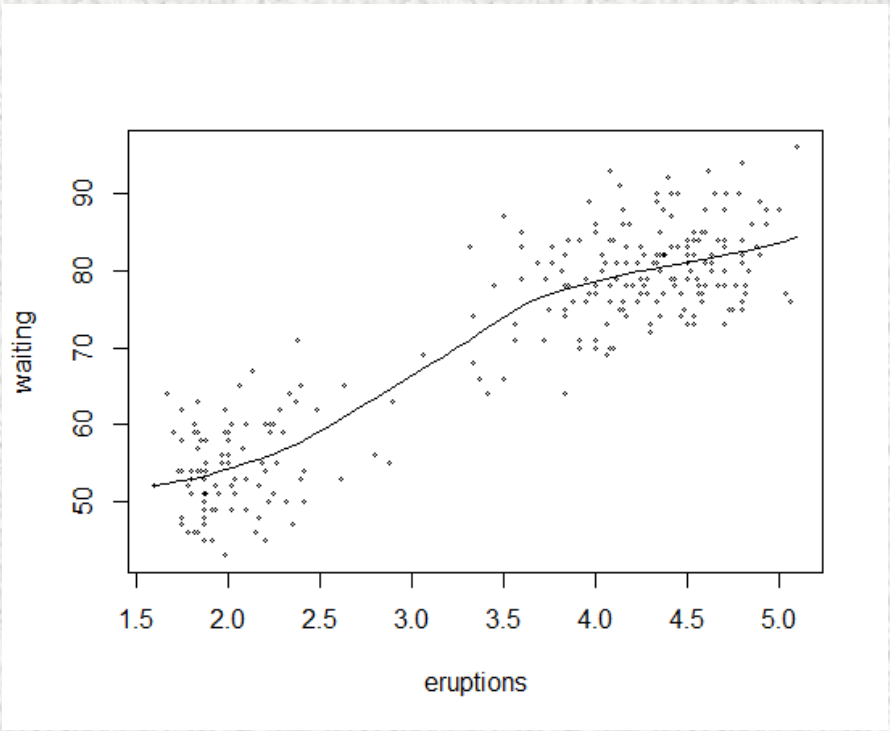
Validação cruzada:

Old Faithful

```
>library (sm)    # utiliza o Kernel Gaussiano onde a suavização é o desvio padrão do Kernel
>hm <- hcv(faithful$eruptions, faithful$waiting, display="lines")
>sm.regression(faithful$eruptions, faithful$waiting, h=hm, xlab="eruptions", ylab="waiting")
```



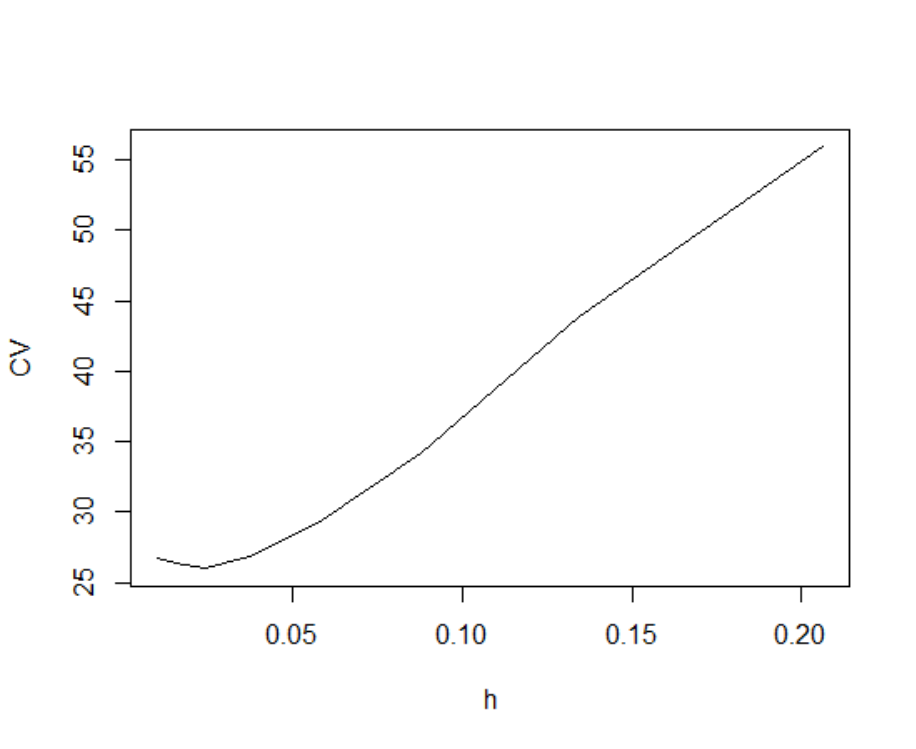
Critério de validação cruzada como uma função da suavidade, o mínimo ocorre em 0.424.

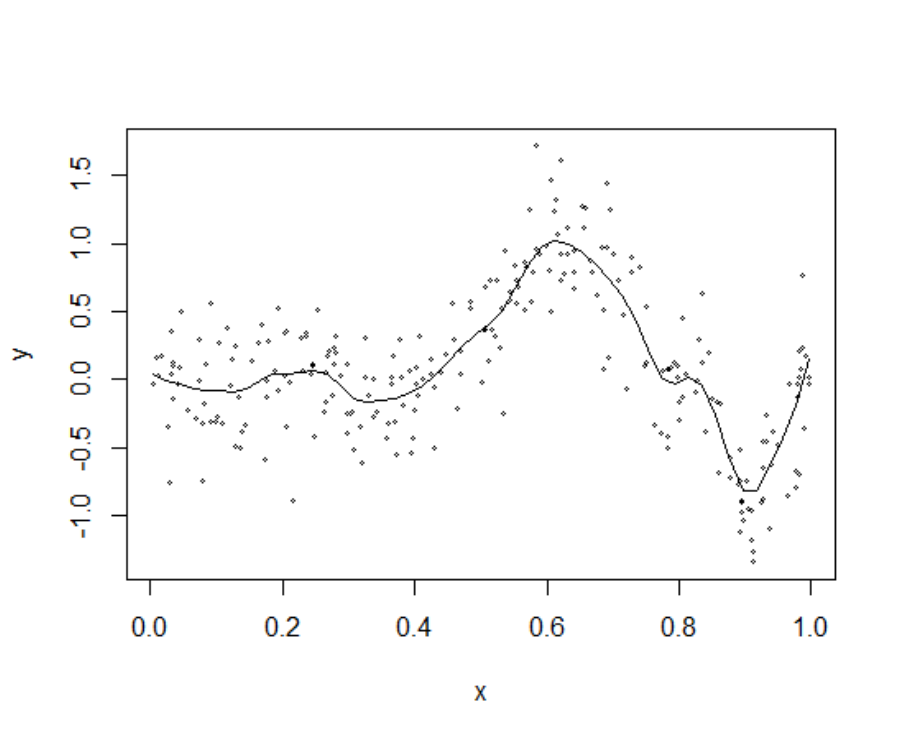


Estimador kernel com o valor estimado de suavização.

 # Ex A

```
>hm <- hcv(exa$x, exa$y, display="lines")
>sm.regression(exa$x, exa$y, h=hm, xlab="x", ylab="y")
```

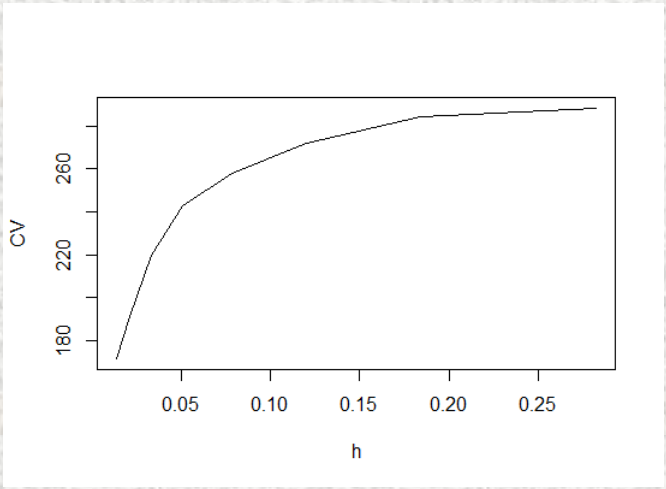




Validação cruzada para exemplo A, mínimo ocorre em h=0.022.

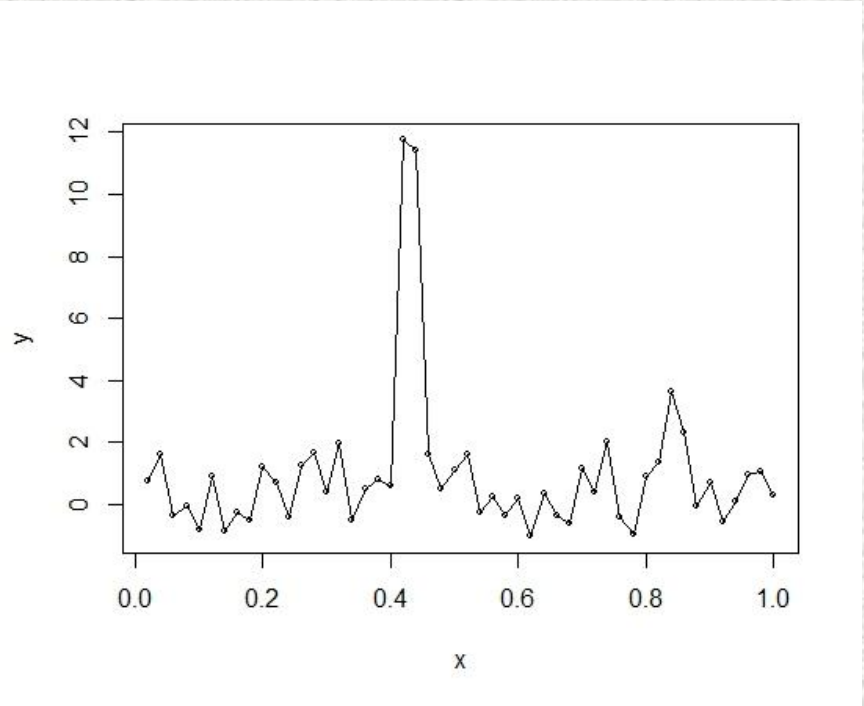
 # Ex B

```
>hm <- hcv(exb$x, exb$y, display="lines")
```




```
hcv: boundary of search area reached.
Try readjusting hstart and hend.
hstart: 0.01412223
hend : 0.2824446
            h          cv
[1,] 0.01412223  171.4676
[2,] 0.02166530  190.9929
[3,] 0.03323733  219.8658
[4,] 0.05099029  242.9889
[5,] 0.07822560  258.1320
[6,] 0.12000804  272.2397
[7,] 0.18410763  284.3874
[8,] 0.28244455  288.4751
Erro em hcv(exb$x, exb$y, display = "lines") :
```

```
>sm.regression(exb$x, exb$y, h=0.005)
```

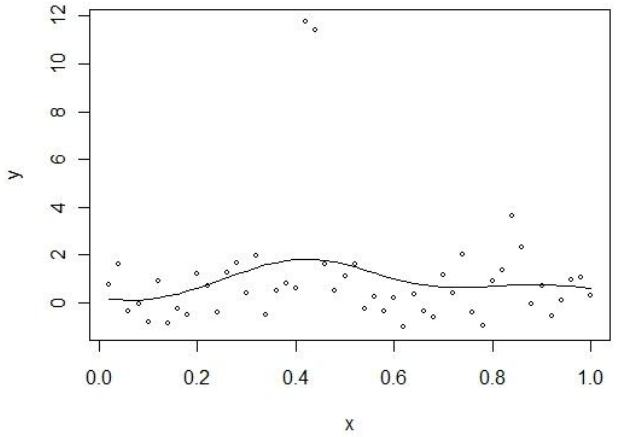


 # Ex B: largura da banda

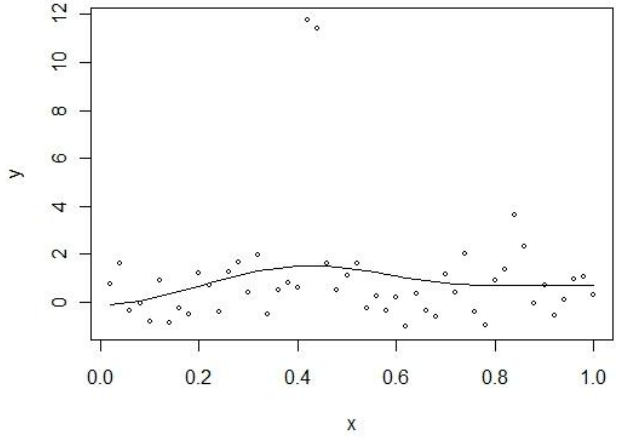
hstart: 0.01412223

hend : 0.2824446

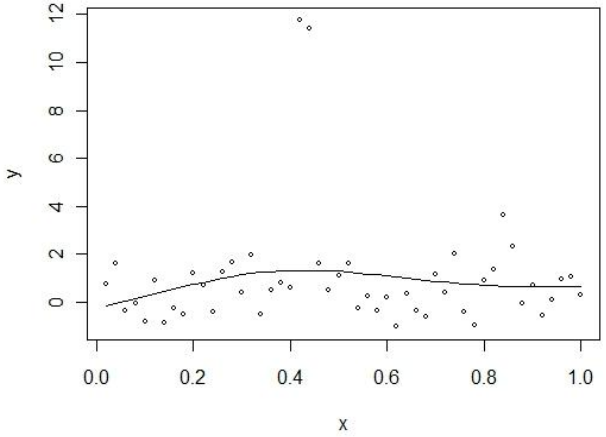
h=0.141



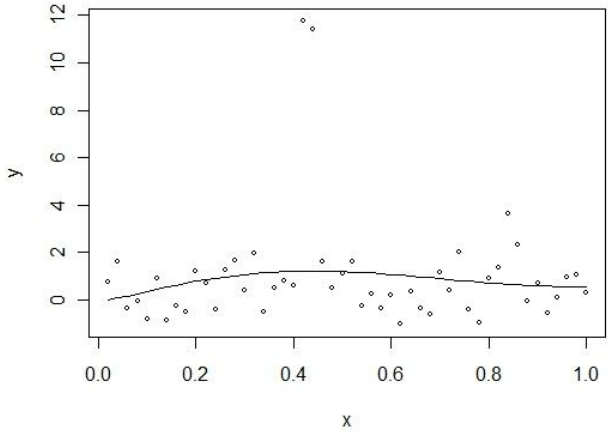
h=0.180



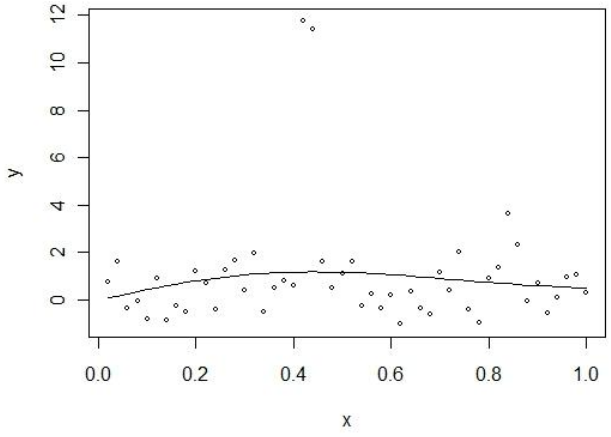
h=0.220



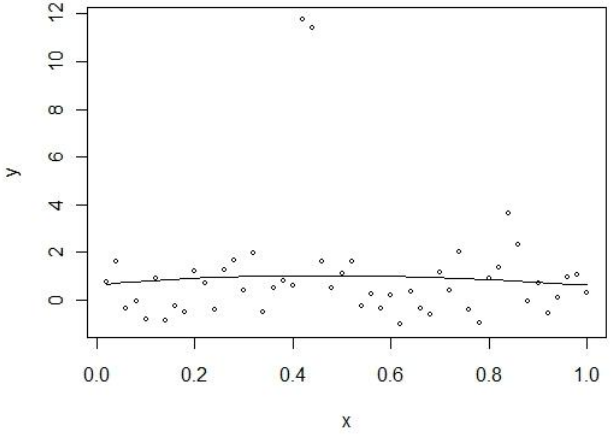
h=0.260



h=0.282



h=0.500



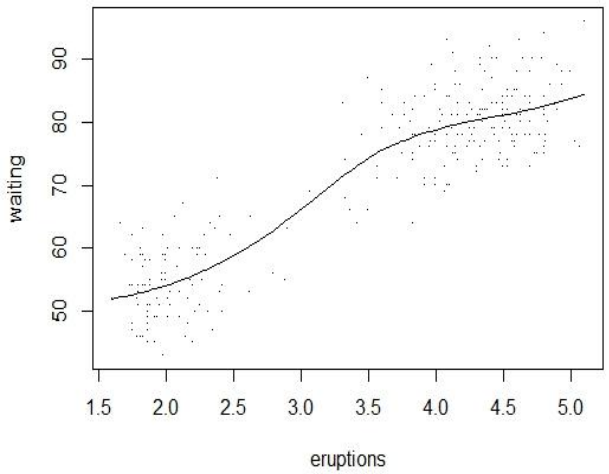
Método das *splines*

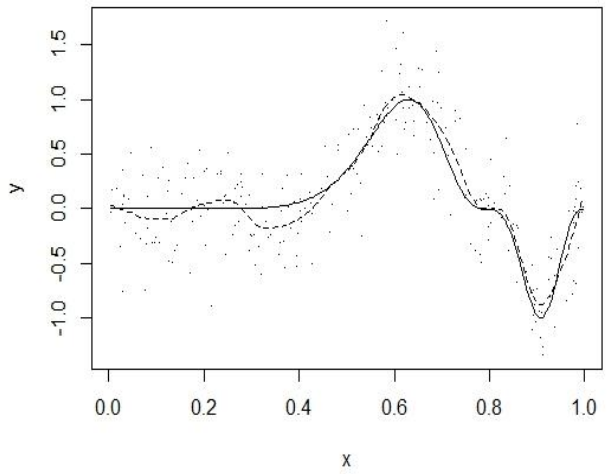
Suavização das splines

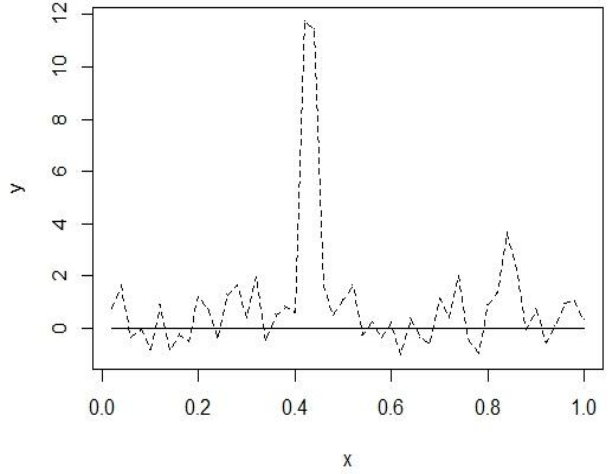
```
>plot (waiting ~ eruptions, faithful, pch=".")
>lines(smooth.spline(faithful$eruptions, faithful$waiting))

>plot (y ~ x, exa, pch=".")
>lines(exa$x, exa$m)
>lines(smooth.spline(exa$x, exa$y), lty=2)

>plot (y ~ x, exb, pch=".")
>lines(exb$x, exb$m)
>lines(smooth.spline(exb$x, exb$y), lty=2)
```



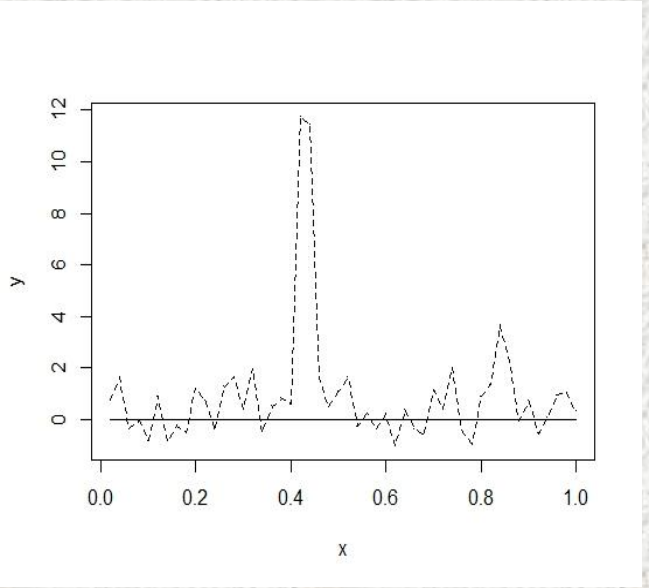




Função cúbica atende ao requisito de continuidade e suavidade.

SPLINES DE SUAVIZAÇÃO:

- Ajuste melhorado da função,
- Escolha automática pode ser perigosa (exemplo B: interpolação dos dados).

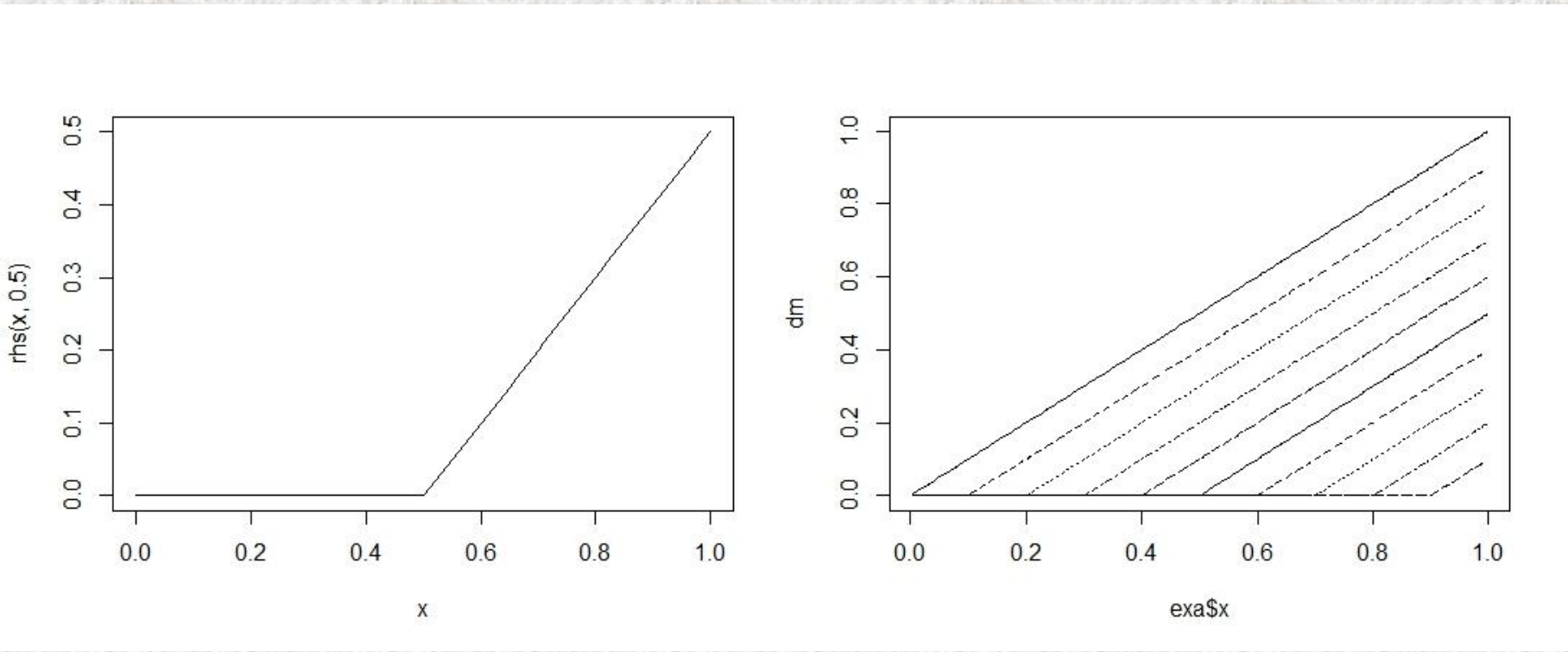


SPLINES DE REGRESSÃO:

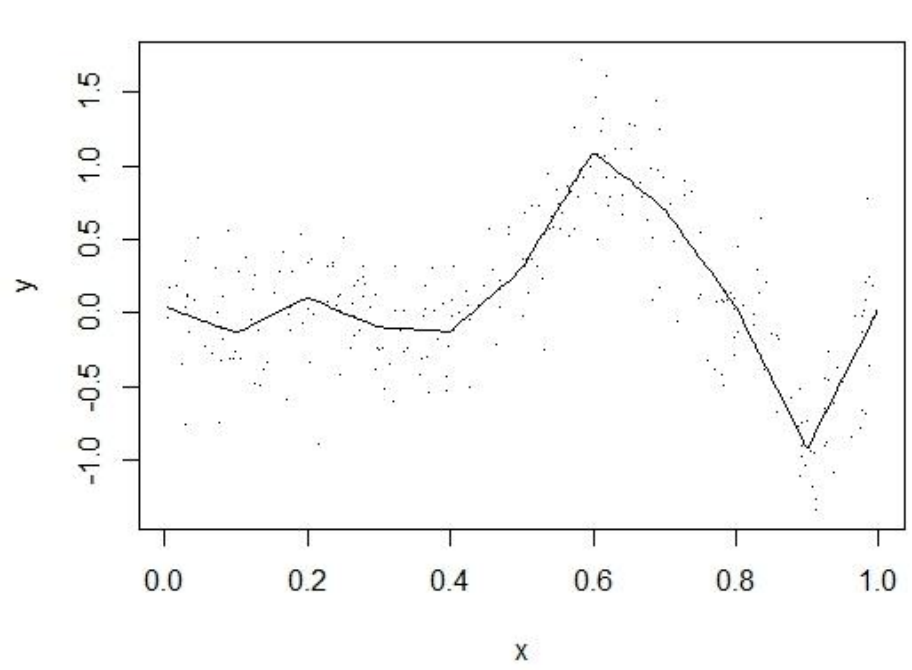
- Utiliza uma quantidade de nós menor que o tamanho da amostra,
- Número de nós (ou 'janelas') controla a "quantidade de suavização", anteriormente controlada pelo λ.
- Método não-paramétrico fornece a liberdade de escolha do número de nós ('janelas').

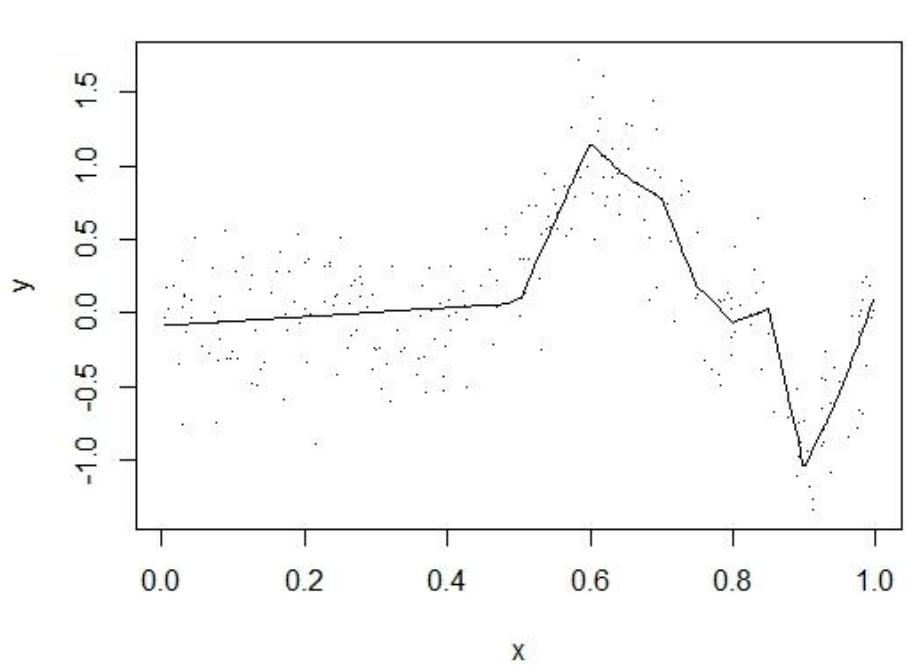
Splines de regressão

```
>rhs <- function (x,c) ifelse (x > c, x - c, 0)
>plot (rhs)
>curve (rhs(x,0.5), 0, 1)
>knots <- 0:9/10; knots
>dm <- outer (exa$x, knots, rhs)
>matplot (exa$x, dm, type="l", col=1)
```



```
# ajuste de regressão
>g <- lm(exa$y ~ dm)
>plot (y ~ x, exa, pch=".", xlab="x", ylab="y")
>lines (exa$x, predict(g))
# adensamento dos nós
>newknots <- c(0, 0.5, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9, 0.95)
>dmn <- outer(exa$x, newknots, rhs)
>gn <- lm(exa$y ~ dmn)
>plot (y ~ x, exa, pch=".", xlab="x", ylab="y")
>lines (exa$x, predict(gn))
```

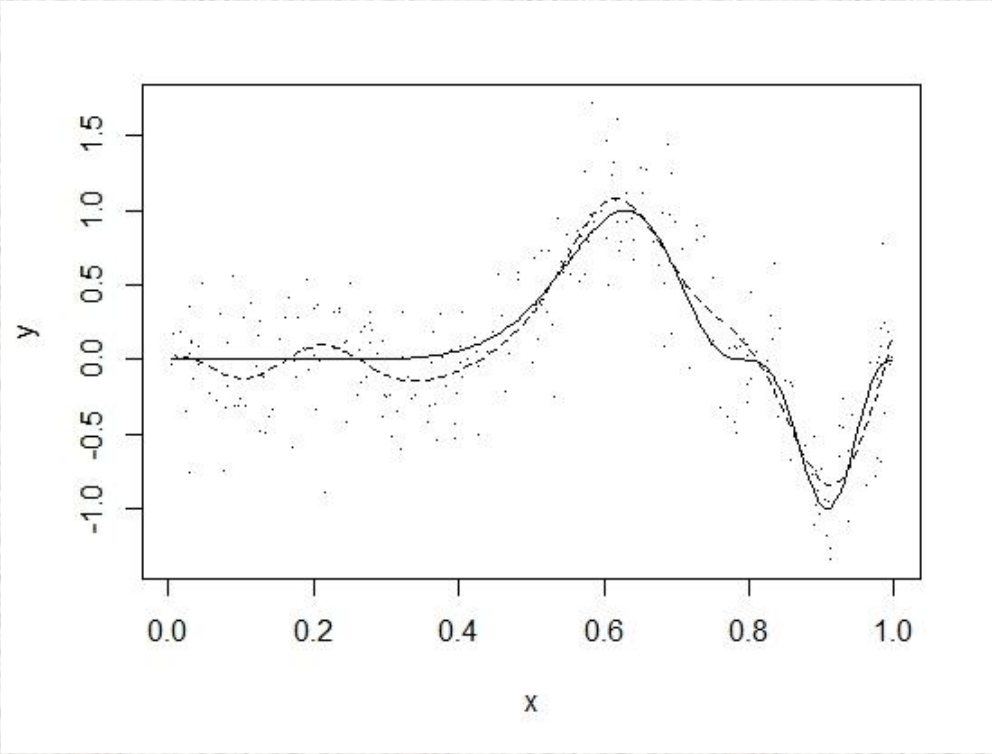




Só é aplicado quando a curvatura original é conhecida!

#Ajuste mais fino:

```
>library (splines)
>sm1 <- lm(y ~ bs(x,12), exa)
>plot (y ~ x, exa, pch=".")
>lines(m ~ x, exa)
>lines(predict(sm1) ~ x, exa, lty=2)
```

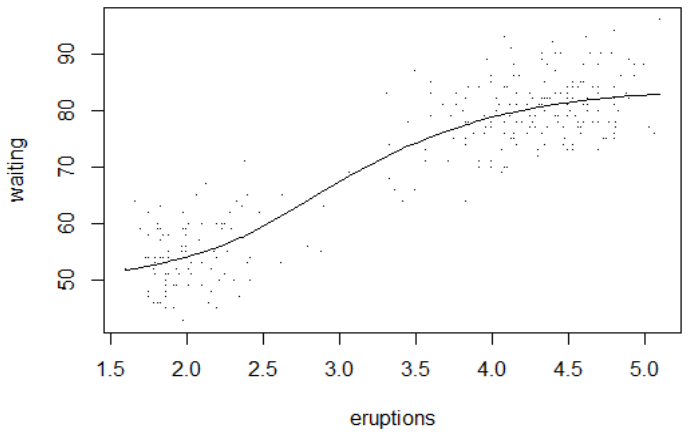


Poderia ser melhorado incluindo nós na região de maior curvatura e menos na região mais plana, ou seja, alterando a 'largura da janela' em função da distribuição dos dados.

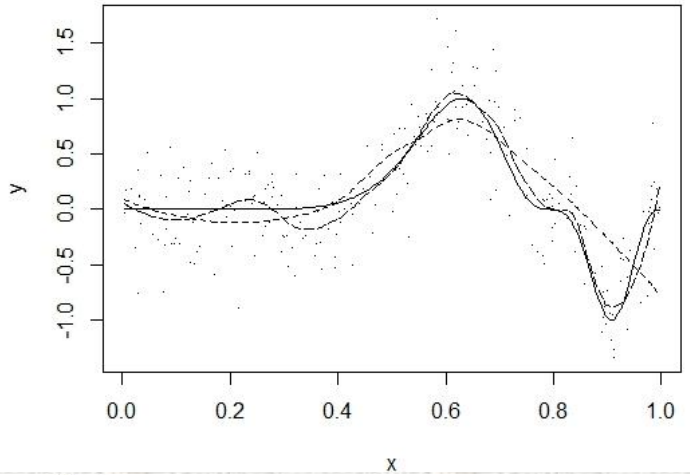
Método dos polinômios locais (*local polynomials*)

#Polinômios locais:

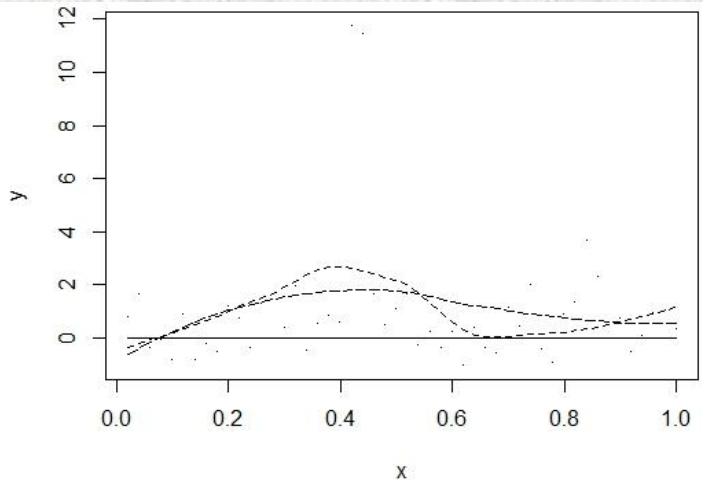
```
>plot (waiting ~ eruptions, faithful, pch=".")
>f <- loess(waiting ~ eruptions, faithful)
>i <- order (faithful$eruptions)
>lines(f$x[i], f$fitted[i])
```




```
>plot(y ~ x, exa, pch=".")
>lines(exa$x, exa$m, lty=1)
>f <- loess(y ~ x, exa)
>lines(f$x, f$fitted, lty=2)
>f <- loess(y ~ x, exa, span=0.22)
>lines(f$x, f$fitted, lty=5)
```



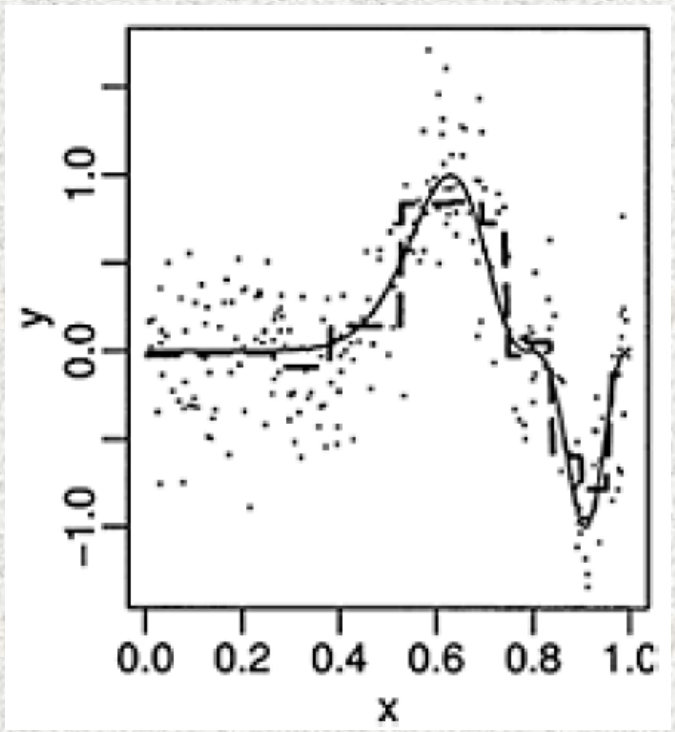

```
>plot (y ~ x, exb, pch=".")
>f <- loess(y ~ x, exb)
>lines(f$x, f$fitted, lty=2)
>f <- loess(y ~ x, exb, span=1)
>lines(f$x, f$fitted, lty=5)
>lines(exb$x, exb$m)
```

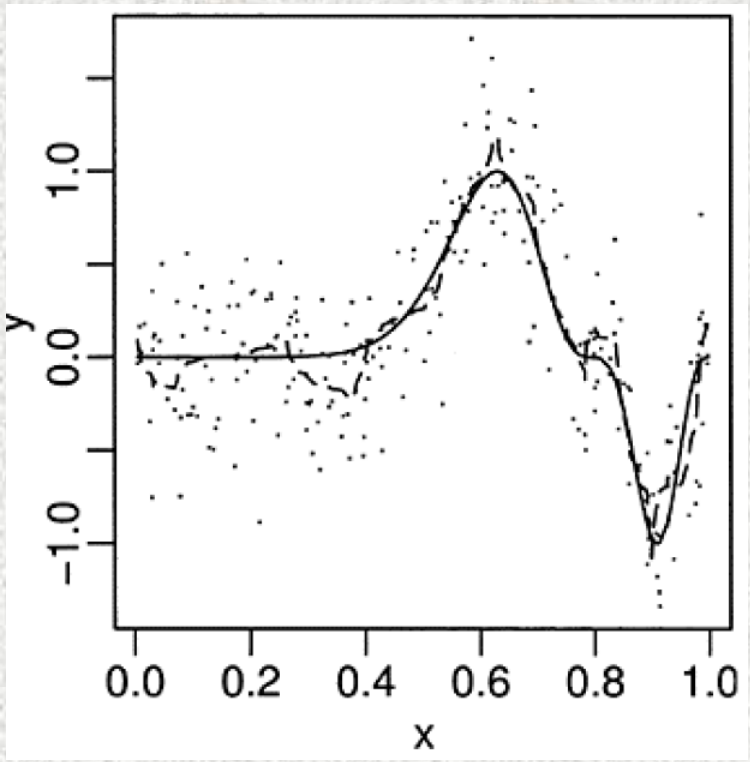


OUTROS MÉTODOS

WAVELETS:

- Utilização de polinômios ortogonais e bases de Fourier,
- Propriedade de multirresolução,
- Alteração da largura da janela de acordo com a oscilação dos dados.





OUTROS MÉTODOS

NEAREST NEIGHBOR:

- O comprimento da janela varia de forma a comportar a mesma quantidade de pontos.

VARIABLE BANDWIDTH:

- Bandas menores nas regiões de alta variabilidade e bandas mais largas quando a função é mais suave,
- Requer conhecimento a priori da suavidade da função relativa a todo o conjunto de dados.

RUNNING MEDIANS:

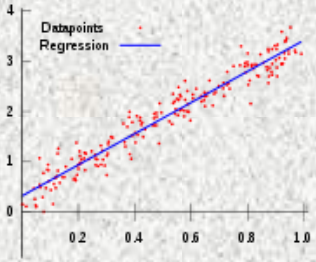
- Utilizado para conjunto de dados com muitos outliers,
- Métodos baseados em médias locais são muito afetados por dados discrepantes, nesse contexto a utilização de medianas é uma boa alternativa,
- Produz ajuste visual rústico.

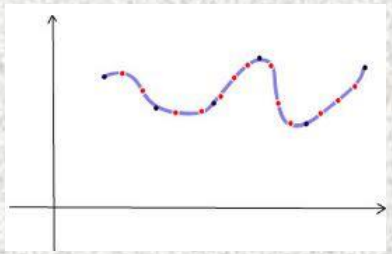
COMPARAÇÃO DE MÉTODOS – CASO UNIVARIADO

- **Dados homogêneos e pouco ruído:**

  interpolação

  regressão linear simples

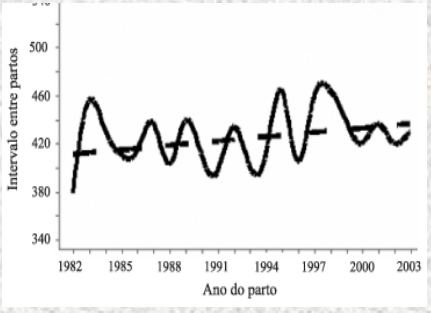




- **Ruído moderado:**

  métodos não paramétricos

  (sinal suficiente para justificar um ajuste flexível)



- **Muito ruído:**

  preferência para métodos paramétricos

  (não há sinal suficiente para justificar

  modelo mais complexo)

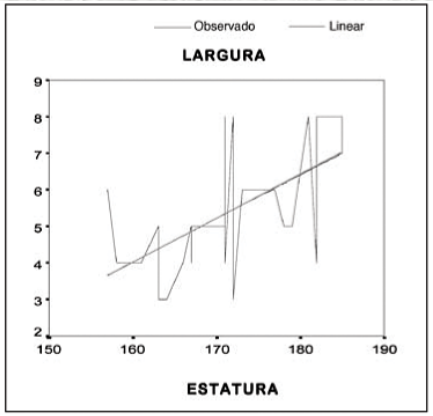
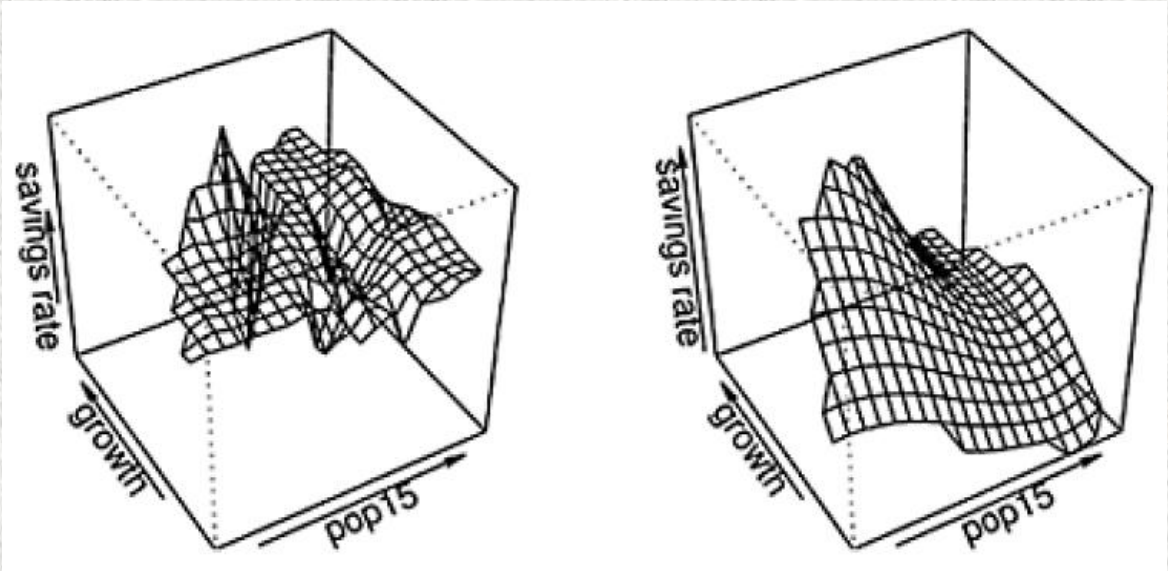


Gráfico 3: *Diagrama de dispersão entre a largura do semitendíneo e a estatura do cadáver em centímetros.*

PREDITORES MULTIVARIADOS

$$y_i = f(\mathbf{x}) + \varepsilon_i \quad i = 1, \ldots n$$

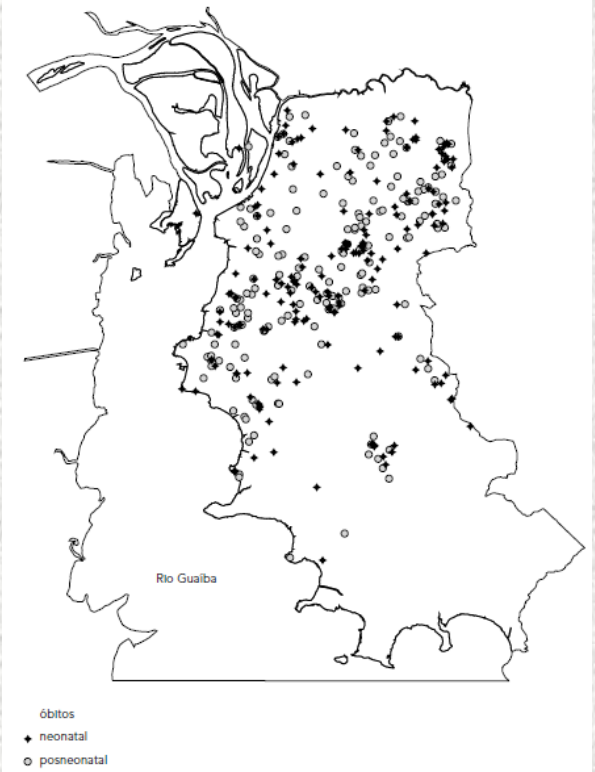
- Muitos dos métodos são estendidos para dimensões maiores,
- Ajustes não-paramétricos são mais complexos,
- Não costuma ser aplicado para mais de dois preditores (visualização não é possível),
- Maldição da dimensionalidade: tamanho da janela suficiente para capturar pontos para a média local.

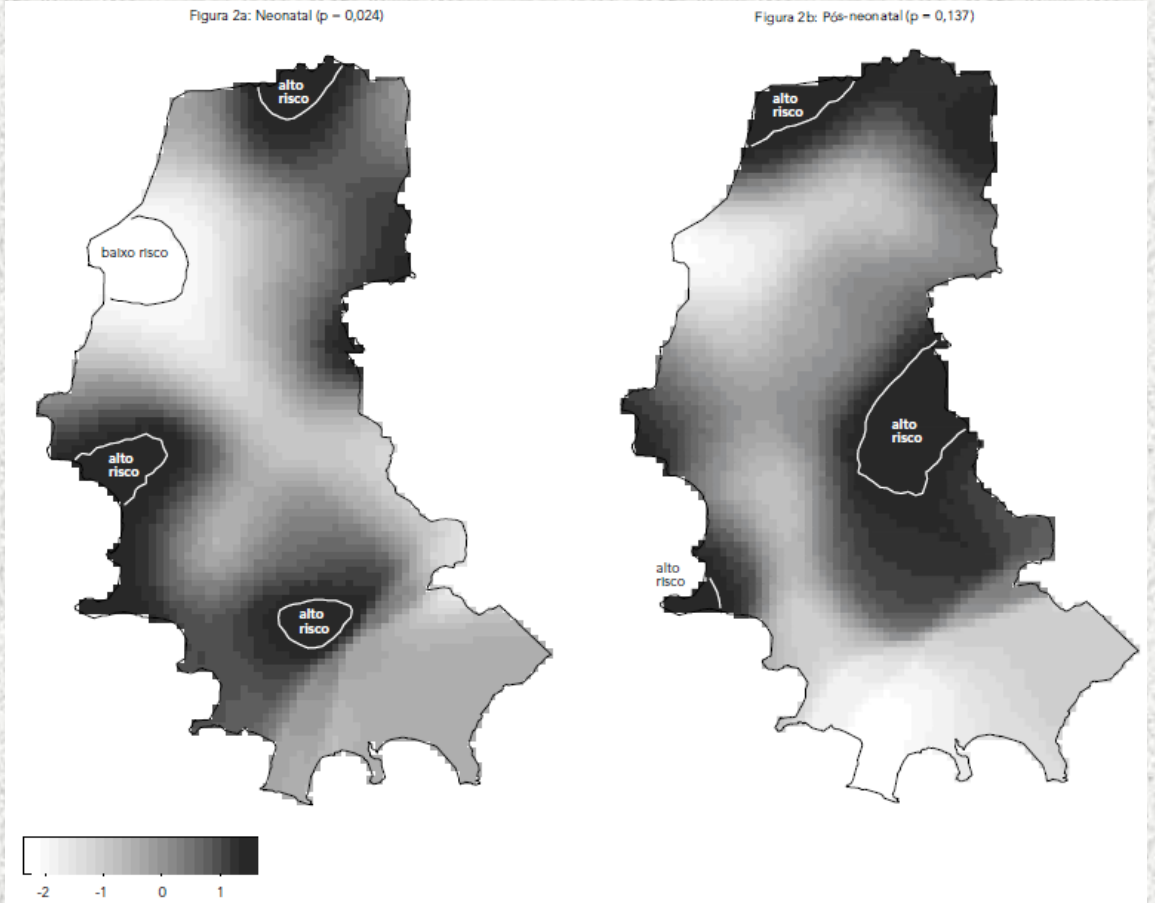


UTILIZAÇÕES DE MODELO DE REGRESSÃO NÃO-PARAMÉTRICA E SEMI-PARAMÉTRICA

MORTALIDADE INFANTIL EM PORTO ALEGRE

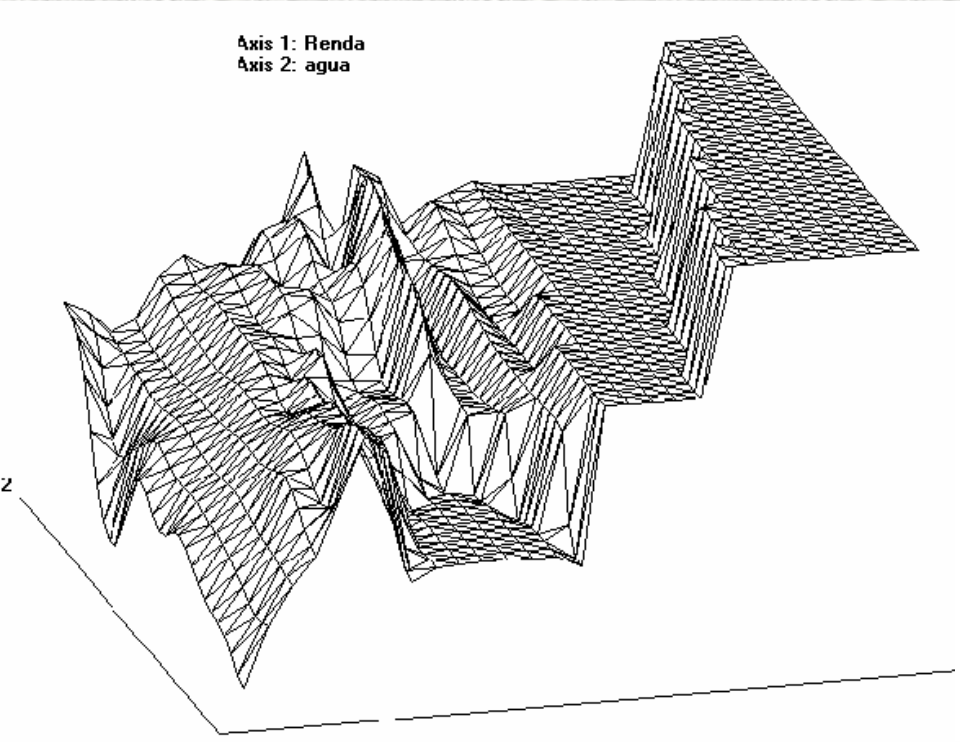
- Variáveis: idade e grau de instrução da mãe, tipo de gravidez e parto, localização da residência, peso ao nascer, semanas gestacionais e sexo de crianças que nasceram durante o ano de 1998, no Município de Porto Alegre, e que morreram antes de completarem o primeiro ano de vida,
- Abordagem semiparamétrica, ou abordagem de Modelos Aditivos Generalizados (GAM),
- Estimação espacial do risco.

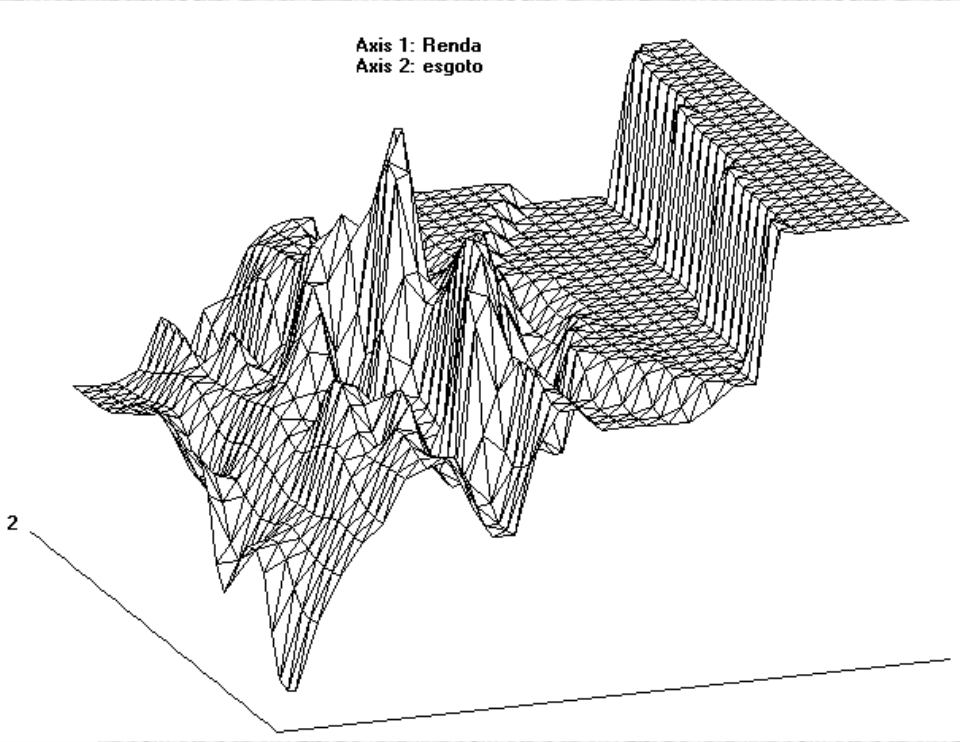




ECONOMETRIA

- Métodos de Econometria Não-Paramétrica.
- Relação entre a esperança de vida ao nascer e as condições sócio-econômicas dos municípios nordestinos a partir de variáveis como renda per capita, proporção de domicílios com água canalizada e proporção de domicílios com acesso a rede de esgotos.





REFERENCIAS

- Faraway, J. J. ***Extending the linear model with R***: Generalized linear, mixed effects and nonparametric regression models. Taylor & Francis Group, LLC: 2006.

- Fox, J. ***Nonparametric Regression*** - Appendix to An R and S-PLUS Companion to Applied Regression. 2002.

- Shimakura, S. E.; *et al.* Distribuição espacial do risco: modelagem da mortalidade infantil em Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil *in* **Cad. Saude Publica**, 1251-1261, Rio de Janeiro, set-out, 2001.

- Simonassi, A. G. **Econometria Não Paramétrica e Expectativa e de Vida nos Municípios do Nordeste**: Uma Aplicação do Estimador de Nadaraya-Watson. FGV. Disponível em: <http://www.bnb.gov.br/content/aplicacao/ETENE/Anais/docs/mesa9_texto3.pdf>

- Von Zuben, F. ***Regressão Paramétrica e Não-Paramétrica.*** DCA/FEEC/Unicamp. Notas de aula. Disponível em: <ftp://ftp.dca.fee.unicamp.br/pub/docs/vonzuben/ia353/aula13.pdf>