

Modelos de Regressão Múltipla - Parte X

Erica Castilho Rodrigues

15 de Fevereiro de 2016

Validação do Modelo de Regressão

Validação do Modelo de Regressão

- ▶ Essa é a última etapa da construção do modelo.
- ▶ Objetivos:
 - ▶ avaliar o ajuste do modelo
 - ▶ e sua capacidade preditiva em conjuntos de dados diferentes daquele usado na construção do modelo.
- ▶ Validação do modelo significa:
 - ▶ coletar novos dados e “conferir”.

Pontos a serem verificados:

- ▶ Estabilidade de $\hat{\beta}$:
 - ▶ as estimativas obtidas com novas amostras são similares às atuais quanto às magnitudes e sinais algébricos ?
- ▶ Os valores ajustados \hat{Y} da resposta na nova amostra são boas estimativas dos valores reais.

Indicativos de que o modelo ajustado é inadequado:

- ▶ obtenção de valores preditos não condizentes com a realidade;
- ▶ p ex., predições negativas para um variável que só pode assumir valores positivo;
- ▶ valores fora da faixa onde a variável está definida.

- ▶ Em alguns caso pode não ser possível coletar novos dados.
- ▶ Nesse caso, dividimos os dados em dois conjuntos:
 - ▶ dados de estimação e dados de predição.
- ▶ Esse procedimento é chamado **validação cruzada**.
- ▶ Depois de validado o modelo,
 - ▶ usamos o conjunto de dados completos para estimar a reta de regressão.

- ▶ Podemos medir a capacidade preditiva do modelo usando o **Quadrado Médio do Erro de Predição**

$$QMEPr = \frac{\sum_{i=1}^{n^*} (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n^*}$$

onde

- ▶ Y_i é valor na variável na i -ésima nova observação coletada;
- ▶ \hat{Y}_i valor predito do modelo em avaliação (dados originais)
- ▶ n^* é o tamanho da nova amostra.

Métodos usados para validação do modelo de regressão usando novos dados

- ▶ Estimar o modelo usando os novos dados e comparar

$$\hat{\beta}, S^2, R^2, QMR$$

e outras estatísticas com os valores obtidos para os dados originais.

- ▶ Estimar novamente os melhores modelos selecionados com os dados originais.
- ▶ Verificar se com os novos dados o modelo escolhido ainda é o preferido.
- ▶ Avaliar a capacidade preditiva do modelo usando *QMEPr*.

Exemplo

- ▶ Estamos interessados em analisar a proporção de n-Heptano que se converte em Acetileno.
- ▶ Essa proporção vai depender das variáveis:
 - ▶ temperatura do reator;
 - ▶ razão entre as quantidades de n-Heptano e hidrogênio;
 - ▶ tempo de contato.
- ▶ 16 observações foram coletadas.
- ▶ Os dados são apresentados a seguir.

Exemplo (continuação)

- ▶ A tabela a seguir apresenta os dados de produção do acetileno.

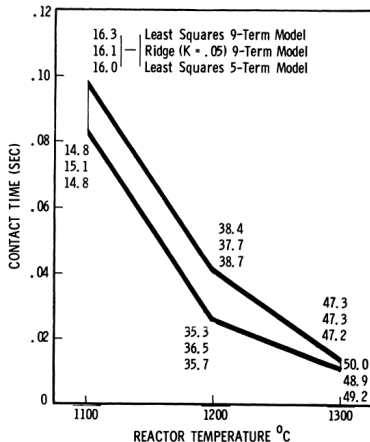
x_1 Reactor Temperature ($^{\circ}\text{C}$)	x_2 Ratio of H_2 to n-Heptane (mole ratio)	x_3 Contact Time (sec)	y Conversion of n-Heptane to Acetylene (%)
1300	7.5	0.0120	49.0
1300	9.0	0.0120	50.2
1300	11.0	0.0115	50.5
1300	13.5	0.0130	48.5
1300	17.0	0.0135	47.5
1300	23.0	0.0120	44.5
1200	5.3	0.0400	28.0
1200	7.5	0.0380	31.5
1200	11.0	0.0320	34.5
1200	13.5	0.0260	35.0
1200	17.0	0.0340	38.0
1200	23.0	0.0410	38.5
1100	5.3	0.0840	15.0
1100	7.5	0.0980	17.0
1100	11.0	0.0920	20.5
1100	17.0	0.0860	29.5

Exemplo (continuação)

- ▶ Três modelos foram ajustados:
 - ▶ um modelo com as variáveis, termos quadrático e termos cruzados, totalizando 9 termos;
 - ▶ um submodelo do anterior com 5 termos;
 - ▶ um modelo com os 9 termos usando “ridge regression”.

Exemplo (continuação)

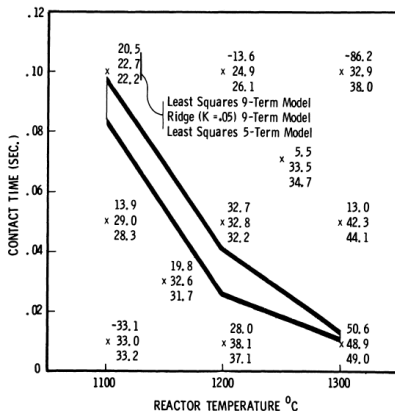
- ▶ A Figura a seguir mostra as previsões obtidas usando cada um dos modelos.



- ▶ As previsões usando os três modelos são bem parecidas.

Exemplo (continuação)

- ▶ A Figura a seguir mostra as previsões obtidas usando cada um dos modelos, considerando faixas de valores fora dos dados.



Exemplo (continuação)

- ▶ As predições para o primeiro modelo ficam negativas, o que não faz sentido.
- ▶ Esse modelo não parece estar bem ajustado.
- ▶ Isso provavelmente ocorre por causa de multicolinearidade.
- ▶ Os VIF apresentam valores elevados para esse modelo.

	Nine-Term Model (1)			
	VIF (2)	Least Squares	Ridge	
			k = .01	k = .05
x_1 = Temperature	375.25	.34*	.59	.52
x_2 = H_2 /n-Heptane	1.74	.23	.22	.21
x_3 = Contact Time	680.28	-.68	-.33	-.38
x_1x_2	31.04	-.48	-.33	-.20
x_1x_3	6563.35	-2.03	-.09	-.06
x_2x_3	35.61	-.27	-.08	.04
x_1^2	1762.58	-.84	.13	.13
x_2^2	3.16	-.09	-.05	-.05
x_3^2	1156.77	-1.00	-.07	-.02
R_A^2		.994	.990	.983
Maximum VIF	6563.35	12.38	2.63	