CE310 - Modelos de Regressão Linear Regressão polinomial

Cesar Augusto Taconeli

09 de junho, 2025

• Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:

- Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:
 - Transformação nas variáveis;

- Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:
 - Transformação nas variáveis;
 - Regressão polinomial;

- Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:
 - Transformação nas variáveis;
 - Regressão polinomial;
 - Regressão segmentada;

- Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:
 - Transformação nas variáveis;
 - Regressão polinomial;
 - Regressão segmentada;
 - Regressão não paramétrica (ou semi paramétrica);

- Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:
 - Transformação nas variáveis;
 - Regressão polinomial;
 - Regressão segmentada;
 - Regressão não paramétrica (ou semi paramétrica);
 - Regressão não linear.

- Principais métodos para a modelagem de relação não lineares entre variáveis:
 - Transformação nas variáveis;
 - Regressão polinomial;
 - Regressão segmentada;
 - Regressão não paramétrica (ou semi paramétrica);
 - Regressão não linear.
- Neste módulo vamos estudar as estratégias para modelagem de relações não lineares no campo da regressão linear, considerando transformação nas variáveis, regressão polinomial e regressão segmentada.

Regressão polinomial

Regressão polinomial

• Num modelo de regressão polinomial, uma mesma variável quantitativa é inserida por meio de dois ou mais termos (potências) no modelo.

Regressão polinomial

• Num modelo de regressão polinomial, uma mesma variável quantitativa é inserida por meio de dois ou mais termos (potências) no modelo.

• Como exemplo, uma variável x pode ser inserida na forma linear (x), quadrática (x^2) , cúbica (x^3) , ou ainda por meio de termos multiplicativos envolvendo outras variáveis (xy, xz).

ullet O modelo de regressão polinomial de ordem k em uma variável fica especificado por:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \dots + \beta_k x_i^k + \epsilon_i.$$

ullet O modelo de regressão polinomial de ordem k em uma variável fica especificado por:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \dots + \beta_k x_i^k + \epsilon_i.$$

• Particularmente, o modelo polinomial de ordem 2 (quadrático) é definido por:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \epsilon_i.$$

ullet O modelo de regressão polinomial de ordem k em uma variável fica especificado por:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \dots + \beta_k x_i^k + \epsilon_i.$$

• Particularmente, o modelo polinomial de ordem 2 (quadrático) é definido por:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \epsilon_i.$$

• Assumindo que os erros têm média zero, a média de y, condicional a x, fica definida por uma função quadrática de x:

$$E(y|x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2.$$

• A aplicação de modelo de regressão polinomial pode ser motivada, por exemplo:

- A aplicação de modelo de regressão polinomial pode ser motivada, por exemplo:
- O analista pode saber, com base na teoria da área, que um modelo polinomial com uma particular ordem descreve a relação entre as variáveis;

- A aplicação de modelo de regressão polinomial pode ser motivada, por exemplo:
- O analista pode saber, com base na teoria da área, que um modelo polinomial com uma particular ordem descreve a relação entre as variáveis;
- A relação entre as variáveis pode apresentar um ponto ótimo (mínimo ou máximo), o que pode motivar a investigação de um modelo quadrático;

- A aplicação de modelo de regressão polinomial pode ser motivada, por exemplo:
- O analista pode saber, com base na teoria da área, que um modelo polinomial com uma particular ordem descreve a relação entre as variáveis;
- A relação entre as variáveis pode apresentar um ponto ótimo (mínimo ou máximo), o que pode motivar a investigação de um modelo quadrático;
- Sem boa parte dos casos, tem-se uma relação desconhecida e não linear entre as variáveis, de maneira que polinômios de diferentes ordens podem ser testados buscando um ajuste satisfatório.

• Caso não se disponha, de antemão, de um particular polinômio a ser aplicado, a ordem do polinômio deve ser escolhida de maneira criteriosa.

• Caso não se disponha, de antemão, de um particular polinômio a ser aplicado, a ordem do polinômio deve ser escolhida de maneira criteriosa.

• Quanto maior a ordem do polinômio especificado, melhor o ajuste aos dados, mas menor a precisão das estimativas (tradeoff bias-variance).

• Caso não se disponha, de antemão, de um particular polinômio a ser aplicado, a ordem do polinômio deve ser escolhida de maneira criteriosa.

• Quanto maior a ordem do polinômio especificado, melhor o ajuste aos dados, mas menor a precisão das estimativas (tradeoff bias-variance).

• A menos que se tenha uma justificativa adequada, polinômios de ordem superior a 3 devem ser evitados.

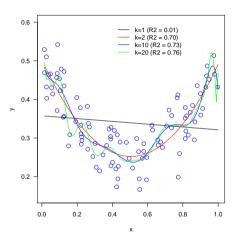


Figura 1: Ajustes de modelos polinomiais de diferentes ordens.

• A escolha da ordem do polinômio pode ser feita usando estratégias do tipo **forward** ou **backward**.

• A escolha da ordem do polinômio pode ser feita usando estratégias do tipo **forward** ou **backward**.

• Na estratégia **forward** deve-se começar pelo ajuste sem a variável investigada e incluir, a cada passo, o termo linear (x), depois o quadrático (x^2) , o cúbico (x^3) ...

• A escolha da ordem do polinômio pode ser feita usando estratégias do tipo **forward** ou **backward**.

• Na estratégia forward deve-se começar pelo ajuste sem a variável investigada e incluir, a cada passo, o termo linear (x), depois o quadrático (x^2) , o cúbico (x^3) ...

• O processo se encerra quando a adição de um termo de ordem t+1 não for significativa. O modelo escolhido é o de ordem t.

• Na estratégia **backward** deve-se começar pelo ajuste do modelo polinomial de maior ordem a ser investigado (digamos k) e, a cada passo, excluir o termo de maior ordem (primeiro x^k , depois x^{k-1},\ldots), desde que o termo não tenha efeito significativo.

• Na estratégia **backward** deve-se começar pelo ajuste do modelo polinomial de maior ordem a ser investigado (digamos k) e, a cada passo, excluir o termo de maior ordem (primeiro x^k , depois x^{k-1},\ldots), desde que o termo não tenha efeito significativo.

• O processo se encerra quando o termo de maior ordem (digamos t) tiver efeito significativo. O modelo escolhido é o de ordem t.

Regressão polinomial - extrapolação

• Extrapolar (ou seja, predizer y fora do intervalo observado para x) em geral não é apropriado para modelos polinomiais, podendo produzir resultados incorretos e inconsistentes.

Regressão polinomial - extrapolação

• Extrapolar (ou seja, predizer y fora do intervalo observado para x) em geral não é apropriado para modelos polinomiais, podendo produzir resultados incorretos e inconsistentes.

• Uma situação em que a extrapolação pode ser aplicada com maior segurança é quando o modelo de regressão baseia-se em algum modelo teórico da área que descreva adequadamente o fenômeno.

Regressão polinomial - extrapolação

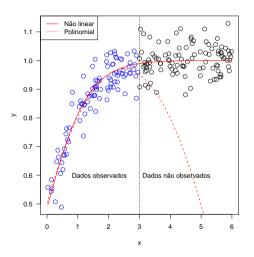


Figura 2: Modelos polinomiais - o problema da extrapolação

• Em regressão polinomial, a matriz do modelo é composta por colunas que são potências de uma mesma variável.

• Em regressão polinomial, a matriz do modelo é composta por colunas que são potências de uma mesma variável.

• Essa construção implica no mau condicionamento da matriz, ou seja, na correlação entre as colunas da matriz.

• Em regressão polinomial, a matriz do modelo é composta por colunas que são potências de uma mesma variável.

• Essa construção implica no mau condicionamento da matriz, ou seja, na correlação entre as colunas da matriz.

• Uma medida corretiva consiste em usar os dados centrados (ou seja, substituir x por $x^* = x - \bar{x}$).

• Em regressão polinomial, a matriz do modelo é composta por colunas que são potências de uma mesma variável.

• Essa construção implica no mau condicionamento da matriz, ou seja, na correlação entre as colunas da matriz.

• Uma medida corretiva consiste em usar os dados centrados (ou seja, substituir x por $x^* = x - \bar{x}$).

• Uma alternativa mais eficiente é usar polinômios ortogonais.

Exemplo- Valores de imóveis em Boston

 Nesta aplicação vamos considerar os dados disponíveis na base de dados Boston da biblioteca MASS do R.

 Nesta aplicação vamos considerar os dados disponíveis na base de dados Boston da biblioteca MASS do R.

• Os dados referem-se aos valores dos imóveis residenciais em 506 subúrvios de Boston.

 Nesta aplicação vamos considerar os dados disponíveis na base de dados Boston da biblioteca MASS do R.

• Os dados referem-se aos valores dos imóveis residenciais em 506 subúrvios de Boston.

• As variáveis que vamos analisar são as seguintes:

 Nesta aplicação vamos considerar os dados disponíveis na base de dados Boston da biblioteca MASS do R.

• Os dados referem-se aos valores dos imóveis residenciais em 506 subúrvios de Boston.

- As variáveis que vamos analisar são as seguintes:
 - medv: preço mediano dos imóveis ocupados no subúrbio (em \$1000s);

 Nesta aplicação vamos considerar os dados disponíveis na base de dados Boston da biblioteca MASS do R.

• Os dados referem-se aos valores dos imóveis residenciais em 506 subúrvios de Boston.

- As variáveis que vamos analisar são as seguintes:
 - medv: preço mediano dos imóveis ocupados no subúrbio (em \$1000s);
 - 1stat: percentual da população do subúrbio na menor faixa de renda.

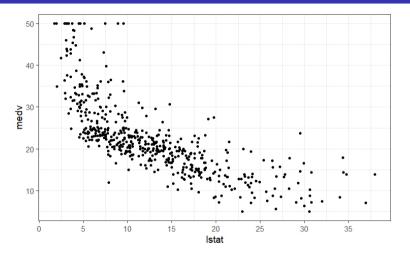


Figura 3: Valores de imóveis e população de menor renda

• Vamos ajustar modelos polinomiais de primeira a sexta ordem, conforme descrito na sequência:

- Vamos ajustar modelos polinomiais de primeira a sexta ordem, conforme descrito na sequência:
- Modelo de regressão polinomial de primeira ordem:

$$\mathtt{medv} = eta_0 + eta_1 \mathtt{lstat} + \epsilon$$

- Vamos ajustar modelos polinomiais de primeira a sexta ordem, conforme descrito na sequência:
- Modelo de regressão polinomial de primeira ordem:

$$\mathtt{medv} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{lstat} + \epsilon$$

2. Modelo de regressão polinomial de segunda ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \epsilon$$

- Vamos ajustar modelos polinomiais de primeira a sexta ordem, conforme descrito na sequência:
- Modelo de regressão polinomial de primeira ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \epsilon$$

2. Modelo de regressão polinomial de segunda ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \epsilon$$

3. Modelo de regressão polinomial de terceira ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \beta_3 lstat^3 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quarta ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \beta_3 lstat^3 + \beta_4 lstat^4 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quarta ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \beta_3 lstat^3 + \beta_4 lstat^4 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quinta ordem:

$$\mathtt{medv} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{lstat} + \beta_2 \mathtt{lstat}^2 + \beta_3 \mathtt{lstat}^3 + \beta_4 \mathtt{lstat}^4 + \beta_5 \mathtt{lstat}^5 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quarta ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \beta_3 lstat^3 + \beta_4 lstat^4 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quinta ordem:

$$\mathtt{medv} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{lstat} + \beta_2 \mathtt{lstat}^2 + \beta_3 \mathtt{lstat}^3 + \beta_4 \mathtt{lstat}^4 + \beta_5 \mathtt{lstat}^5 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de sexta ordem:

$$\mathtt{medv} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{lstat} + \beta_2 \mathtt{lstat}^2 + \beta_3 \mathtt{lstat}^3 + \beta_4 \mathtt{lstat}^4 + \beta_5 \mathtt{lstat}^5 + \beta_6 \mathtt{lstat}^6 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quarta ordem:

$$\mathtt{medv} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{lstat} + \beta_2 \mathtt{lstat}^2 + \beta_3 \mathtt{lstat}^3 + \beta_4 \mathtt{lstat}^4 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de quinta ordem:

$$medv = \beta_0 + \beta_1 lstat + \beta_2 lstat^2 + \beta_3 lstat^3 + \beta_4 lstat^4 + \beta_5 lstat^5 + \epsilon$$

Modelo de regressão polinomial de sexta ordem:

$$\mathtt{medv} = eta_0 + eta_1 \mathtt{lstat} + eta_2 \mathtt{lstat}^2 + eta_3 \mathtt{lstat}^3 + eta_4 \mathtt{lstat}^4 + eta_5 \mathtt{lstat}^5 + eta_6 \mathtt{lstat}^6 + \epsilon_6 \mathtt{lstat}^6 + \epsilon_6$$

• Em todos os casos os erros são independentes e identicamente distribuídos $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

 \bullet Os modelos ajustados são os seguintes:

- Os modelos ajustados são os seguintes:
- Modelo de primeira ordem:

$$\widehat{\text{medv}} = 34.55 - 0.95 \times \text{lstat}$$

- Os modelos ajustados são os seguintes:
- Modelo de primeira ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 34.55 - 0.95 \times \mathtt{lstat}$$

2. Modelo de segunda ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 42.86 - 2.33 \times \mathtt{1stat} + 0.043 \times \mathtt{1stat}^2$$

- Os modelos ajustados são os seguintes:
- Modelo de primeira ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 34.55 - 0.95 \times \mathtt{lstat}$$

2. Modelo de segunda ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 42.86 - 2.33 \times \mathtt{lstat} + 0.043 \times \mathtt{lstat}^2$$

3. Modelo de terceira ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 48.64 - 3.87 \times \mathtt{lstat} + 0.15 \times \mathtt{lstat}^2 - 0.002 \times \mathtt{lstat}^3$$

Modelo de quarta ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 57.30 - 7.03 \times \mathtt{lstat} + 0.50 \times \mathtt{lstat}^2 - 0.016 \times \mathtt{lstat}^3 + 0.0002 \times \mathtt{lstat}^4$$

Modelo de quarta ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 57.30 - 7.03 \times \mathtt{lstat} + 0.50 \times \mathtt{lstat}^2 - 0.016 \times \mathtt{lstat}^3 + 0.0002 \times \mathtt{lstat}^4$$

Modelo de quinta ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 67.70 - 11.99 \times \mathtt{lstat} + 1.27 \times \mathtt{lstat}^2 - 0.068 \times \mathtt{lstat}^3 + 0.0017 \times \mathtt{lstat}^4 - 0.000016 \times \mathtt{lstat}^5$$

Modelo de quarta ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 57.30 - 7.03 \times \mathtt{lstat} + 0.50 \times \mathtt{lstat}^2 - 0.016 \times \mathtt{lstat}^3 + 0.0002 \times \mathtt{lstat}^4$$

Modelo de quinta ordem:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 67.70 - 11.99 \times \mathtt{lstat} + 1.27 \times \mathtt{lstat}^2 - 0.068 \times \mathtt{lstat}^3 + 0.0017 \times \mathtt{lstat}^4 - 0.000016 \times \mathtt{lstat}^5$$

Modelo de sexta ordem ordem:

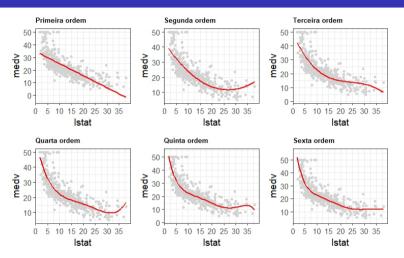


Figura 4: Modelos de regressão polinomial de diferentes ordens ajustados aos dados de valores de imóveis em Boston

Tabela 1: Tabela de análise de variância para os modelos de regressão polinomial ajustados aos dados de valores de imóveis em Boston

Order	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
1	504	19472.38				
2	503	15347.24	1	4125.14	151.86	0.0000
3	502	14615.48	1	731.76	26.94	0.0000
4	501	13967.69	1	647.79	23.85	0.0000
5	500	13597.04	1	370.66	13.65	0.0002
6	499	13554.67	1	42.36	1.56	0.2123

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 19472.38 para 15347.24 do modelo linear para o quadrático. Essa redução de 4125.14 é significativa (p<0.0001), de forma que o modelo quadrático é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 19472.38 para 15347.24 do modelo linear para o quadrático. Essa redução de 4125.14 é significativa (p<0.0001), de forma que o modelo quadrático é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 15347.24 para 14615.48 do modelo quadrático para o cúbico. Essa redução de 731.76 é significativa (p<0.0001), de forma que o modelo cúbico é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 19472.38 para 15347.24 do modelo linear para o quadrático. Essa redução de 4125.14 é significativa (p<0.0001), de forma que o modelo quadrático é preferível.

- A soma de quadrados de resíduos reduz de 15347.24 para 14615.48 do modelo quadrático para o cúbico. Essa redução de 731.76 é significativa (p<0.0001), de forma que o modelo cúbico é preferível.
- A soma de quadrados de resíduos reduz de 14615.48 para 13967.69 do modelo cúbico para o de quarta ordem. Essa redução de 647.79 é significativa (p<0.0001), de forma que o modelo de ordem quatro é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 13967.69 para 13597.04 do modelo de quarta para o de quinta ordem. Essa redução de 370.66 é significativa (p=0.0002), de forma que o modelo de ordem cinco é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 13967.69 para 13597.04 do modelo de quarta para o de quinta ordem. Essa redução de 370.66 é significativa (p=0.0002), de forma que o modelo de ordem cinco é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 13597.04 para 13554.67 do modelo de quinta para o de sexta ordem. Essa redução de 42.36 não é significativa (p=0.2123), de forma que o modelo de ordem cinco é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 13967.69 para 13597.04 do modelo de quarta para o de quinta ordem. Essa redução de 370.66 é significativa (p=0.0002), de forma que o modelo de ordem cinco é preferível.

• A soma de quadrados de resíduos reduz de 13597.04 para 13554.67 do modelo de quinta para o de sexta ordem. Essa redução de 42.36 não é significativa (p=0.2123), de forma que o modelo de ordem cinco é preferível.

• Desta forma, com base nessa bateria de avaliações de modelos de regressão polinomial de diferentes ordens, o modelo polinomial de ordem cinco deve ser escolhido.

• Nota: Embora nesta aplicação um polinômio de ordem elevada (ordem cinco) tenha sido selecionado, vale reforçar o risco de *overfitting* associado a tais polinômios.

• Nota: Embora nesta aplicação um polinômio de ordem elevada (ordem cinco) tenha sido selecionado, vale reforçar o risco de *overfitting* associado a tais polinômios.

• Se a relação não linear entre a resposta e a explicativa não for facilmente descrita por um polinômio mais simples, soluções alternativas como regressão não paramétrica são preferíveis.

• Para fins de ilustração, vamos calcular alguns valores preditos (ajustados) pelo modelo.

- Para fins de ilustração, vamos calcular alguns valores preditos (ajustados) pelo modelo.
 - Para lstat=10:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 67.70 - 11.99 \times 10 + 1.27 \times 10^2 - 0.068 \times 10^3 + 0.0017 \times 10^4 - 0.000016 \times 10^5 = 22.2$$

- Para fins de ilustração, vamos calcular alguns valores preditos (ajustados) pelo modelo.
 - Para lstat=10:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 67.70 - 11.99 \times 10 + 1.27 \times 10^2 - 0.068 \times 10^3 + 0.0017 \times 10^4 - 0.000016 \times 10^5 = 22.2$$

* Para 1stat=22:

$$\widehat{\mathtt{medv}} = 67.70 - 11.99 \times 22 + 1.27 \times 22^2 - 0.068 \times 22^3 + 0.0017 \times 22^4 - 0.000016 \times 22^5 = 10.38 \times 10^{-2} \times$$

Polinômios ortogonais

Polinômios ortogonais

• Polinômios ortogonais são uma estratégia eficiente para lidar com o mau condicionamento dos termos em regressão polinomial.

- Polinômios ortogonais são uma estratégia eficiente para lidar com o mau condicionamento dos termos em regressão polinomial.
- \bullet O modelo de regressão polinomial ortogonal, para uma variável independente x, é representado por:

$$y = \beta_0 P_0(x) + \beta_1 P_1(x) + \beta_2 P_2(x) + \dots + \beta_k P_k(x) + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2),$$

- Polinômios ortogonais são uma estratégia eficiente para lidar com o mau condicionamento dos termos em regressão polinomial.
- \bullet O modelo de regressão polinomial ortogonal, para uma variável independente x, é representado por:

$$y = \beta_0 P_0(x) + \beta_1 P_1(x) + \beta_2 P_2(x) + \dots + \beta_k P_k(x) + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2),$$

onde $P_0(x), P_1(x), P_2(x), ..., P_k(x)$ são polinômios ortogonais de ordem j=0,1,2,...,k, ou seja:

$$\sum_{i=1}^{n} P_r(x_i) P_s(x_i) = 0, \quad r \neq s, \quad r, s = 0, 1, 2, ..., k$$

$$P_0(x_i) = 1$$

• Desta forma, a matriz do modelo de regressão linear polinomial ortogonal fica dada por:

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} P_0(x_1) & P_1(x_1) & P_2(x_1) & \dots & P_k(x_1) \\ P_0(x_2) & P_2(x_2) & P_2(x_2) & \dots & P_k(x_2) \\ P_0(x_3) & P_1(x_3) & P_2(x_3) & \dots & P_k(x_3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_0(x_n) & P_1(x_n) & P_2(x_n) & \dots & P_k(x_n) \end{bmatrix}$$

ullet Como a matriz X tem colunas ortogonais, segue que:

$$\mathbf{X'X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} P_0^2(x_i) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^{n} P_1^2(x_i) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{i=1}^{n} P_2^2(x_i) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sum_{i=1}^{n} P_k^2(x_i) \end{bmatrix}$$

ullet Como a matriz X tem colunas ortogonais, segue que:

$$\mathbf{X'X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} P_0^2(x_i) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^{n} P_1^2(x_i) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{i=1}^{n} P_2^2(x_i) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sum_{i=1}^{n} P_k^2(x_i) \end{bmatrix}$$

• Desta forma, os estimadores de mínimos quadrados para os $\beta's$ ficam dados por:

$$\hat{\beta}_j = \frac{\sum_{i=1}^n P_j(x_i)y_i}{\sum_{i=1}^n P_j^2(x_i)}, \quad j = 0, 1, 2, ..., k$$

• No caso onde os níveis (valores amostrados) de x são igualmente espaçados e $P_0(x_i)$ é fixado em 1, i = 1, 2, ..., n, os primeiros cinco polinômios ortogonais são:

$$P_0(x_1) = 1$$

$$P_1(x_i) = \lambda_1 \left[\frac{x_i - \bar{x}}{d} \right]$$

$$P_2(x_i) = \lambda_2 \left[\left(\frac{x_i - \bar{x}}{d} \right)^2 - \left(\frac{n^2 - 1}{12} \right) \right]$$

$$P_3(x_i) = \lambda_3 \left[\left(\frac{x_i - \bar{x}}{d} \right)^3 - \left(\frac{x_i - \bar{x}}{d} \right) \left(\frac{3n^2 - 7}{20} \right) \right]$$

$$P_4(x_i) = \lambda_4 \left[\left(\frac{x_i - \bar{x}}{d} \right)^4 - \left(\frac{x_i - \bar{x}}{d} \right) \left(\frac{3n^2 - 13}{14} \right) + \frac{3(n^2 - 1)(n^2 - 9)}{560} \right]$$

onde d é a diferença entre os valores sucessivos de x e os λs são constantes para garantir que os polinômios tenham valores inteiros.

 Nesta ilustração, vamos analisar dados de um inventário realizado no estoque de uma empresa.

 Nesta ilustração, vamos analisar dados de um inventário realizado no estoque de uma empresa.

• As variáveis são as seguintes:

 Nesta ilustração, vamos analisar dados de um inventário realizado no estoque de uma empresa.

- As variáveis são as seguintes:
 - Quantidade: Número de itens reabastecidos;

 Nesta ilustração, vamos analisar dados de um inventário realizado no estoque de uma empresa.

- As variáveis são as seguintes:
 - Quantidade: Número de itens reabastecidos;
 - Custo: Custo médio anual de estocagem (resposta).

 Nesta ilustração, vamos analisar dados de um inventário realizado no estoque de uma empresa.

- As variáveis são as seguintes:
 - Quantidade: Número de itens reabastecidos;
 - Custo: Custo médio anual de estocagem (resposta).

• Os dados apresentados na sequência exibem uma relação claramente quadrática entre o custo médio de estocagem e a quantidade de itens reabastecidos.

Tabela 2: Dados de inventário

Quantidade (x)	Custo (y)
50	335
75	326
100	316
125	313
150	311
175	314
200	318
225	328
250	337
275	345

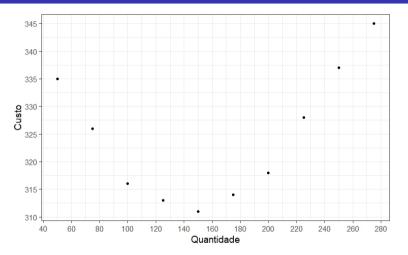


Figura 5: Custo médio de estocagem versus quantidade de itens reabastecidos

• Vamos ajustar um modelo de regressão polinomial de segunda ordem (inicialmente, não ortogonal), definido por:

• Vamos ajustar um modelo de regressão polinomial de segunda ordem (inicialmente, não ortogonal), definido por:

$$\texttt{Custo} = \beta_0 + \beta_1 \texttt{Quant} + \beta_2 \texttt{Quant}^2 + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

• Vamos ajustar um modelo de regressão polinomial de segunda ordem (inicialmente, não ortogonal), definido por:

$$\texttt{Custo} = \beta_0 + \beta_1 \texttt{Quant} + \beta_2 \texttt{Quant}^2 + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

• Ou, de maneira equivalente:

• Vamos ajustar um modelo de regressão polinomial de segunda ordem (inicialmente, não ortogonal), definido por:

$$\texttt{Custo} = \beta_0 + \beta_1 \texttt{Quant} + \beta_2 \texttt{Quant}^2 + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

• Ou, de maneira equivalente:

$$\texttt{Custo|Quant} \sim \mathrm{N}\left(\mu_{\texttt{Quant}}, \sigma^2\right)$$

$$\mu_{\mathtt{Quant}} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{Quant} + \beta_2 \mathtt{Quant}^2$$

• Matriz do modelo:

• Matriz do modelo:

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & 50 & 50^2 = 2500 \\ 1 & 75 & 75^2 = 5625 \\ 1 & 100 & 100^2 = 10000 \\ 1 & 125 & 125^2 = 15625 \\ 1 & 150 & 150^2 = 22500 \\ 1 & 175 & 175^2 = 30625 \\ 1 & 200 & 200^2 = 40000 \\ 1 & 225 & 225^2 = 50625 \\ 1 & 250 & 250^2 = 62500 \\ 1 & 275 & 275^2 = 75625 \end{bmatrix}$$

ullet A correlação linear entre Quantidade e Quantidade é igual a 0.98.

• A correlação linear entre Quantidade e Quantidade² é igual a 0.98.

• No ajuste do modelo polinomial, o VIF para Quantidade e Quantidade² é de 27.41.

• A correlação linear entre Quantidade e Quantidade² é igual a 0.98.

• No ajuste do modelo polinomial, o VIF para Quantidade e Quantidade² é de 27.41.

• Desta forma, o modelo ajustado está fortemente suscetível aos problemas da multicolinearidade.

• O modelo de regressão polinomial (não ortogonal) de segunda ordem, ajustado pelo método de mínimos quadrados, é o seguinte:

• O modelo de regressão polinomial (não ortogonal) de segunda ordem, ajustado pelo método de mínimos quadrados, é o seguinte:

$$\widehat{\mathtt{Custo}} = 362.17 - 0.67 \times \mathtt{Quant} + 0.0022 \times \mathtt{Quant}^2$$

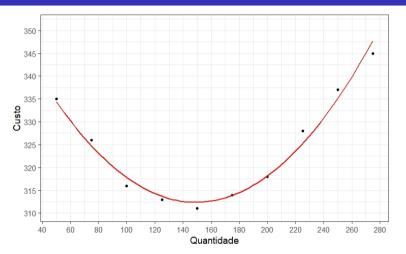


Figura 6: Custo médio de estocagem versus quantidade de itens reabastecidos com regressão polinomial ajustada

• Vamos agora considerar o modelo de regressão polinomial ortogonal de segunda ordem:

• Vamos agora considerar o modelo de regressão polinomial ortogonal de segunda ordem:

$$\mathtt{Custo} = \beta_0 P_0(\mathtt{Quant}) + \beta_1 P_1(\mathtt{Quant}) + \beta_2 P_2(\mathtt{Quant}) + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$$

Tabela 3: Coeficientes dos polinômios ortogonais para os dados do inventário

i	$P_0(x_i)$	$P_1(x_i)$	$P_2(x_i)$
1	1	-9	6
2	1	-7	2
3	1	-5	-1
4	1	-3	-3
5	1	-1	-4
6	1	1	-4
7	1	3	-3
8	1	5	-1
9	1	7	2
10	1	9	6
	$\sum_{i=1}^{10} P_0^2(x_i) = 10$	$\sum_{i=1}^{10} P_1^2(x_i) = 330$ $\lambda_1 = 2$	$\sum_{i=1}^{10} P_2^2(x_i) = 132$
		$\lambda_1 = 2$	$\lambda_2 = 1/2$

• Neste caso,

$$\mathbf{X'X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{10} P_0^2(x_i) & 0 & 0\\ 0 & \sum_{i=1}^{10} P_1^2(x_i) & 0\\ 0 & 0 & \sum_{i=1}^{10} P_2^2(x_i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0\\ 0 & 330 & 0\\ 0 & 0 & 132 \end{bmatrix}$$

• Neste caso,

$$\mathbf{X'X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{10} P_0^2(x_i) & 0 & 0\\ 0 & \sum_{i=1}^{10} P_1^2(x_i) & 0\\ 0 & 0 & \sum_{i=1}^{10} P_2^2(x_i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0\\ 0 & 330 & 0\\ 0 & 0 & 132 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X'y} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} P_0(x_i) y_i \\ \sum_{i=1}^{n} P_1(x_i) y_i \\ \sum_{i=1}^{n} P_2(x_i) y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3243 \\ 245 \\ 369 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \frac{1}{10} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{330} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{132} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 3243\\ 245\\ 369 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 324.30\\ 0.74\\ 2.79 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'y} = \begin{bmatrix} \frac{1}{10} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{330} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{132} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 3243\\ 245\\ 369 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 324.30\\ 0.74\\ 2.79 \end{bmatrix}$$

• Logo, o modelo ajustado fica dado por:

$$\widehat{\mathtt{Custo}} = 324.30 + 0.7424 \times P_1(\mathtt{Quant}) + 2.7955 \times P_2(\mathtt{Quant})$$

Modelos polinomiais em duas ou mais variáveis

Modelos polinomiais em duas ou mais variáveis

 Modelos polinomiais podem ser estendidos para o caso de duas ou mais variáveis explicativas.

Modelos polinomiais em duas ou mais variáveis

- Modelos polinomiais podem ser estendidos para o caso de duas ou mais variáveis explicativas.
- Por exemplo, um modelo polinomial de segunda ordem definido em duas variáveis é dado por:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 + \epsilon,$$

com $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

Modelos polinomiais em duas ou mais variáveis

- Modelos polinomiais podem ser estendidos para o caso de duas ou mais variáveis explicativas.
- Por exemplo, um modelo polinomial de segunda ordem definido em duas variáveis é dado por:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 + \epsilon,$$

com $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

• Neste caso, é comum chamar a representação gráfica de E(y|x) de superfície de resposta:

$$E(y|\mathbf{x}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2$$

 Nesta aplicação vamos considerar a base de dados sat disponível na biblioteca faraway do R.

 Nesta aplicação vamos considerar a base de dados sat disponível na biblioteca faraway do R.

• O objetivo é ilustrar uma análise de regressão polinomial envolvendo duas variáveis explicativas.

 Nesta aplicação vamos considerar a base de dados sat disponível na biblioteca faraway do R.

 O objetivo é ilustrar uma análise de regressão polinomial envolvendo duas variáveis explicativas.

• Os dados referem-se a indicadores de gastos com educação pública e resultados de testes estudantis nos 50 estados norte-americanos no período 1994-95.

• As variáveis consideradas na análise são as seguintes:

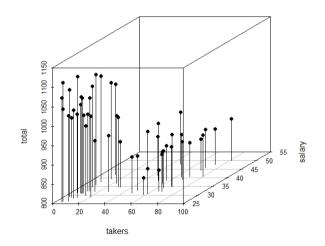
- As variáveis consideradas na análise são as seguintes:
 - total: Escore médio dos estudantes no SAT (Scholastic Aptitude Test);

- As variáveis consideradas na análise são as seguintes:
 - total: Escore médio dos estudantes no SAT (Scholastic Aptitude Test);
 - takers: Porcentagem de estudantes elegíveis que realizaram o SAT;

- As variáveis consideradas na análise são as seguintes:
 - total: Escore médio dos estudantes no SAT (Scholastic Aptitude Test);
 - takers: Porcentagem de estudantes elegíveis que realizaram o SAT;
 - salary: Salário médio estimado dos professores do ensino básico.

- As variáveis consideradas na análise são as seguintes:
 - total: Escore médio dos estudantes no SAT (Scholastic Aptitude Test);
 - takers: Porcentagem de estudantes elegíveis que realizaram o SAT;
 - salary: Salário médio estimado dos professores do ensino básico.

• O objetivo é ajustar um modelo de regressão que explique o desempenho dos estudantes (total) em função das outras duas variáveis (takers e salary).



• Diferentes modelos de regressão linear serão ajustados, considerando (ou não):

- Diferentes modelos de regressão linear serão ajustados, considerando (ou não):
 - Efeito quadrático de takers;

- Diferentes modelos de regressão linear serão ajustados, considerando (ou não):
 - Efeito quadrático de takers;
 - Efeito quadrático de salary;

- Diferentes modelos de regressão linear serão ajustados, considerando (ou não):
 - Efeito quadrático de takers;
 - Efeito quadrático de salary;
 - Efeito de interação entre takers e salary.

- Diferentes modelos de regressão linear serão ajustados, considerando (ou não):
 - Efeito quadrático de takers;
 - Efeito quadrático de salary;
 - Efeito de interação entre takers e salary.

Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary e com efeito de interação:

- Diferentes modelos de regressão linear serão ajustados, considerando (ou não):
 - Efeito quadrático de takers;
 - Efeito quadrático de salary;
 - Efeito de interação entre takers e salary.

Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary e com efeito de interação:

$$\mathtt{total} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{takers} + \beta_2 \mathtt{salary} + \beta_3 \mathtt{takers}^2 + \beta_4 \mathtt{salary}^2 + \beta_5 \mathtt{takers} \times \mathtt{salary} + \epsilon$$

Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary:

2 Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary:

$$\mathtt{total} = eta_0 + eta_1 \mathtt{takers} + eta_2 \mathtt{salary} + eta_3 \mathtt{takers}^2 + eta_4 \mathtt{salary}^2 + \epsilon$$

2 Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary:

$$\mathtt{total} = eta_0 + eta_1 \mathtt{takers} + eta_2 \mathtt{salary} + eta_3 \mathtt{takers}^2 + eta_4 \mathtt{salary}^2 + \epsilon$$

Modelo com efeito quadrático de takers:

2 Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary:

$$\mathtt{total} = eta_0 + eta_1 \mathtt{takers} + eta_2 \mathtt{salary} + eta_3 \mathtt{takers}^2 + eta_4 \mathtt{salary}^2 + \epsilon$$

Modelo com efeito quadrático de takers:

$$total = \beta_0 + \beta_1 takers + \beta_2 salary + \beta_3 takers^2 + \epsilon$$

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

$$total = \beta_0 + \beta_1 takers + \beta_2 salary + \epsilon$$

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

$$total = \beta_0 + \beta_1 takers + \beta_2 salary + \epsilon$$

Modelo com efeitos lineares de takers e salary e com efeito de interação:

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

$$total = \beta_0 + \beta_1 takers + \beta_2 salary + \epsilon$$

Modelo com efeitos lineares de takers e salary e com efeito de interação:

$$\mathtt{total} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{takers} + \beta_2 \mathtt{salary} + \beta_3 \mathtt{takers} \times \mathtt{salary} + \epsilon$$

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

$$total = \beta_0 + \beta_1 takers + \beta_2 salary + \epsilon$$

Modelo com efeitos lineares de takers e salary e com efeito de interação:

$$\mathtt{total} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{takers} + \beta_2 \mathtt{salary} + \beta_3 \mathtt{takers} \times \mathtt{salary} + \epsilon$$

• Em todos os casos os erros são independentes e identicamente distribuídos $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

$$total = \beta_0 + \beta_1 takers + \beta_2 salary + \epsilon$$

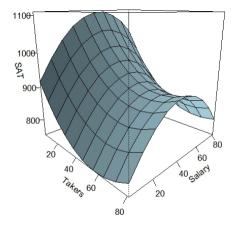
Modelo com efeitos lineares de takers e salary e com efeito de interação:

$$\mathtt{total} = \beta_0 + \beta_1 \mathtt{takers} + \beta_2 \mathtt{salary} + \beta_3 \mathtt{takers} \times \mathtt{salary} + \epsilon$$

- Em todos os casos os erros são independentes e identicamente distribuídos $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$.
- Na sequência são apresentados os modelos ajustados.

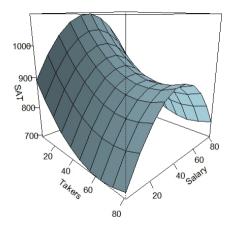
Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary e com efeito de interação:

 $\widehat{\mathtt{total}} = 909.66 - 6.612 \times \mathtt{takers} + 8.678 \times \mathtt{salary} + 0.058 \times \mathtt{takers}^2 - 0.082 \times \mathtt{salary}^2 - 0.018 \times \mathtt{takers} \times \mathtt{salary} + 0.058 \times \mathtt{takers}^2 + 0.082 \times \mathtt{salary}^2 + 0.018 \times \mathtt{takers} \times \mathtt{salary} + 0.018$



Modelo com efeitos quadráticos de takers e salary:

$$\widehat{\mathtt{total}} = 875.72 - 7.081 \times \mathtt{takers} + 11.114 \times \mathtt{salary} + 0.056 \times \mathtt{takers}^2 - 0.125 \times \mathtt{salary}^2$$



Modelo com efeito quadrático de takers:

$$\widehat{\mathtt{total}} = 1039 - 6.646 \times \mathtt{takers} + 1.803 \times \mathtt{salary} + 0.051 \times \mathtt{takers}^2$$

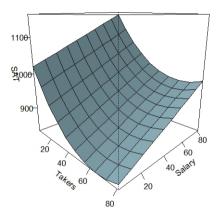
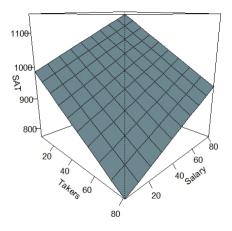


Figura 10: Superfície de resposta para o modelo com efeito quadrático de takers

Modelo com efeitos lineares de takers e salary:

$$\widehat{\mathtt{total}} = 987.9 - 2.778 \times \mathtt{takers} + 2.180 \times \mathtt{salary}$$



Modelo com efeitos lineares de takers e salary e com efeito de interação:

$$\widehat{\mathtt{total}} = 1082 - 5.026 \times \mathtt{takers} - 0.719 \times \mathtt{salary} + 0.064 \times \mathtt{takers} \times \mathtt{salary}$$

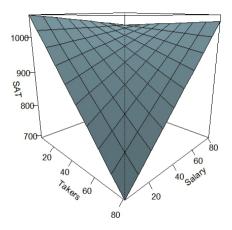


Tabela 4: Resumo do modelo ajustado com os efeitos quadráticos de takers e salary e com efeito de interação

	Estimate	Std. Error	t value	$\Pr(> t)$
(Intercept)	909.6693	161.5353	5.63	0.0000
takers	-6.6127	1.4411	-4.59	0.0000
salary	8.6787	9.8935	0.88	0.3851
${ t takers}^2$	0.0583	0.0115	5.06	0.0000
\mathtt{salary}^2	-0.0820	0.1513	-0.54	0.5907
$\texttt{takers} \times \texttt{salary}$	-0.0182	0.0467	-0.39	0.6991

• Com base no resumo do modelo ajustado com efeitos quadráticos de takers e salary e efeito de interação, concluímos que:

- Com base no resumo do modelo ajustado com efeitos quadráticos de takers e salary e efeito de interação, concluímos que:
- lacktriangle O termo de interação não é estatisticamente significativo (p=0.6991), de forma que pode ser removido do modelo;

- Com base no resumo do modelo ajustado com efeitos quadráticos de takers e salary e efeito de interação, concluímos que:
- O termo de interação não é estatisticamente significativo (p = 0.6991), de forma que pode ser removido do modelo;
- ② O efeito quadrático de salary também não é significativo (p=0.5907), ao contrário do efeito quadrático de takers (p<0.0001);

- Com base no resumo do modelo ajustado com efeitos quadráticos de takers e salary e efeito de interação, concluímos que:
- O termo de interação não é estatisticamente significativo (p = 0.6991), de forma que pode ser removido do modelo;
- ② O efeito quadrático de salary também não é significativo (p=0.5907), ao contrário do efeito quadrático de takers (p<0.0001);
- O Desta forma, baseado nos resultados apresentados, o modelo poderia apenas conter o efeito quadrático de takers. Adicionalmente, poderia se avaliar a remoção do efeito de salary (exercício).