



# Matemática Computacional

Departamento de Matemática Instituto Superior de Engenharia do Porto

2° Semestre 20-21

### Conteúdo

- 1 Regressão Linear Simples
- 2 Inferências
- 3 Anova
- 4 Regressão linear simples no Excel

# Regressão Linear Simples

### **RLS**

No processo de tomada de decisões é, muitas vezes, necessário fazer previsões.

É muito mais fácil tomar decisões sobre determinada variável , quando é possível estabelecer uma relação entre esta (a variável dependente) e uma outra variável (variável independente ou explicativa) cujo comportamento se conhece.

# Regressão Linear Simples

### Exemplo

Um diretor de pessoal de uma empresa descobre que existe uma lógica estreita entre a produtividade dos operários e os resultados de um teste de aptidões efetuado antes da sua entrada.

A partir do momento em que o diretor de pessoal estabelece o tipo de relação existente entre as duas variáveis - produtividade dos operários e resultados do teste de aptidões a que foram submetidos - poderá fazer previsões sobre a produtividade de um novo candidato com base no resultado do teste.

# Regressão Linear Simples

### Modelo matemático

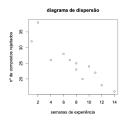
$$Y_i = E(Y|x_i) + \varepsilon_i$$
$$Y_i = a + bx_i + \varepsilon_i$$

■  $E(Y|x_i) = a + bx_i$  - componente determinístico.

Inferências

- $x_i(constante)$  valor da observação i da variável independente.
- Y<sub>i</sub> -variável aleatória dependente.
- a-ordenada na origem e b-declive da reta são os parâmetros de regressão a determinar.
- $\mathbf{E}_i \sim N(0, \sigma^2)$  erro da observação i
- Os erros  $\varepsilon_i$  assumem-se estatisticamente independentes.

Os dados onde vamos aplicar a RLS são tabelas de pares de valores. Cada observação é um par de valores, um para cada variável. Construimos o diagrama de dispersão das obervações.



Semanas de	Compost
experiencia	rejeitados
9	20
6	28
14	16
8	23
12	18
10	24
4	26
2	38
11	22
1	32
8	25

Há uma forte indicação de que o conjunto de pontos se dispersa aleatoriamente sobre uma reta

Para estimar a e b habitualmente utilizamos o Método dos Mínimos Quadrados (MMQ).

Inferências

- Estimativas que minimizam a soma dos quadrados dos erros ou desvios verticais entre  $\hat{y}_i$  e  $y_i$ . Estes erros são os resíduos  $\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i$ . Pretende-se minimizar a soma dos quadrados dos resíduos SE.

$$SE = \sum_{i=1}^{n} \hat{e_i}^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y_i})^2 = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (\hat{a} + \hat{b}x_i)]^2$$

# Estimação dos parâmetros

Mostra-se que os minimizantes de SE são obtidos igualando a 0 as derivadas parciais de SE em ordem a  $\hat{a}$  e a  $\hat{b}$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial SE}{\partial \hat{a}} = -2\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{a} - \hat{b}x_i) = 0\\ \frac{\partial SE}{\partial \hat{b}} = -2\sum_{i=1}^{n} x_i (y_i - \hat{a} - \hat{b}x_i) = 0 \end{cases}$$

Obtemos as equações normais

$$\begin{cases} n\hat{a} + \hat{b} \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \hat{a} \sum_{i=1}^{n} x_i + \hat{b} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{cases}$$

Resolvendo o sistema de equações normais em ordem a  $\hat{a}$  e a b, vem

Inferências

$$\begin{cases} \hat{b} = \frac{n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \\ \hat{a} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i - \hat{b} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \end{cases}$$

 $\hat{a}$  e  $\hat{b}$ , podem ser apresentados em função de somas de quadrados e somas cruzadas.

Inferências

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2$$

$$S_{yy} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - n\bar{y}^2$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}$$

As somas anteriormente definidas, permitem reescrever:

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$$

$$\hat{b} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$$

$$SE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = S_{yy} - \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}} = S_{yy} - \hat{b}S_{xy} = S_{yy} - \hat{b}^2 S_{xx}$$

# Coeficientes de Determinação e Correlação

Inferências

### Coeficiente de Determinação

O valor  $r^2$  da estatística

$$R^2 = \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}S_{yy}}$$

é o coeficiente de determinação e  $0 < r^2 < 1$ 

- $r^2 = 1$  todas as observações encontram-se sobre a reta de regressão (ajuste perfeito).
- $r^2 = 0$  reta de regressão horizontal (ajuste inútil)
- $ightharpoonup r^2 \approxeq 1$  o grau de linearidade entre x e Y aumenta.

# Coeficientes de Determinação e Correlação

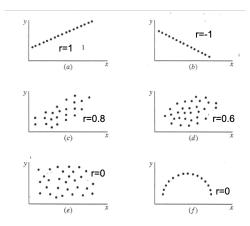
### Coeficiente de Correlação amostral

O valor r da estatística

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

é o coeficiente de correlação amostral e  $-1 \le r \le 1$ Obs: O sinal de r é o sinal de  $\hat{b}$ 

# Coeficientes de Determinação e Correlação



# Exemplo

25 pares de observações onde

Y =quantidade de vapor usado por mês

X = temperatura em graus Farenheit

Nº obs.	Υ	х	Nº obs.	Y	Х
	10.98	35.3	12	11.88	28.1
1			13		
2	11.13	29.7	14	9.57	39.1
3	12.51	30.8	15	10.94	46.8
4	8.40	58.8	16	9.58	48.5
5	9.27	61.4	17	10.09	59.3
6	8.73	71.3	18	8.11	70.0
7	6.36	74.4	19	6.83	70.0
8	8.50	76.7	20	8.88	74.5
9	7.82	70.7	21	7.68	72.1
10	9.14	57.5	22	8.47	58.1
11	8.24	46.4	23	8.86	44.6
12	12.19	28.9	24	10.36	33.4
			25	11.08	28.6

# Exemplo

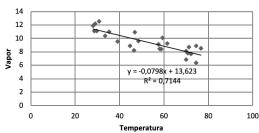
- $\bar{x} = 52.60 \quad \bar{y} = 9.424$
- $S_{xy} = \sum_{i=1}^{25} x_i y_i 25 \times \bar{x} \bar{y} = -571.128$
- $S_{xx} = \sum_{i=1}^{25} x_i^2 25 \times \bar{x}^2 = 7154.42$
- $S_{yy} = \sum_{i=1}^{25} y_i^2 25 \times \bar{y}^2 = 63.8158$
- $r^2 = 0.7144$
- $\hat{a} = 13.623 \quad \hat{b} = -0.0798$

Equação da reta de regressão dos mínimos quadrados

$$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x = 13.6230 - 0.0798x$$

# Exemplo

### Gráfico de dispersão



# Distribuição Amostral de $\hat{Y}_0$

Segundo o modelo de regressão linear

$$Y_i \sim N(a + bx_i, \sigma^2), i = 1, 2, ..., n$$

A distribuição amostral de  $\hat{Y_0} \colon \hat{Y_0} \sim N(\mu_{\hat{Y}_0}, \sigma^2_{\hat{Y}_0})$  onde

Inferências

$$\mu_{\hat{Y}_0,} = E(Y_0) = a + bx_0 \text{ e } \sigma_{\hat{Y}_0}^2 = \sigma^2(Y_0) = \sigma^2[\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}]$$

Como habitualmente  $\sigma^2_{\hat{Y}_0}$  é desconhecida, substituímos na expressão anterior  $\sigma^2$  por  $S^2$  e obtemos

$$S_{\hat{Y}_0}^2 = S^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]$$

É possível mostrar que  $T = \frac{\hat{Y_0} - E(Y_0)}{S_{\hat{Y_0}}} \sim t_{n-2}.$ 

## Intervalo de confiança de $E(Y_0)$

O intervalo de confiança a  $(1-\alpha) \times 100\%$  para a **resposta média**  $E(Y_0)$  dado um valor  $x_0$  é dado por

$$\hat{y}_0 - t_c s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}, \hat{y}_0 + t_c s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

onde 
$$s^2=rac{1}{n-2}\sum\limits_{i=1}^n(y_i-\hat{y_i})^2$$
 e  $t_c=t_{1-lpha/2}$ 

No caso de se pretender estimar o verdadeiro valor de Y para um dado valor da variável explicativa  $x_0$ , recorre-se a um resultado semelhante ao anterior.

$$T = \frac{\hat{Y}_0 - Y_0}{S\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}} \sim t_{n-2}.$$

### Intervalo de previsão(confiança) de $Y_0$

O intervalo de previsão a  $(1-\alpha) \times 100\%$  da resposta  $Y_0$  dado um valor  $x_0$  é dado por

$$\hat{y}_0 - t_c s \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}, \hat{y}_0 + t_c s \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

onde 
$$s^2=rac{1}{n-2}\sum\limits_{i=1}^n(y_i-\hat{y_i})^2$$
 e  $t_c=t_{1-lpha/2}$ 

O mesmo se pode aplicar aos parâmetros  $\hat{a}$  e  $\hat{b}$ .

$$T_a = \frac{\hat{a} - a}{S\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}} \sim t_{n-2}$$

### Intervalo de confiança do parâmetro a

O intervalo de confiança a  $(1-\alpha) \times 100\%$  para o parâmetro a é dado por

$$\hat{a} - t_c s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}, \hat{a} + t_c s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}$$

onde 
$$s^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y_i})^2$$
 e  $t_c = t_{1-\alpha/2}$ 

$$T_b = \frac{\hat{b} - b}{S/\sqrt{S_{xx}}} \sim t_{n-2}$$

Intervalo de confiança do parâmetro b

O intervalo de confiança a  $(1-\alpha) \times 100\%$  para o parâmetro b é dado por

$$\left] \hat{b} - t_c s \sqrt{\frac{1}{S_{xx}}}, \hat{b} - t_c s \sqrt{\frac{1}{S_{xx}}} \right[$$

onde 
$$s^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y_i})^2$$
 e  $t_c = t_{1-\alpha/2}$ 

# Testes de Hipóteses

Testes estatísticos sobre os parâmetros e a capacidade explicativa do modelo. Por exemplo para o parâmetro a:

$$H_0: a = a_0 \ v.s. \ H_1: a \neq a_0$$

A estatística de teste a aplicar

$$T_a = \frac{\hat{a} - a_0}{S\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}} \sim t_{n-2}$$

Decisão:

Com um nível de significância lpha, rejeitar  $H_0$  quando

$$|t| > t_{1-\alpha/2}(n-2)$$

# Testes de Hipóteses

Para o parâmetro b:

$$H_0: b = b_0 \ v.s. \ H_1: b \neq b_0$$

A estatística de teste a aplicar

$$T_b = \frac{\hat{b} - b_0}{S/\sqrt{S_{xx}}} \sim t_{n-2}$$

Decisão:

Com um nível de significância  $\alpha$ , rejeitar  $H_0$  quando  $|t| > t_{1-\alpha/2}(n-2)$ 

# Tabela t-student

1	Tabela da I	Distribuiçã	io t-Studer	nt						
Valores Críticos t ( p , n )		p =	P(T>t)							
Percentis			1-p =	P(T≤t)						
р	0,005	0,01	0,025	0,05	0,1	0,2	0,25	0,3	0,4	0,45
1-p	0,995	0,99	0,975	0,95	0,9	0,8	0,75	0,7	0,6	0,55
1	63,657	31,821	12,706	6,314	3,078	1,376	1,000	0,727	0,325	0,158
2	9,925	6,965	4,303	2,920	1,886	1,061	0,816	0,617	0,289	0,142
3	5,841	4,541	3,182	2,353	1,638	0,978	0,765	0,584	0,277	0,137
4	4,604	3,747	2,776	2,132	1,533	0,941	0,741	0,569	0,271	0,134
5	4,032	3,365	2,571	2,015	1,476	0,920	0,727	0,559	0,267	0,132
6	3,707	3,143	2,447	1,943	1,440	0,906	0,718	0,553	0,265	0,131
7	3,499	2,998	2,365	1,895	1,415	0,896	0,711	0,549	0,263	0,130
8	3,355	2,896	2,306	1,860	1,397	0,889	0,706	0,546	0,262	0,130
9	3,250	2,821	2,262	1,833	1,383	0,883	0,703	0,543	0,261	0,129
10	3,169	2,764	2,228	1,812	1,372	0,879	0,700	0,542	0,260	0,129
11	3,106	2,718	2,201	1,796	1,363	0,876	0,697	0,540	0,260	0,129
12	3,055	2,681	2,179	1,782	1,356	0,873	0,695	0,539	0,259	0,128
13	3,012	2,650	2,160	1,771	1,350	0,870	0,694	0,538	0,259	0,128
14	2,977	2,624	2,145	1,761	1,345	0,868	0,692	0,537	0,258	0,128
15	2,947	2,602	2,131	1,753	1,341	0,866	0,691	0,536	0,258	0,128
16	2,921	2,583	2,120	1,746	1,337	0,865	0,690	0,535	0,258	0,128
17	2,898	2,567	2,110	1,740	1,333	0,863	0,689	0,534	0,257	0,128
18	2,878	2,552	2,101	1,734	1,330	0,862	0,688	0,534	0,257	0,127
19	2,861	2,539	2,093	1,729	1,328	0,861	0,688	0,533	0,257	0,127
20	2,845	2,528	2,086	1,725	1,325	0,860	0,687	0,533	0,257	0,127
21	2,831	2,518	2,080	1,721	1,323	0,859	0,686	0,532	0,257	0,127
22	2,819	2,508	2,074	1,717	1,321	0,858	0,686	0,532	0,256	0,127
23	2,807	2,500	2,069	1,714	1,319	0,858	0,685	0,532	0,256	0,127
24	2,797	2,492	2,064	1,711	1,318	0,857	0,685	0,531	0,256	0,127
25	2,787	2,485	2,060	1,708	1,316	0,856	0,684	0,531	0,256	0,127

## Exemplo I.C.

# Intervalo de confiança a 95% para a quantidade média de vapor quando a temperatura é de 35graus

Equação da reta de regressão dos mínimos quadrados

$$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x = 13.6230 - 0.0798x$$

$$\hat{y}(35) = 13.6230 - 0.0798 \times 35 \approx 10.83$$

O intervalo de confiança a  $(1-\alpha) \times 100\%$  para a **resposta média**  $E(Y_0)$ , dado um valor  $x_0$  é dado por

$$\hat{y}_0 - t_c s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}, \hat{y}_0 + t_c s \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$$

onde 
$$s^2=\frac{1}{n-2}\sum\limits_{i=1}^n(y_i-\hat{y_i})^2$$
 e  $t_c=t_{1-\alpha/2}$ 

# Exemplo I.C.

- $\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x = 13.6230 0.0798x$  $\hat{y}(35) = 13.6230 0.0798 \times 35 \approx 10.83$
- $I.C.(E(Y_0)) = ]10.83 \triangle, 10.83 + \triangle[$
- $t_{0.975} = 2.07$
- s = 0.89
- $\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 \bar{x})^2}{S_{xx}}} = 0.29$

$$I.C.(E(Y_0)) = ]10.30, 11.36[$$

# Exemplo T.H.

Verificar se é possivel admitir que  $a \neq 0$  usando um nível de significância de 5%.

$$H_0: a = 0 \ v.s. \ H_1: a \neq 0$$

A estatística de teste a aplicar

$$T_a = \frac{\hat{a} - a_0}{S\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}} \sim t_{n-2}$$

$$t_a = \frac{13.6230}{0.89 \times \sqrt{\frac{1}{25} + \frac{52.6^2}{7154.42}}} = 23.43$$

Decisão:

Como  $t_a>2.07$ , rejeita-se  $H_0$ . O teste é conclusivo, o que quer dizer que a um nível de significância de 5% há evidência estatística suficiente para se afirmar que a ordenada na origem é diferente de zero.

$$\hat{Y} = \hat{a} + \hat{b}X$$

Método de análise da qualidade do modelo de regressão baseado na divisão da variação total de Y (variável dependente).

### Desvio total

$$Y_i - \bar{Y} = (\hat{Y}_i - \bar{Y}) + (Y_i - \hat{Y}_i)$$

Desvio total = Desvio explicado + Desvio não explicado

### Variação total

$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 + \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{Y}_i)^2$$

Variação total = Variação explicada + Variação não explicada

### Variação total

Variabilidade total do conjunto de observações medida pela soma dos quadrados dos desvios totais

$$ST = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2$$

### Variação explicada

A soma dos quadrados dos desvios explicados pela regressão

$$SR = \sum_{i=1}^{n} \left( \hat{Y}_i - \bar{Y} \right)^2$$

### Variação não explicada

A soma dos quadrados dos resíduos (erros de ajuste)

$$SE = \sum_{i=1}^{n} \left( Y_i - \hat{Y}_i \right)^2$$

$$ST = SR + SE$$

SE - parte da variabilidade das observações de Y que se mantem mesmo conhecendo o valor de  $\mathbf{x}$ .

SR - parte da variabilidade das observações de Y que é eliminada quando se usa o conhecimento da variável independente para prever Y.

ST - variabilidade total das observações de Y.

### Graus de liberdade

$$ST = SR + SE$$

ST - n-1 graus de liberdade resultantes de n desvios  $Y_i-\bar{Y}$  menos uma restrição  $\sum\limits_{i=1}^n \left(Y_i-\bar{Y}\right)=0$ 

SR - 1 grau de liberdade resultante de 2 estimadores de a e b menos uma restrição  $\hat{a}=\bar{Y}-\hat{b}\bar{x}$ 

SE - n-2 graus de liberdade resultantes de n resíduos  $Y_i - \hat{Y}_i$  menos duas restrições para a e b.

$$q.l.(ST) = q.l.(SR) + q.l.(SE)$$

Os cálculos ficam sintetizados numa tabela:

Fonte de	Soma de	Graus de	Média	Estatística de
variação	quadrados	liberdade	quadrática	de teste f
Regressão	SR	1	$MSR = \frac{SR}{1}$	$\frac{MSR}{MSE}$
Erro	SE	n-2	$MSE = \frac{SE}{n-2}$	
Total	ST	n-1		

F- distribuição F de Snedecor  $F_{\alpha,1,n-2}$ 

Teste da significância da regressão

$$H_0: b = b_0 \ v.s. \ H_1: b \neq b_0$$

Estatística de teste:  $F = \frac{MSR}{MSE}$ 

Decisão: Rejeita-se  $H_0$  se  $f_{obs} > f_{\alpha,1,n-2}$ .

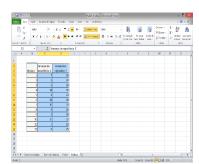
Neste caso, podemos concluir que é aceitável admitir que a função de regressão é linear.

F- distribuição F de Snedecor  $F_{\alpha,1,n-2}$ 

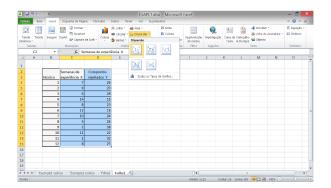
Passo 1. Introduza os dados numa folha excel

	Semanas de	Compostos
técnico	experiência X	rejeitados Y
1	7	26
2	9	20
3	6	28
4	14	16
5	8	23
6	12	18
7	10	24
8	4	26
9	2	38
10	11	22
11	1	32
12	8	25

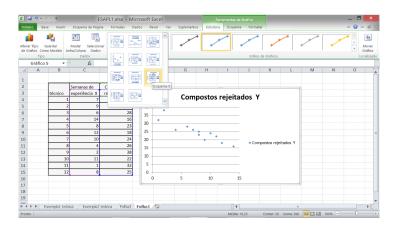
Passo 2. Selecione as colunas X e Y



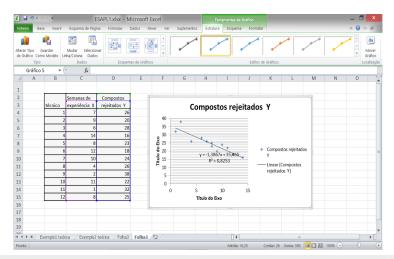
Passo 3. Selecione Inserir --- gráfico ---- Dispersão



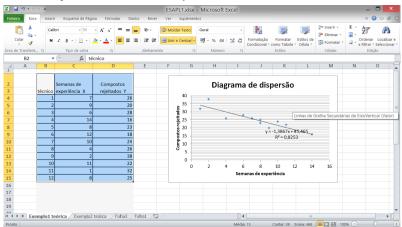
Passo 4. Dispersão --- esquema de gráficos ----esquema 9



Passo 5. Selecione os títulos dos eixos

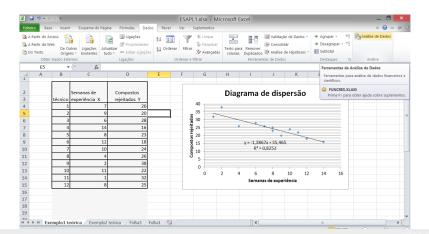


Passo 6. Apresente o gráfico de uma forma clara Reta de regressão e coeficiente de determinação



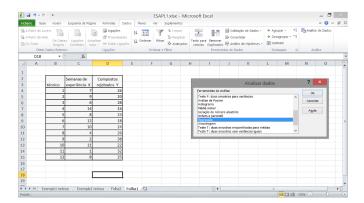
### Uso da ferramenta Análise de dados

Obs. Se esta ferramenta não estiver disponível, carregue o suplemento *Analyis ToolPack*. Selecione *Ficheiro-- Opções -- Suplementos -- Analyis Toolpak*.



### Uso da ferramenta Análise de dados

Análise de dados----Regressão

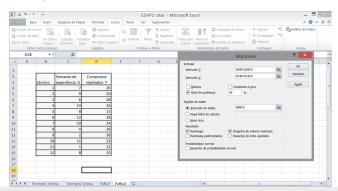


### Uso da ferramenta Análise de dados

Análise de dados----Regressão

Preencher caixa de diálogo de regressão

- Intervalo Y: selecione as células da coluna Y-compostos rejeitados
- Intervalo X: selecione as células da coluna X- semanas de experiência
- Residuais: Desenho de valores residuais
- Intervalo de saída: selecione uma célula qualquer da folha de cálculo, fora da tabela de valores, ou nova folha de cálculo



#### Uso da ferramenta Análise de dados

#### Sumário dos resultados $r^2 = 0.8253$

Tabela Anova  $r^2 = 0,8253$  $\hat{a} = 35,465$ 

 $\hat{a} = 35,465$   $I.C._{95\%}(a) = [31,6238;39,3059]$  $\hat{b} = -1,387$   $I.C._{95\%}(b) = [-1,8363;-0,9372]$ 

Obs: gl – graus de liberdade

SQ – soma de quadrados SR , SE e ST

