ME613 - Análise de Regressão

Parte 5

Samara F. Kiihl - IMECC - UNICAMP

Intervalo de confiança simultâneo

Inferência simultânea

Suponha que tenhamos interesse tanto em fazer inferência sobre β_0 quanto para β_1.

Vimos como construir um intervalo de, por exemplo, 95% de confiança para $\hat{\beta}_0$ e um intervalo de 95% de confiança para $\hat{\beta}_1$.

Mas, se utilizarmos esses intervalos de confiança individuais, não temos 95% de confiança para β_0 e β_1 conjuntamente.

Por exemplo, se essas inferências fossem independentes, teríamos $0.95^2 = 0.9025$ de confiança.

No caso, já vimos que $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ não são independentes, o que dificulta a determinação do verdadeiro nível de confiança.

Intervalo de confiança conjunto de Bonferroni

Relembrando:

1. Intervalo de confiança $100 \times (1 - \alpha)\%$ para β_0:

$$\hat{\beta}_0 \pm t_{n-2,\alpha/2}\sqrt{\widehat{Var}(\hat{\beta}_0)}$$

2. Intervalo de confiança $100 \times (1 - \alpha)\%$ para β_1:

$$\hat{\beta}_1 \pm t_{n-2,\alpha/2}\sqrt{\widehat{Var}(\hat{\beta}_1)}$$

Intervalo de confiança conjunto de Bonferroni

Seja A_1 o evento de que o intervalo 1 não contenha β_0. $P(A_1) = \alpha$.

Seja A_2 o evento de que o intervalo 2 não contenha β_1. $P(A_2) = \alpha$.

Qual a probabilidade de que ambos intervalos estejam corretos, isto é, $P(A_1^c \cap A_2^c)$?

$$P(A_1^c \cap A_2^c) = 1 - P(A_1 \cup A_2) = 1 - P(A_1) - P(A_2) + P(A_1 \cap A_2)$$

Desigualdade de Bonferroni:

$$\begin{aligned} P(A_1^c \cap A_2^c) &\geq 1 - P(A_1) - P(A_2) \\ &\geq 1 - 2\alpha \end{aligned}$$

Intervalo de confiança conjunto de Bonferroni

Para obter $100 \times (1 - \alpha)\%$ de confiança para β_0 e β_1 conjuntamente, segundo o procedimento de Bonferroni:

1. $$\hat{\beta}_0 \pm t_{n-2,\alpha/4}\sqrt{\widehat{Var}(\hat{\beta}_0)}$$
2. $$\hat{\beta}_1 \pm t_{n-2,\alpha/4}\sqrt{\widehat{Var}(\hat{\beta}_1)}$$

De maneira que:

$$\begin{aligned} P(A_1^c \cap A_2^c) &\geq 1 - P(A_1) - P(A_2) \\ &\geq 1 - \alpha/2 - \alpha/2 \\ &\geq 1 - \alpha \end{aligned}$$

Notação Matricial para Regressão

Vetores e Matrizes Aleatórios

Suponha que tenhamos um vetor aleatório $\mathbf{Y}$ em que $n = 3$:

$$\mathbf{Y}_{3\times 1} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \end{pmatrix}$$

$E(\mathbf{Y})$ é definida como:

$$E(\mathbf{Y})_{3\times 1} = \begin{pmatrix} E(Y_1) \\ E(Y_2) \\ E(Y_3) \end{pmatrix}$$

Se $\mathbf{Y}$ é uma matriz aleatória de dimensão $n \times p$:

$$E(\mathbf{Y})_{n\times p} = [E(Y_{ij})] \quad i = 1, \dots, n\,; j = 1 \dots, p$$

Matriz de Variância-Covariância de um Vetor Aleatório

Suponha que tenhamos um vetor aleatório $\mathbf{Y}$ em que $n = 3$:

$$\mathbf{Y}_{3\times 1} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \end{pmatrix}$$

A matriz de variância-covariância de $\mathbf{Y}$ é definida como:

$$Var(\mathbf{Y})_{3\times 3} = \begin{pmatrix} Var(Y_1) & Cov(Y_1, Y_2) & Cov(Y_1, Y_3) \\ Cov(Y_2, Y_1) & Var(Y_2) & Cov(Y_2, Y_3) \\ Cov(Y_3, Y_1) & Cov(Y_3, Y_2) & Var(Y_3) \end{pmatrix}$$

Matriz de variância-vovariância de um vetor aleatório

Em geral:

$$Var(\mathbf{Y}) = E[(\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y}))(\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y}))^T]$$

$$Var(\mathbf{Y})_{n\times n} = \begin{pmatrix} Var(Y_1) & Cov(Y_1, Y_2) & \dots & Cov(Y_1, Y_n) \\ Cov(Y_2, Y_1) & Var(Y_2) & \dots & Cov(Y_2, Y_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Cov(Y_n, Y_1) & Cov(Y_n, Y_2) & \dots & Var(Y_n) \end{pmatrix}$$

Propriedades básicas

Seja $\mathbf{W}$ um vetor aleatório obtido pela multiplicação do vetor aleatório $\mathbf{Y}$ e da matriz de constantes $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{W} = \mathbf{A}\mathbf{Y}\,.$$

Temos as seguintes propriedades:

$$E(\mathbf{A}) = \mathbf{A}$$

$$E(\mathbf{W}) = E(\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \mathbf{A}E(\mathbf{Y})$$

$$Var(\mathbf{Y}) = Var(\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \mathbf{A}Var(\mathbf{Y})\mathbf{A}^T$$

Distribuição Normal Multivariada

$$\mathbf{Y}_{p\times 1} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_p \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\mu}_{p\times 1} = E(\mathbf{Y})_{p\times 1} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E(Y_1) \\ E(Y_2) \\ \vdots \\ E(Y_p) \end{pmatrix}$$

Distribuição Normal Multivariada

$$\mathbf{\Sigma}_{p\times p} = \begin{pmatrix} Var(Y_1) & Cov(Y_1, Y_2) & \dots & Cov(Y_1, Y_p) \\ Cov(Y_2, Y_1) & Var(Y_2) & \dots & Cov(Y_2, Y_p) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Cov(Y_p, Y_1) & Cov(Y_n, Y_2) & \dots & Var(Y_p) \end{pmatrix}$$

Função de densidade da normal p-variada:

$$f(\mathbf{Y}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\mathbf{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu})^T\mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu})\right]$$

Regressão Linear Simples com notação matricial

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i \,, \quad \varepsilon_i \overset{iid}{\sim} \mathbf{N}(0, \sigma^2) \,, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$\mathbf{Y}_{n\times 1} = \mathbf{X}_{n\times 2}\boldsymbol{\beta}_{2\times 1} + \boldsymbol{\varepsilon}_{n\times 1} \,, \quad \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I})$$

$$\mathbf{Y}_{n\times 1} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X}_{n\times 2} = \begin{pmatrix} 1 & X_1 \\ 1 & X_2 \\ \vdots & \\ 1 & X_n \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\beta}_{2\times 1} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{n\times 1} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Regressão Linear Simples com notação matricial

$$E(\boldsymbol{\varepsilon})_{n\times 1} = \mathbf{0}_{n\times 1}$$

$$Var(\boldsymbol{\varepsilon})_{n\times n} = \sigma^2\mathbf{I}_{n\times n}$$

$$E(\mathbf{Y}) = E(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

$$Var(\mathbf{Y}) = \sigma^2\mathbf{I}$$

Mínimos Quadrados

Queremos encontrar $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ que minimiza:

$$
\begin{aligned}
S(\boldsymbol{\beta}) &= \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \\
&= \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\
&= \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - 2\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}
\end{aligned}
$$

$$
\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{Y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}
$$

Equação normal: $\mathbf{X}^T \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$

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

Mínimos Quadrados

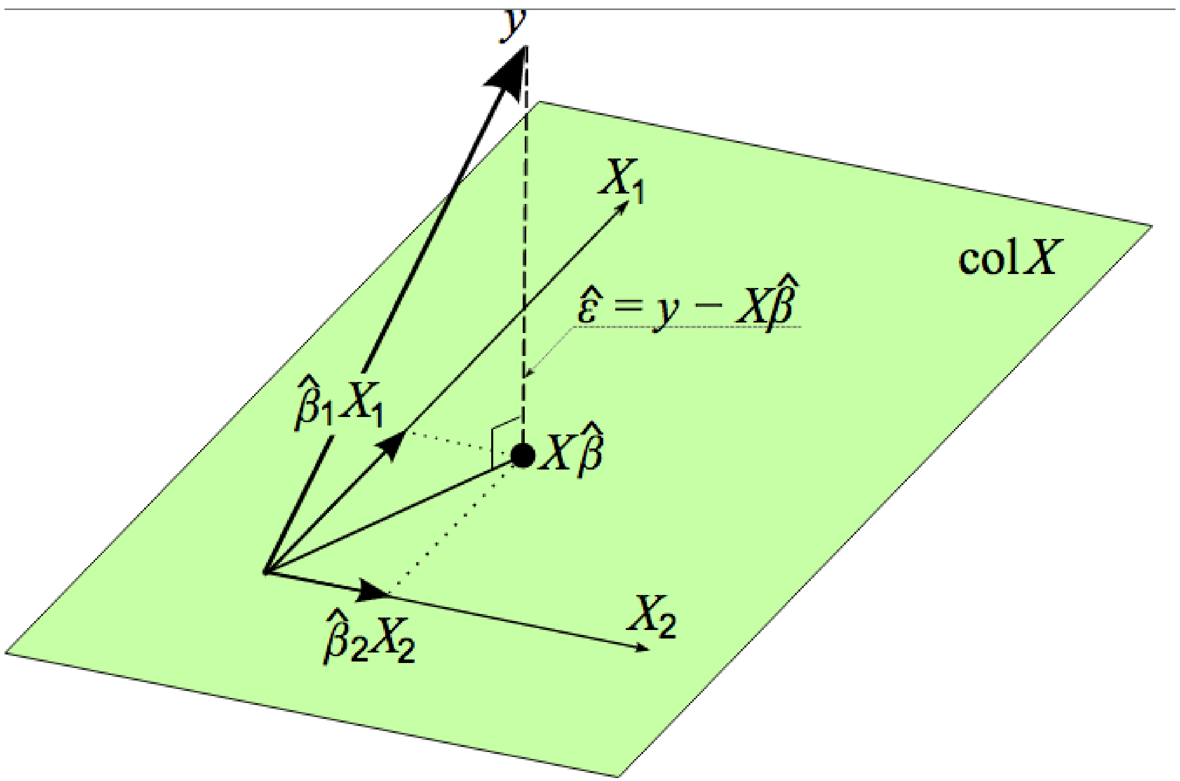
$$
\begin{aligned}
Var(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= Var\left[(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right] \\
&= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T Var(\mathbf{Y})\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \\
&= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T \sigma^2\mathbf{I}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \\
&= \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}
\end{aligned}
$$

$\mathbf{H}$ é a matriz de projeção ortogonal no espaço coluna de $\mathbf{X}$.

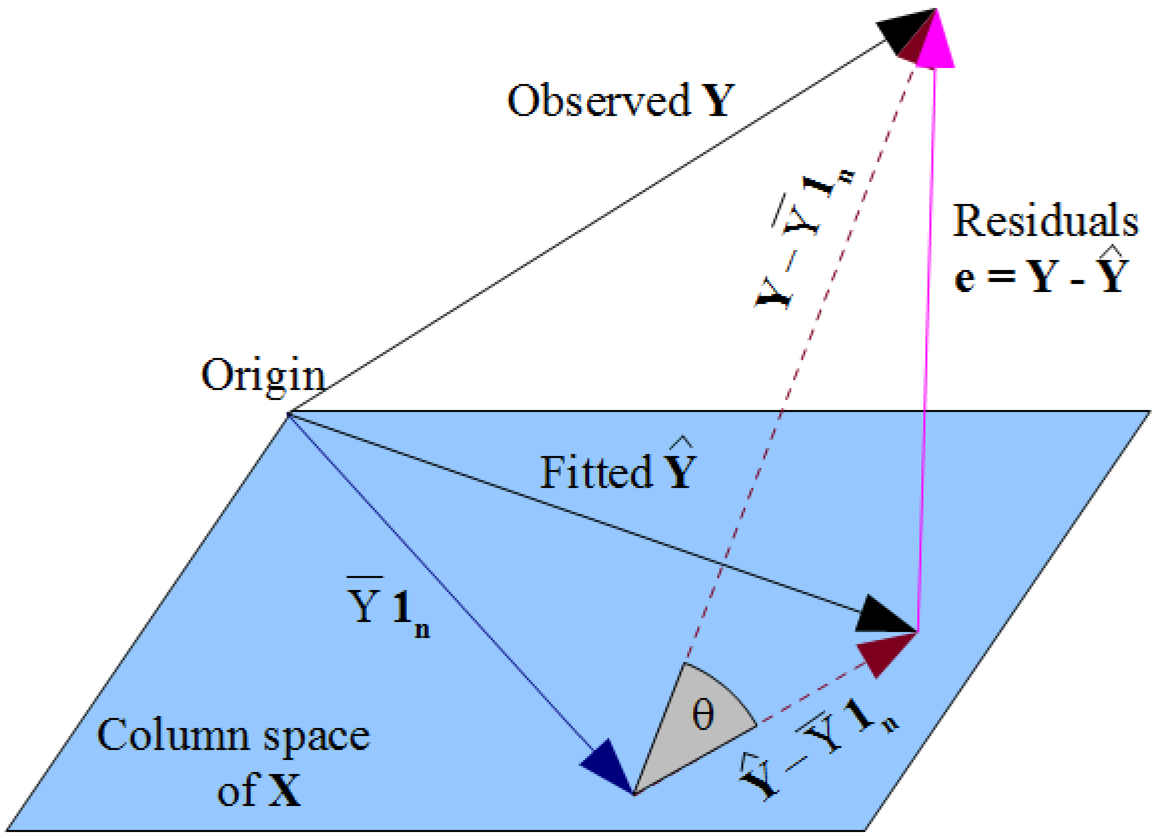
$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \underbrace{\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T}_{\mathbf{H}}\mathbf{Y}$$

$$\mathbf{e} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y} - \mathbf{H}\mathbf{Y} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{Y}$$

Interpretação geométrica



Interpretação geométrica



Interpretação geométrica

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

Pitágoras:

$$||\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||^2 = ||\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}||^2 + ||\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||^2$$

$$R^2 = 1 - \frac{SQE}{SQT} = 1 - \frac{||\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}||^2}{||\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||^2} = \frac{SQReg}{SQT} = \frac{||\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||^2}{||\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||^2}$$

$$R = \cos(\theta) = \frac{||\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||}{||\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}_n||}$$

Exercício

X: temperatura ($^{\circ}F$).

Y: semanas até a deterioração do sabor.

```
##    x    y
## 1  8  7.8
## 2  4  9.0
## 3  0 10.2
## 4 -4 11.0
## 5 -8 11.7
```

Utilizando a notação matricial para o modelo de regressão, obtenha:

- $\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}$, $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ e $\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$, $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$.
- $\hat{\boldsymbol{\beta}}$
- vetor de resíduos
- matriz de variância-covariância estimada para $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.

ANOVA

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

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

$$SQT = \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - \frac{1}{n}\mathbf{Y}^T\mathbf{1}\mathbf{1}^T\mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T\left[\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right]\mathbf{Y}$$

ANOVA

$$
\begin{aligned}
SQE &= \mathbf{e}^T\mathbf{e} = (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}})^T(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}) \\
&= (\mathbf{Y} - \mathbf{H}\mathbf{Y})^T(\mathbf{Y} - \mathbf{H}\mathbf{Y}) \\
&= \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T\mathbf{H}\mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T\mathbf{H}^T\mathbf{Y} + \mathbf{Y}^T\mathbf{H}^T\mathbf{H}\mathbf{Y} \\
&= \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T\mathbf{H}\mathbf{Y} \\
&= \mathbf{Y}^T(\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{Y}
\end{aligned}
$$

Obs: $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}$ e $\mathbf{H}^T\mathbf{H} = \mathbf{H}$

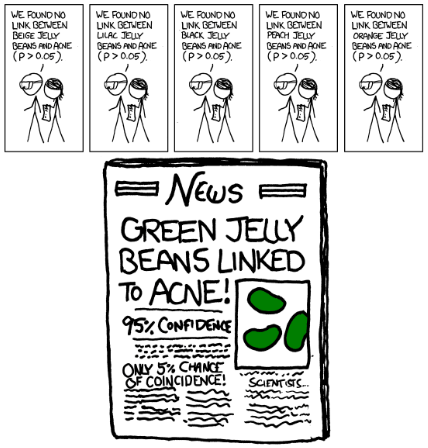
ANOVA

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

$$\begin{aligned}
SQReg &= (\mathbf{HY})^T\mathbf{HY} - \frac{1}{n}\mathbf{Y}^T\mathbf{1}\mathbf{1}^T\mathbf{Y} \\
&= \mathbf{Y}^T\mathbf{HY} - \frac{1}{n}\mathbf{Y}^T\mathbf{1}\mathbf{1}^T\mathbf{Y} \\
&= \mathbf{Y}^T\left[\mathbf{H} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right]\mathbf{Y}
\end{aligned}$$

Leitura

- Applied Linear Statistical Models: 4.1-4.3, Capítulo 5.
- Draper & Smith - Applied Regression Analysis: Capítulos 4, 5 e 20.
- Faraway - Linear Models with R: Capítulo 2.
- The Matrix Cookbook



https://xkcd.com/882/