

ME613 - Análise de Regressão

Parte 7

Benilton S Carvalho e Rafael P Maia - 2S2020

Soma extra de quadrados

Motivação

- Verificar a redução na soma de quadrados do erro quando uma ou mais variáveis preditoras são adicionadas no modelo de regressão, dado que outras variáveis preditoras já estão incluídas no modelo.
- Equivalentemente, podemos utilizar a soma extra de quadrados para medir o aumento na soma de quadrados da regressão ao adicionarmos uma ou mais preditoras no modelo.
- Em resumo, a soma extra de quadrados pode nos auxiliar na decisão de inclusão ou retirada de variáveis no modelo.



Exemplo - Relação entre gordura corporal e 3 medidas corporais.

```
dat = read.table('./dados/fat.txt')
colnames(dat) <- c("X1","X2","X3","Y")
str(dat)

## 'data.frame': 20 obs. of 4 variables:
## $ X1: num 19.5 24.7 30.7 29.8 19.1 25.6 31.4 27.9 22.1 25.5 ...
## $ X2: num 43.1 49.8 51.9 54.3 42.2 53.9 58.5 52.1 49.9 53.5 ...
## $ X3: num 29.1 28.2 37 31.1 30.9 23.7 27.6 30.6 23.2 24.8 ...</pre>
```

Y: taxa de gordura corporal; X1: Espessura da dobra cutânea do tríceps; X2: Circunferência da coxa; e X3: Circunferência do meio do braço

\$ Y : num 11.9 22.8 18.7 20.1 12.9 21.7 27.1 25.4 21.3 19.3 ...



Exemplo: Regressão de Y em X_1

```
attach(dat)
modelo1 <- lm(Y ~X1)
summary(modelo1)$coefficients

## Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -1.4961046 3.3192346 -0.4507378 6.575609e-01
## X1 0.8571865 0.1287808 6.6561675 3.024349e-06

anova(modelo1)

## Analysis of Variance Table
```



Exemplo: Regressão de Y em X_2

```
modelo2 <- lm(Y ~X2)
summary(modelo2)$coefficients

## Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -23.6344891 5.6574137 -4.177614 5.656662e-04
## X2 0.8565466 0.1100156 7.785681 3.599996e-07

anova(modelo2)

## Analysis of Variance Table
```



Exemplo: Regressão de Y em X_1 e X_2

```
## Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -19.1742456 8.3606407 -2.2933943 0.03484327
## X1 0.2223526 0.3034389 0.7327755 0.47367898
## X2 0.6594218 0.2911873 2.2645969 0.03689872
```

anova(modelo12)

 $modelo12 \leftarrow lm(Y \sim X1 + X2)$



Quando ambos X_1 e X_2 estão no modelo, temos que $SQE(X_1,X_2)=109.95$, que é menor do que com apenas X_1 no modelo, $SQE(X_1)=143.12$.

Esta diferença é denominada soma extra de quadrados:

$$SQReg(X_2 \mid X_1) = SQE(X_1) - SQE(X_1, X_2)$$

= 143.12 - 109.95 = 33.17

Equivalentemente:

$$SQReg(X_2 \mid X_1) = SQReg(X_1, X_2) - SQReg(X_1)$$

= 385.44 - 352.27 = 33.17





Exemplo: Regressão de Y em X_1 , X_2 e X_3

(d) Regression of Y on X_1 , X_2 , and X_3 $\hat{Y} = 117.08 + 4.334X_1 - 2.857X_2 - 2.186X_3$

Source of			
Variation	22	df	MS
Regression	396.98	3	132.33
Error	98.41	16	6.15
Total	495.39	19	
Variable	Estimated Regression Coefficient	Estimated Standard Deviation	t*
X ₁	$b_1 = 4.334$	$s\{b_1\} = 3.016$	1.44
X ₂	$b_2 = -2.857$	$s\{b_2\} = 2.582$	-1.11
X_3	$b_3 = -2.186$	$s\{b_3\} = 1.596$	-1.37

$$SQReg(X_1, X_2, X_3) = 396.98$$

 $SQE(X_1, X_2, X_3) = 98.41$



Exemplo: Regressão de Y em X_1 , X_2 e X_3

```
modelo123 <- lm(Y ~ X1 + X2 + X3)
summary(modelo123)$coefficients

## Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 117.084695 99.782403 1.173400 0.2578078
## X1 4.334092 3.015511 1.437266 0.1699111
## X2 -2.856848 2.582015 -1.106441 0.2848944
## X3 -2.186060 1.595499 -1.370142 0.1895628
```

anova(modelo123)



Quando X_1,X_2 e X_3 estão no modelo, temos que $SQE(X_1,X_2,X_3)=98.41$, que é menor do que com apenas X_1 e X_2 no modelo, $SQE(X_1,X_2)=109.95$.

Esta diferença é denominada soma extra de quadrados:

$$SQReg(X_3 \mid X_1, X_2) = SQE(X_1, X_2) - SQE(X_1, X_2, X_3)$$

= $109.95 - 98.41 = 11.54$

Equivalentemente:

$$SQReg(X_3 \mid X_1, X_2) = SQReg(X_1, X_2, X_3) - SQReg(X_1, X_2)$$

= $396.98 - 385.44 = 11.54$



```
modelo123 \leftarrow lm(Y \sim X1 + X2 + X3)
anova(modelo123)
## Analysis of Variance Table
##
## Response: Y
           Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
##
## X1
           1 352.27 352.27 57.2768 1.131e-06 ***
## X2 1 33.17 5.3931 0.03373 *
## X3 1 11.55 11.55 1.8773
                                   0.18956
## Residuals 16 98.40 6.15
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Na tabela, a linha X_2 contém SQReg(X_2 \mid X_1).
Na tabela, a linha X_3 contém SQReg(X_3 \mid X_1, X_2).
```



Podemos avaliar, também, a adição de mais de uma variável ao mesmo tempo. Por exemplo, podemos avaliar o efeito de incluir X_2 e X_3 a um modelo com apenas X_1 :

$$SQReg(X_2, X_3 \mid X_1) = SQE(X_1) - SQE(X_1, X_2, X_3)$$

= 143.12 - 98.41 = 44.71

Equivalentemente:

$$SQReg(X_2, X_3 \mid X_1) = SQReg(X_1, X_2, X_3) - SQReg(X_1)$$

= $396.98 - 352.27 = 44.71$



```
modelo1 \leftarrow lm(Y \sim X1)
modelo123 < -lm(Y \sim X1 + X2 + X3)
anova(modelo1, modelo123)
## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: Y ~ X1
## Model 2: Y ~ X1 + X2 + X3
    Res.Df RSS Df Sum of Sq F Pr(>F)
## 1
        18 143.120
## 2 16 98.405 2 44.715 3.6352 0.04995 *
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
                           SQReg(X_2, X_3 \mid X_1) = 44.71
```



Soma extra de quadrados

Em geral, se temos X_1 e X_2 no modelo, podemos escrever:

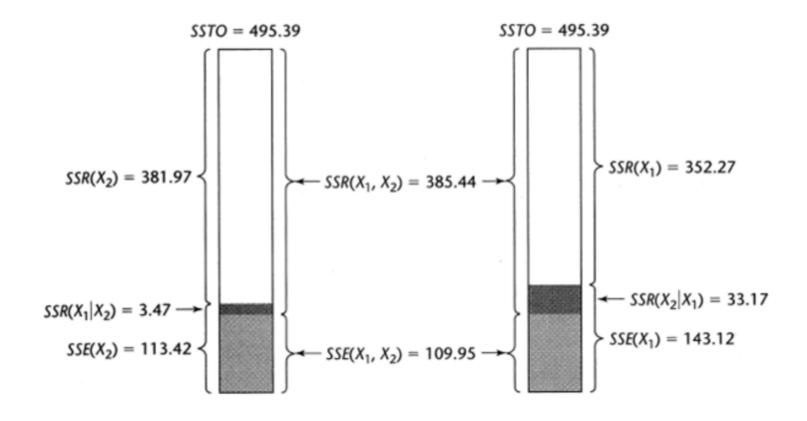
$$SQReg(X_1, X_2) = SQReg(X_1) + SQReg(X_2 \mid X_1)$$

ou, dado que a ordem de entrada das variáveis é arbitrária no modelo, temos:

$$SQReg(X_1, X_2) = SQReg(X_2) + SQReg(X_1 \mid X_2)$$



Exemplo





Soma extra de quadrados

Se temos X_1 , X_2 e X_3 no modelo, podemos escrever, por exemplo:

$$egin{aligned} SQReg(X_1,X_2,X_3) &= SQReg(X_1) + SQReg(X_2 \mid X_1) \ &+ SQReg(X_3 \mid X_1,X_2) \end{aligned}$$

$$egin{aligned} SQReg(X_1,X_2,X_3) &= SQReg(X_2) + SQReg(X_3 \mid X_2) \ &+ SQReg(X_1 \mid X_2,X_3) \end{aligned}$$

$$SQReg(X_1,X_2,X_3) = SQReg(X_1) + SQReg(X_2,X_3 \mid X_1)$$



Teste para eta_k usando soma extra de quadrados

 $H_0: \beta_k = 0.$

 $H_1: \beta_k \neq 0.$

Vimos que podemos usar a seguinte estatística do teste:

$$t^* = rac{\hat{eta}_k}{\sqrt{\widehat{Var}(\hat{eta}_k)}} \stackrel{\mathrm{sob}}{\sim} H_0 \ t_{n-p}$$



Teste para β_k usando soma extra de quadrados

Equivalentemente, podemos utilizar soma extra de quadrados para o mesmo teste de hipóteses.

Estatística do teste:

$$F^* = rac{SQReg(X_k \mid X_1, \ldots, X_{k-1}, X_{k+1}, \ldots, X_{p-1})}{1} \div rac{SQE(X_1, \ldots, X_{p-1})}{n-p}$$



Exemplo: Regressão de Y em X_1 , X_2 e X_3

Queremos testar se X_3 pode ser excluída do modelo.

```
modelo12 <- lm(Y ~X1 + X2)  
modelo123 <- lm(Y ~X1 + X2 + X3)  
anova(modelo12,modelo123)  
## Analysis of Variance Table  
## ## Model 1: Y ~ X1 + X2  
## Model 2: Y ~ X1 + X2 + X3  
## Res.Df RSS Df Sum of Sq F Pr(>F)  
## 1 17 109.951  
## 2 16 98.405 1 11.546 1.8773 0.1896  
F^* = 1.88. \, \text{Não encontramos evidências para rejeitar } H_0: \beta_3 = 0.
```



Teste para vários β_k 's usando soma extra de quadrados

$$H_0: \beta_q = \beta_{q+1} = \ldots = \beta_{p-1} = 0.$$

· H_1 : pelo menos um eta_q,\ldots,eta_{p-1} não é zero.

(por conveniência, a notação assume que os últimos p-q coeficientes do modelo serão testados)

Estatística do teste:

$$F^* = rac{SQReg(X_q, \dots, X_{p-1} \mid X_1, \dots, X_{q-1})}{p-q} \div rac{SQE(X_1, \dots, X_{p-1})}{n-p} \circ \sum_{n=1}^{\infty} H_0$$



Exemplo: Regressão de Y em X_1 , X_2 e X_3

Queremos testar se X_2 e X_3 podem ser excluídas do modelo.

```
modelo1 \leftarrow lm(Y \sim X1)
modelo123 \leftarrow lm(Y \sim X1 + X2 + X3)
anova(modelo1, modelo123)
## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: Y ~ X1
## Model 2: Y ~ X1 + X2 + X3
## Res.Df RSS Df Sum of Sq F Pr(>F)
## 1
        18 143.120
## 2 16 98.405 2 44.715 3.6352 0.04995 *
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
F^* = 3.64.
```



Coeficiente de Determinação Parcial

Motivação

Para avaliar o modelo: observar quanto da SQT está contida em SQReg e quanto está na SQE.

Podemos utilizar para avaliar o modelo:

$$R^2 = rac{\sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - ar{Y})^2}{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - ar{Y})^2} = rac{SQReg}{SQT}$$

conhecido como **coeficiente de determinação**, que é a proporção da variabilidade total explicada pelo modelo de regressão ajustado.

O coeficiente de determinação parcial irá avaliar a contribuição marginal de alguma(s) preditora(s), dado que as demais já estão no modelo.



Caso de duas variáveis preditoras

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \varepsilon_i$$

· Coeficiente de determinação parcial entre Y e X_1 , dado que X_2 já está no modelo:

$$R_{Y1|2}^2 = rac{SQE(X_2) - SQE(X_1, X_2)}{SQE(X_2)} = rac{SQReg(X_1 \mid X_2)}{SQE(X_2)}$$

· Coeficiente de determinação parcial entre Y e X_2 , dado que X_1 já está no modelo:

$$R_{Y2|1}^2 = rac{SQE(X_1) - SQE(X_1, X_2)}{SQE(X_1)} = rac{SQReg(X_2 \mid X_1)}{SQE(X_1)}$$



Exemplos

$$egin{aligned} R_{Y1|23}^2 &= rac{SQReg(X_1 \mid X_2, X_3)}{SQE(X_2, X_3)} \ & R_{Y2|13}^2 &= rac{SQReg(X_2 \mid X_1, X_3)}{SQE(X_1, X_3)} \ & R_{Y3|12}^2 &= rac{SQReg(X_3 \mid X_1, X_2)}{SQE(X_1, X_2)} \ & R_{Y4|123}^2 &= rac{SQReg(X_4 \mid X_1, X_2, X_3)}{SQE(X_1, X_2, X_3)} \end{aligned}$$



Exemplo: Gordura corporal

```
SQE1 <- deviance(modelo1) #SQE modelo só com X1
SQE2 <- deviance(modelo2) #SQE modelo só com X2
SQE12 <- deviance(modelo12) #SQE modelo com X1 e X2
SQE123 <- deviance(modelo123) #SQE modelo com X1 x2 e X3

SQReg2.1 <- SQE1-SQE12 # SQReg(X2|X1)
SQReg3.12 <- SQE12-SQE123 # SQReg(X3|X1,X2)

RY2.1 <- SQReg2.1/SQE1 # Coef. det. parcial de Y com X2 dado X1 no modelo
RY2.1

## [1] 0.2317564

RY3.12 <- SQReg3.12/SQE12 # Coef. det. parcial de Y com X3 dado X1 e X2 no modelo
RY3.12
```



[1] 0.1050097

Exemplo: Gordura corporal

Quando X_2 é adicionada ao modelo contendo apenas X_1 , a $SQE(X_1)$ é reduzida em 23%. A inclusão de X_2 no modelo explica 23% da variação em Y que não pode ser explicada apenas por X_1 .

Quando X_3 é adicionada ao modelo contendo X_1 e X_2 , a $SQE(X_1,X_2)$ é reduzida em 10%. Isto é, 10% da variação em Y que não pode ser explicada pelo modelo com X_1 e X_2 é explicada pela inclusão de X_3 no modelo.



Propriedades

O coeficiente de determinação parcial assume valores entre 0 e 1.

Outra maneira de obter $R^2_{Y1\mid 2}$:

- · Obtenha os resíduos da regressão de Y em X_2 : $e_i(Y\mid X_2)$.
- · Obtenha os resíduos da regressão de X_1 em X_2 : $e_i(X_1 \mid X_2)$.
- · Calcule R^2 entre $e_i(Y \mid X_2)$ e $e_i(X_1 \mid X_2)$.

O diagrama de dispersão de $e_i(Y\mid X_2)$ versus $e_i(X_1\mid X_2)$ fornece uma representação gráfica da relação entre Y e X_1 , ajustada por X_2 . É também chamado de *added variable plot* ou **gráfico de regressão parcial**.



Regressão Múltipla Padronizada

Motivação

Erros de precisão numérica quando

- · $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ tem determinante próximo de 0.
- · elementos de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ diferem substancialmente em ordem de magnitude.

Para cada um dos problemas, há soluções propostas.

Veremos inicialmente o problema de ordem de magnitude.



Transformação de correlação

Ao utilizarmos a transformação de correlação, obtemos que todos os elementos de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ variam entre 1 e -1.

Isto acarreta menos problemas de arredondamento para inverter $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$.



Falta de comparabilidade entre coeficientes

Em geral, não podemos comparar os coeficientes de regressão entre si, dado que não estão nas mesmas unidades.

Exemplo:

$$\hat{Y} = 200 + 20000 X_1 + 0.2 X_2$$

Pode-se pensar que apenas X_1 é relevante no modelo.

Mas suponha que:

Y: dólares

 X_1 : milhares de dólares

 X_2 : centavos de dólares



Falta de comparabilidade entre coeficientes

O efeito na resposta média do aumento de 1000 dólares em X_1 (1 unidade de aumento, X_1 está em milhares) quando X_2 é constante, é de 20000 dólares.

O efeito na resposta média do aumento de 1000 dólares em X_2 (100000 unidades de aumento, X_2 está em centavos) quando X_1 é constante, é de 20000 dólares.

Transformação de correlação evita este tipo de comparação equivocada.



Transformação de correlação

Padronização usual:

$$rac{Y_i-ar{Y}}{s_Y} \ rac{X_{ik}-ar{X}_k}{s_k} \ , \quad k=1,2,\ldots,p-1$$

em que:

$$s_Y = \sqrt{rac{\sum_i (Y_i - ar{Y})^2}{n-1}}$$

$$s_k = \sqrt{rac{\sum_i (X_{ik} - ar{X}_k)^2}{n-1}} \,, \quad k = 1, 2, \dots, p-1$$



Transformação de correlação

A transformação de correlação é uma função das variáveis padronizadas:

$$Y_i^* = rac{1}{\sqrt{n-1}} \left(rac{Y_i - Y}{s_Y}
ight) \ X_{ik}^* = rac{1}{\sqrt{n-1}} \left(rac{X_{ik} - ar{X}_k}{s_k}
ight) \,, \quad k=1,2,\ldots,p-1$$



$$Y_i^* = eta_1^* X_{i1}^* + \ldots + eta_{p-1}^* X_{i,p-1}^* + arepsilon_i^*$$

Relação com modelo de regressão múltipla usual:

$$eta_k = \left(rac{s_Y}{s_k}
ight)eta_k^*\,, \quad k=1,2,\ldots,p-1$$

$$eta_0 = ar{Y} - eta_1 ar{X}_1 - \ldots - eta_{p-1} ar{X}_{p-1}$$



$$\mathbf{X}_{n imes p-1}^* = egin{pmatrix} X_{11}^* & X_{12}^* & \dots & X_{1,p-1}^* \ X_{21}^* & X_{22}^* & \dots & X_{2,p-1}^* \ dots & dots & dots \ X_{n1}^* & X_{n2}^* & \dots & X_{n,p-1}^* \end{pmatrix}$$

Seja a matriz de correlação de \mathbf{X} :

$$r_{XXp-1 imes p-1} = egin{pmatrix} 1 & r_{12} & \ldots & r_{1,p-1} \ r_{21} & 1 & \ldots & r_{2,p-1} \ dots & dots & dots \ r_{p-1,1} & r_{p-1,2} & \ldots & 1 \end{pmatrix}$$



em que r_{jk} é o coeficiente de correlação entre X_j e X_k .

$$egin{aligned} \sum X_{ij}^* X_{ik}^* &= \sum \left[rac{1}{\sqrt{n-1}} \left(rac{X_{ij} - X_j}{s_j}
ight)
ight] rac{1}{\sqrt{n-1}} \left(rac{X_{ik} - ar{X}_k}{s_k}
ight) \ &= rac{1}{n-1} rac{\sum (X_{ij} - ar{X}_j)(X_{ik} - ar{X}_k)}{s_j s_k} \ &= rac{\sum (X_{ij} - ar{X}_j)(X_{ik} - ar{X}_k)}{\sqrt{\sum (X_{ij} - ar{X}_j)^2 \sum (X_{ik} - ar{X}_k)^2}} \ &= r_{jk} \end{aligned}$$



Portanto, temos que:

$$\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^*=r_{XX}$$
 .

De maneira similar:

$$\mathbf{X}^{*T}\mathbf{Y}_{p-1 imes1}^*=r_{YX}$$

em que r_{YX} é o vetor de correlações entre ${f Y}$ e cada coluna de ${f X}$.



Equações normais:

$$\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^{*}\hat{oldsymbol{eta}}^{*}=\mathbf{X}^{*T}\mathbf{Y}^{*T}$$

Estimador de mínimos quadrados:

$$\hat{oldsymbol{eta}}^* = (\mathbf{X}^{*T}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*T}\mathbf{Y}$$

Equivalentemente:

$$\hat{oldsymbol{eta}}^* = r_{XX}^{-1} r_{YX}$$
 .



Exemplo



Exemplo

```
library(QuantPsyc)
lm.beta
## function (MOD)
## {
##
       b <- summary(MOD)$coef[-1, 1]</pre>
       sx <- sapply(MOD$model[-1], sd)</pre>
##
       sy <- sapply(MOD$model[1], sd)</pre>
##
##
       beta <- b * sx/sy
       return(beta)
##
## }
## <bytecode: 0x000000013947760>
## <environment: namespace:QuantPsyc>
```



Exemplo

lm.beta(lm1)

```
## mcs homeless
## 0.2691888 -0.1234776
```

Uma mudança de 1 desvio-padrão em mcs tem mais do que o dobro de impacto de uma mudança de 1 desvio-padrão em homeless.



```
Y: vendas
```

 X_1 : população

 X_2 : renda per capita

```
dados <- read.table("./dados/CH07TA05.txt")
colnames(dados) <- c("Y","X1","X2")
dados</pre>
```

```
## 1 174.4 68.5 16.7
## 2 164.4 45.2 16.8
## 3 244.2 91.3 18.2
## 4 154.6 47.8 16.3
## 5 181.6 46.9 17.3
## 6 207.5 66.1 18.2
## 7 152.8 49.5 15.9
## 8 163.2 52.0 17.2
## 9 145.4 48.9 16.6
## 10 137.2 38.4 16.0
## 11 241.9 87.9 18.3
```

Modelo usual, sem padronização:

```
modelo <- lm(Y ~ X1+X2,data=dados)
summary(modelo)$coefficients</pre>
```

```
## (Intercept) -68.85707 60.0169532 -1.147294 2.662817e-01
## X1 1.45456 0.2117817 6.868201 2.001691e-06
## X2 9.36550 4.0639581 2.304527 3.332136e-02
```



Modelo padronizado:

```
dadosPadrao <- as.data.frame(scale(dados)/sqrt(dim(dados)[1]-1))
modeloPadrao <- lm(Y ~ X1+X2-1,data=dadosPadrao)
summary(modeloPadrao)$coefficients

## Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## X1 0.7483670  0.106055 7.056406 1.025522e-06
## X2 0.2511039  0.106055 2.367676 2.866468e-02
```



Ou, diretamente, pelo comando:

```
lm.beta(modelo)
```

```
## X1 X2
## 0.7483670 0.2511039
```

Note que o comando apenas libera as estimativas (sem erro-padrão, testes, etc...)



Agradecimento

Slides criados por Samara F Kiihl / IMECC / UNICAMP



Leitura

- Applied Linear Statistical Models: Seções 7.1-7.5.
- Draper & Smith Applied Regression Analysis: Capítulo 6.
- Weisberg Applied Linear Regression: Seções 6.1-6.3
- Faraway Linear Models with R: Seções 3.1 e 3.2.

