

legnessaic

Prof. Lorí Viali, Dr. viali@pucrs.br

http://www.pucrs.br/~viali/

Em muitas situações duas ou mais variáveis estão relacionadas e surge então a necessidade de determinar a natureza deste relacionamento.





A análise de regressão é uma técnica estatística para modelar e investigar o relacionamento entre duas ou mais variáveis.





De fato a regressão pode ser dividida em dois problemas:

(i) o da especificação e

(ii) o da determinação.





A especificação

O problema da especificação é descobrir dentre os possíveis modelos (linear, quadrático, exponencial, etc.) qual o mais adequado.





A determinação

O problema da determinação é uma vez definido o modelo (linear, quadrático, exponencial, etc.) estimar os parâmetros da equação.





O modelo

Normalmente é suposto que exista uma variável Y (dependente ou resposta), que está relacionada a "k" variáveis (independentes OU regressoras) X_i (i = 1, 2, ..., k).





A variável resposta Y é aleatória, enquanto que as variáveis regressoras X; são normalmente controladas. O relacionamento entre elas caracterizado por uma equação denominada de "equação de regressão"





Quando existir apenas uma variável regressora (X) tem-se a regressão simples, se Y depender de duas ou mais variáveis regressoras, então tem-se a "regressão múltipla".





O modelo considerado

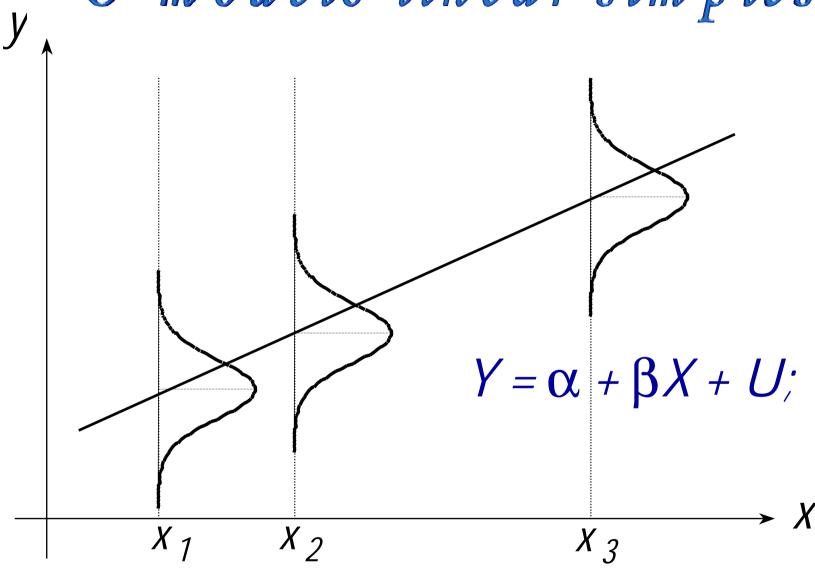
Vamos supor que a regressão é do tipo simples e que o o modelo seja linear, isto é, vamos supor que a equação de regressão seja do tipo:

$$Y = \alpha + \beta X + U$$





O modelo linear simples







O termo "U" é o termo erro, isto é, "U" representa outras influências sobre a variável Y, além da exercida pela variável "X". A variação residual (termo U) é suposto de média zero e desvio constante e igual a σ .





Ou ainda pode-se admitir que o modelo fornece o valor médio de Y, para um dado "x", isto é,

$$E(Y/x) = \alpha + \beta X$$





Em resumo, as hipóteses são:

$$Y = \alpha + \beta X + U$$

$$E(Y/x) = \alpha + \beta X$$
, isto é, $E(U) = 0$

$$V(Y/x) = \sigma^2$$

$$Cov(Ui, Uj) = 0$$
, para $i \neq j$;

A variável X permanece fixa em observações sucessivas e os erros U são normalmente distribuídos.





A equação de regressão O modelo suposto $E(Y/x) = \alpha + \beta X$ é populacional.

Vamos supor que se tenha n pares de observações, digamos: (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , ..., (x_2, y_2) e que através deles queremos estimar o modelo acima.





A equação de regressão A reta estimada será representada Y = a + bX ou Y = a + bX + EOnde "a" é um estimador de α e "b" é um estimador de \(\beta \), sendo \(\cappa \) um estimador de E(Y/x).





O método utilizado

Existem diversos métodos para a determinação da reta desejada. Um deles, denominado de MMQ (Métodos dos Mínimos Quadrados), consiste em minimizar a "soma dos quadrados das distâncias da reta aos pontos".





Tem-se:

$$Y_i = a + bx_i + E_{ii}$$

Então:

$$E_i = Y_i - (a + bx_i)$$





Deve-se minimizar:

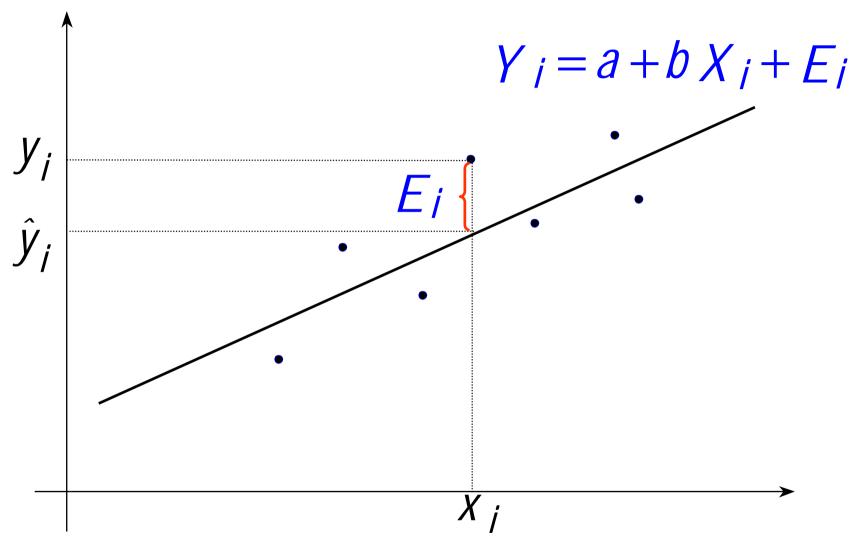
$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} E_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \sum_{i=$$

$$= \sum_{i=1}^{n} (Y_i - a - bX_i)^2$$





O método dos mínimos quadrados







Derivando parcialmente tem-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial a} = -2\sum_{j=1}^{n} (Y_j - a - b X_j)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b} = -2 \sum_{j=1}^{n} x_j (Y_j - a - b X_j)$$





Igualando as derivadas parciais a zero vem:

$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - a - b X_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i (Y_i - a - b X_i) = 0$$





Isolando as incógnitas, tem-se:

$$\sum Y_i = na + b \sum X_i$$

$$\sum X_i Y_i = n \sum X_i + b \sum X_i^2$$





Resolvendo para "a" e "b", segue:

$$b = \frac{\sum X_i y_i - n \overline{X} Y}{\sum X_i^2 - n \overline{X}^2} = \frac{S_{XY}}{S_{XX}}$$

$$a = \overline{Y} - b\overline{X}$$





Lembrando que:

$$S_{XY} = \sum X_i Y_i - n \overline{X} \overline{Y}$$

$$S_{XX} = \sum X_i^2 - n \overline{X}^2$$

$$S_{YY} = \sum Y_i^2 - n \overline{Y}^2$$





Exemplo





Um engenheiro químico está investigando o efeito da temperatura operação do processo rendimento do produto. O estudo resultou nos dados da tabela, ao lado. Determinar a linha de regressão.





Temperatura, C ⁰ (X)	Rendimento (Y)	
100	45	
110	<i>51</i>	
120	<i>54</i>	
130	61	
140	66	
<i>150</i>	70	
160	74	
170	78	
180	<i>85</i>	
190	89	





Da mesma forma que para calcular o coeficiente de correlação é necessário a construção de três novas colunas. Uma para X², uma para Y² e outra para XY.





X	Y	XY	X	Y
100	45	4500	10000	2025
110	51	<i>5610</i>	12100	2601
120	54	6480	14400	2916
130	61	7930	16900	3721
140	66	9240	19600	4356
150	70	10500	22500	4900
160	74	11840	25600	<i>5476</i>
170	<i>78</i>	13260	28900	6084
180	<i>85</i>	15300	32400	7225
190	89	16910	36100	7921
<i>1450</i>	673	101570	218500	47225

$$n = 10$$
 $\sum X = 1450$ $\sum Y = 673$

$$n = 10$$
 $\sum X = 1450$ $\sum Y = 673$ $\overline{X} = 145$ $\overline{Y} = 67,3$ $\sum XY = 101570$

$$\sum X^2 = 218500$$
 $\sum Y^2 = 47225$

Então:

$$S_{XY} = \sum X_i Y_i - nXY =$$

$$= 101570 - 10.145.67,3 =$$

$$= 3985$$





$$S_{XX} = \sum X_i^2 - n \overline{X}^2 =$$

$$= 218500 - 10.145^2 =$$

$$= 8250$$

$$S_{YY} = \sum Y_{i}^{2} - n \overline{Y}^{2} =$$

$$= 47225 - 10.67,3^{2} =$$

$$= 1932,10$$





A equação de regressão, será, então:

$$b = \frac{S_{XY}}{S_{XX}} = \frac{3985}{8250} = 0.4830 \approx 0.48$$

$$a = \overline{Y} - b\overline{X} = 67,30 - 0,4830.145 =$$

$$=-2,7394 \cong -2,74$$

$$\hat{Y} = -2.74 + 0.48 x$$





A pergunta que cabe agora é: este modelo representa bem os pontos dados? A resposta é dada através do erro padrão da regressão.





Variância Residual e Erro Padrão da Regressão





O objetivo do MMQ é minimizar a variação residual em torno da reta de regressão. Uma avaliação desta variação é dada por:

$$S^{2} = \frac{\sum E^{2}}{n-2} = \frac{\sum (Y - a - bX)^{2}}{n-2}$$





O cálculo da variância residual, por esta expressão, é muito trabalhoso, pois é necessário primeiro determinar os valores previstos. Entretanto é possível obter uma expressão que não requeira o cálculo dos valores previstos, isto é, de Y = a + bX





Desenvolvendo o numerador da expressão, vem:

$$\sum (Y - a - bX)^{2} = \sum [Y - (\overline{Y} - b\overline{X}) - bX]^{2} =$$

$$= \sum [Y - \overline{Y} + b\overline{X} - bX]^{2} = \sum [Y - \overline{Y} - b(X - \overline{X})]^{2} =$$

$$= \sum (Y - \overline{Y})^{2} - 2b\sum (X - \overline{X})(Y - \overline{Y}) + b^{2}\sum (X - \overline{X})^{2} =$$

$$= S_{YY} - 2bS_{XY} + b^{2}S_{XX}$$





Uma vez que:

$$\sum (X - \overline{X})(Y - \overline{Y}) =$$

$$= \sum X_i Y_i - n\overline{X}\overline{Y} = S_{XY}$$

$$\sum (X - \overline{X})^2 = \sum X_i^2 - n\overline{X}^2 = S_{XX}$$

$$\sum (Y - \overline{Y})^2 = \sum Y_i^2 - n\overline{Y}^2 = S_{YY}$$





Deste modo, tem-se:

$$\sum (Y-a-bX)^2 = S_{YY}-2bS_{XY}+b^2S_{XX}$$

Mas:
$$b = \frac{S_{XY}}{S_{XX}} \Rightarrow S_{XY} = b S_{XX}$$

Então:

$$\sum (Y-a-bX)^2 = S_{YY}-2bS_{XY}+b^2S_{XX}=$$

$$= S_{YY} - 2b^2 S_{XX} + b^2 S_{XX} = S_{YY} - b^2 S_{XX}$$





Finalmente:

$$S = \sqrt{\frac{\sum E^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum (Y - a - bX)^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{n-2}{n-2}}$$

$$=\sqrt{\frac{S\gamma\gamma-b^2S\chi\chi}{n-2}}=\sqrt{\frac{S\gamma\gamma-bS\chi\gamma}{n-2}}$$





Exemplo





Considerando os valores do exemplo anterior, determinar o erro padrão da regressão.

Tem-se:

$$S_{YY} = 1932,10$$

$$S_{XX} = 8250$$

$$b = \frac{S_{XY}}{S_{XX}} = \frac{3985}{8250} = 0.4830$$





Então:

$$S = \sqrt{\frac{S_{YY} - bS_{XY}}{n - 2}} =$$

$$= \sqrt{\frac{1932,10 - \frac{3985}{8250}.3985}{10 - 2}} =$$

$$=0.9503 \cong 0.95$$





Distribuições das Estimativas





Os valores de "a" e "b" são estimadores de "\alpha" e "\beta". As propriedades estatísticas destes estimadores são úteis para testar a adequação do modelo. Eles são variáveis aleatórias uma vez que são combinações lineares dos Y, que são, por sua vez, variáveis aleatórias.



As principais propriedades de interesse são a média (expectância), a variabilidade (erro padrão) distribuição de probabilidade de cada um dos estimadores.





Comportamento de "a"

(i) Expectância

$$E(a) = E(\overline{Y} - b\overline{X}) = \dots = \alpha$$

(ii) Variância

$$V(a) = V(\overline{Y} - b\overline{X}) = \dots = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\overline{X}^2}{S_{XX}} \right)$$





Portanto a distribuição da estatística "a", será:

$$a \sim N(\alpha, \sigma \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\overline{X}^2}{S_{XX}}})$$

Como o valor " σ " não é conhecido e precisa ser estimado por "s", então, de fato, utiliza-se a distribuição t_{n-2} .





Comportamento de "b"

(i) Expectância

$$E(b) = E\left(\frac{S_{XY}}{S_{XX}}\right) = \dots = \beta$$

(ii) Variância

$$V(b) = V\left(\frac{S_{XY}}{S_{XX}}\right) = \dots = \frac{\sigma^2}{S_{XX}}$$





Portanto a distribuição da estatística "b", será:

$$b \sim N(\beta, \frac{\sigma}{\sqrt{S_{XX}}})$$

Como o valor " σ " não é conhecido e precisa ser estimado por "s", então, de fato, utiliza-se a distribuição t_{n-2} .





Intervalos de Confiança para os parâm etros da regressão





Da mesma forma que foram obtidos IC para a média, a proporção e a variância de uma população, pode-se determinar intervalos para os parâmetros "α" e "β" da regressão.





IC para o coeficiente linear " \alpha"

O IC de "1 – α " de confiança para

o coeficiente linear "\alpha" é dado por:

$$P(a-t_{n-2}S\sqrt{\frac{1}{n}+\frac{\bar{\chi}^2}{S_{XX}}} \le \alpha \le a+t_{n-2}S\sqrt{\frac{1}{n}+\frac{\bar{\chi}^2}{S_{XX}}})=$$

$$=1-\alpha$$





IC para o coeficiente angular "\beta"

O IC de "1 – α " de confiança para o coeficiente da regressão " β " é dado por:

$$P(b-t_{n-2}\frac{S}{\sqrt{S_{XX}}} \le \beta \le b+t_{n-2}\frac{S}{\sqrt{S_{XX}}}) = 1-\alpha$$





Exemplo





Determinar intervalos de confiança de 95% para os parâmetros da equação de regressão, utilizando os dados do exercício anterior.

$$\hat{Y} = -2.74 + 0.48 x$$





Dados

$$S_{YY} = 1932,10$$

$$S_{XX} = 8250$$

$$S_{XY} = 3985$$

$$\overline{X} = 145$$

$$\overline{Y} = 67.30$$

$$a = -2,7394$$

$$b = 0.4830$$

$$s = 0.9503$$

$$n = 10$$

$$1 - \alpha = 95\%$$



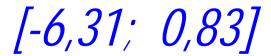


O IC de "1- \alpha" para o Coef. Linear

Então:

$$-2,7394 \pm 2,306.0,9503\sqrt{\frac{1}{10} + \frac{145^2}{8250}}$$

$$-2,7394 \pm 3,5663$$





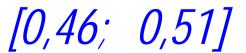


O IC de "1- \alpha" para o Coef.

Angular "
$$\beta$$
" é dado por: $b \pm t_{n-2} \frac{S}{\sqrt{S_{XX}}}$

Então:
$$0,4830 \pm 2,306. \frac{0,9503}{\sqrt{8250}}$$

$$0.4830 \pm 2.306$$







Intervalos de Confiança para o valor médio e para um valor in dividual de Y





Da mesma forma que foram obtidos IC para os parâmetros da regressão, pode-se obter IC para os valores estimados de Y para um dado x. Vamos considerar dois casos:

- (a) Considerando somente a incerteza da linha de regressão;
- (b) Considerando a incerteza da linha mais a variação da variável Y.





IC para um valor médio de Y, dado x

Para construir o IC de "1 – \alpha" para o

valor médio de Y, dado x, é necessário

conhecer sua distribuição. Tem-se:

$$\hat{Y} \sim N(\alpha + \beta x; \sigma_1 \frac{1}{n} + \frac{(X - \overline{X})^2}{S_{XX}})$$





Então IC de "1 $- \alpha$ " de confiança para o um valor médio de Y, dado x ,é:

$$\hat{Y} \pm t_{n-2}S_1\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(X - \overline{X})^2}{S_{XX}}}$$





IC para um valor médio individual de Y, dado x

Uma estimativa do valor individual
de Y é dado por "a + bx" e a distribuição
desta estimativa será dada por:

$$\hat{Y} \sim N(0; \sigma_{V} 1 + \frac{1}{n} + \frac{(X - \overline{X})^{2}}{S_{XX}})$$





Então IC de "1 $- \alpha$ " de confiança para o um valor individual de Y, dado x , será:

$$\hat{Y} \pm t_{n-2}S_1\sqrt{1+\frac{1}{n}+\frac{(X-\bar{X})^2}{S_{XX}}}$$





Exemplo





Determinar intervalos de confiança de 95% para os valores médio e individual de Y, na hipótese de x = 200.





Dados

$$S_{YY} = 1932,10$$

$$S_{XX} = 8250$$

$$S_{XY} = 3985$$

$$\overline{X} = 145$$

$$\overline{Y} = 67.30$$

$$x = 200$$

$$a = -2,7394$$

$$b = 0.4830$$

$$s = 0.9503$$

$$n = 10$$

$$1-\alpha=95\%$$





O IC de "1- \alpha" para o valor médio de

Y, dado "x" é:
$$\hat{Y} \pm t_{n-2}S_1 \frac{1}{n} + \frac{(X-\bar{X})^2}{S_{XX}}$$

Então:

$$\hat{y} = -2,7394 + 0,4830.200 = 93,8606$$

$$93,8606 \pm 2,306.0,9503\sqrt{\frac{1}{10} + \frac{(200-145)^2}{8250}}$$

 93.8606 ± 1.4970



[92,36; 95,36]



O IC de "1- α" para o valor individual

de Y, dado "x" é:

$$\hat{Y} \pm t_{n-2}S_{\sqrt{1+\frac{1}{n}+\frac{(X-\bar{X})^2}{S_{XX}}}}$$

$$93,8606 \pm 2,306.0,9503\sqrt{1+\frac{1}{10}+\frac{(200-145)^2}{8250}}$$



Testes de Hipóteses para os parâmetros da regressão





Da mesma forma que foram testados todos os parâmetros até então pode-se testar parâmetros "\alpha" e "\beta" regressão.





Teste para o coeficiente linear " \alpha"

A variável teste para testar o coeficiente linear é dado por:

$$t_{n-2} = \frac{a - \alpha}{S\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\overline{X}^2}{S_{XX}}}}$$





Teste para o coeficiente angular " \beta"

A variável teste para testar o coeficiente da regressão "\beta" é dada por:

$$t_{n-2} = \frac{b - \beta}{S}$$

$$\frac{\sqrt{S_{XX}}}{\sqrt{S_{XX}}}$$





Exemplo





- (a) Testar, a 1% de significância, se é possível afirmar que a linha de regressão, do exemplo dado, não passa pela origem.
- (b) Testar se é possível, a 1% de significância, afirmar que existe regressão positiva entre as duas variáveis.





Dados

$$a = -2,7394$$

$$b = 0.4830$$

$$s = 0.9503$$

$$n = 10$$

$$1 - \alpha = 1\%$$

$$S_{YY} = 1932,10$$

$$S_{XX} = 8250$$

$$S_{XY} = 3985$$





Solução:

Hipóteses:

$$H_0$$
: $\alpha = 0$

$$H_1: \alpha \neq 0$$

Dados:

$$n = 10$$

$$a = -2,739$$

$$\alpha = 1\%$$

Trata-se de um teste bilateral para o coeficiente linear da regressão.

(A)





A variável teste é:

$$t_{n-2} = \frac{a - \alpha}{S\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\overline{X}^2}{S_{XX}}}}$$

Então:

$$t_8 = \frac{-2,739 - 0}{0,9503\sqrt{\frac{1}{10} + \frac{145^2}{8250}}} = -1,777$$





O valor crítico t_c é tal que: $P(|T| > t_c) = \alpha$ Então $t_c = -3,355$. Assim $RC = [-3,355; \infty)$

DECISÃO e CONCLUSÃO:

Como $t_8 = -1,771 \in RC$ ou -1,771 > -3,355. Aceito H_0 , isto é, a 1% de significância, não se pode afirmar que a linha de regressão não passe pela origem.



Solução:

Hipóteses:

$$H_0$$
: $\beta = 0$

$$H_1$$
: $\beta > 0$

Dados:

$$n = 10$$

$$b = 0.4830$$

$$\alpha = 1\%$$

Trata-se de um teste unilateral para o coeficiente angular da regressão.

(B)





A variável teste é:

$$t_{n-2} = \frac{b - \beta}{S}$$

$$\frac{\sqrt{S_{XX}}}{\sqrt{S_{XX}}}$$

Então:

$$t_8 = \frac{0.4830 - 0}{0.9503 / \sqrt{8250}} = 46.165$$





O valor crítico t_c é tal que: $P(T > t_o) = \alpha$ Então $t_c = 2,896$. Assim $RC = [2,896; \infty)$

DECISÃO e CONCLUSÃO:

Como $t_8 = 46,165 \in RC$ ou 46,165 > 2,896. Rejeito H_0 , isto é, a 1% de significância, pode-se afirmar que existe regressão entre as duas variáveis.



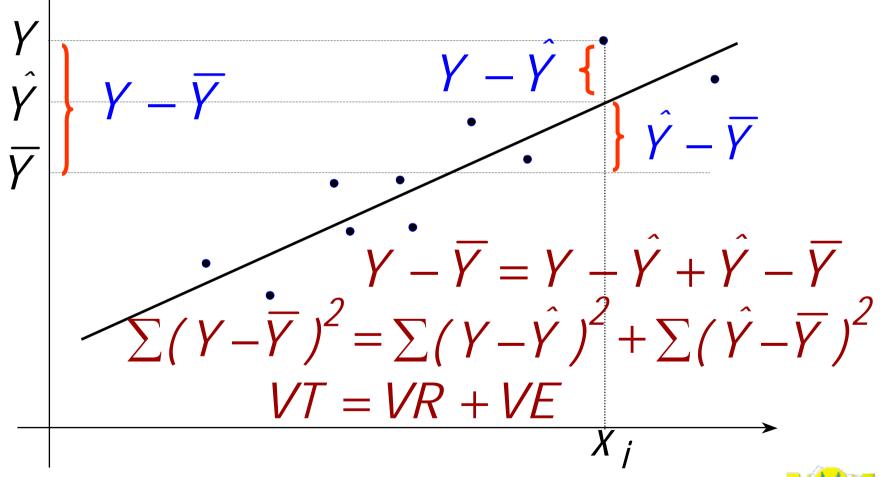


Decomposição da Variação





Variação Total = Variação Não-Explicada + Variação Explicada







(a) Variação Total: VT

$$VT = \sum (Y - \overline{Y})^2 = S_{YY}$$

(b) Variação Residual: VR

$$VR = \sum (Y - \hat{Y})^2 = S_{YY} - b^2 S_{XX} = VT - VE$$

(c) Variação Explicada: VE

$$VE = \sum (\hat{Y} - \overline{Y})^2 = b^2 S_{XX}$$





Uma maneira de medir o grau de aderência (adequação) de um modelo é verificar o quanto da variação total de Y é explicada pela reta de regressão.





Para isto, toma-se o quociente entre a variação explicada, VE, pela variação total, VT:

$$R^2 = VE / VT$$

Este resultado é denominado de "Coeficiente de Determinação".





$$R^{2} = \frac{VE}{VT} = \frac{b^{2}S_{XX}}{S_{YY}} = \frac{bS_{XY}}{S_{YY}} = \frac{S_{XY}^{2}}{S_{XX}S_{YY}}$$

Este resultado mede o quanto as variações de uma das variáveis são explicadas pelas variações da outra variável.





Ou ainda, ele mede a parcela da variação total que é explicada pela reta de regressão, isto é:

$$VE = b^2 S_{XX} = R^2 S_{YY}$$

A variação residual corresponde a:

$$VR = (1 - R^2) S_{YY}$$

Assim $1 - R^2$ é o Coeficiente de

Indeterminação.



Exercicio





O % de impurezas no gás oxigênio produzido por um processo destilação supõem-se que esteja relacionado com o % de hidrocarbono condensador principal processador. Os dados de um mês de operação produziram a seguinte tabela





X	Y	X	Y
1,02	86,91	1,46	96,73
1,11	<i>89,85</i>	<i>1,55</i>	99,42
1,43	90,28	<i>1,55</i>	98,66
1,11	86,34	<i>1,55</i>	96,07
1,01	92,58	1,40	93,65
0,95	<i>87,33</i>	1,15	<i>87,31</i>
1,11	86,29	1,01	95,00
0,87	91,86	0,99	96,85
1,43	95,61	0,95	<i>85,20</i>
1,02	<i>89,86</i>	0,98	90,56

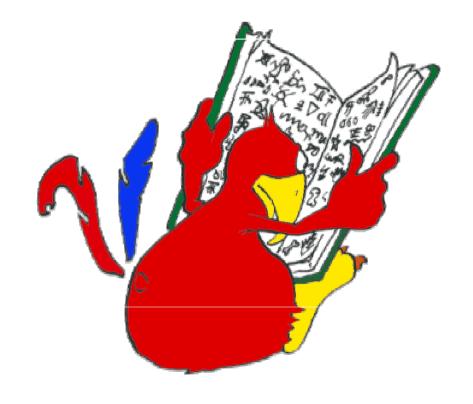




- (a) Ajuste um modelo linear aos dados;
- (b) Teste a existência da regressão;
- (c) Determine o valor de R² para este modelo;
- (d) Determine um IC, de 95%, para o valor da pureza, na hipótese do % de hidrocarbono ser 1,20%.







Até a próxima...



