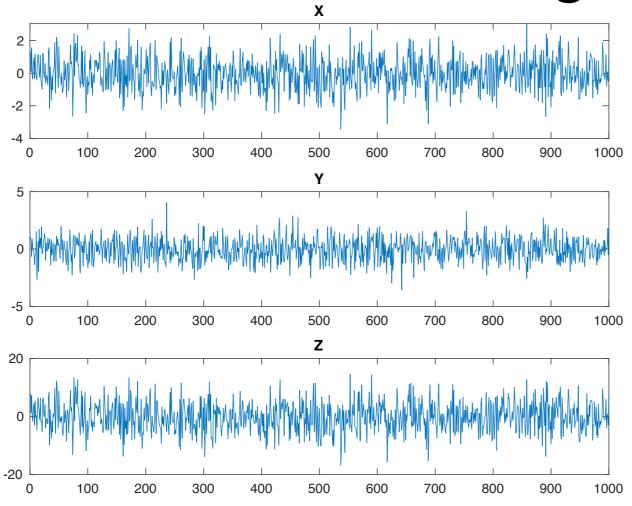
Estatística aplicada

Tópicos especiais em Estatística Aplicada

Prof. Celso J. Munaro (cjmunaro@gmail.com)

IX - Regressão linear e correlação

Cap 11 de [1]



Sejam as variáveis X,Y,Z

Busca-se modelos:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x$$

е

$$\hat{z} = b_0 + b_1 x$$

```
No Matlab:

p1 = regress(y,[1 x])

p2 = regress(z,[1 x])

p1 \hat{y} = -0.0205 - 0.0191x

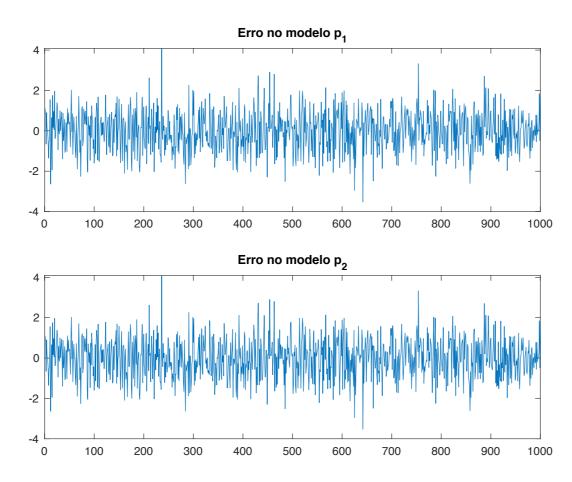
p2 \hat{z} = -0.0205 + 5.0191x
```

Que conclusões podemos obter destes modelos?

$$\hat{y} = -0.0205 - 0.0191$$

$$\hat{z} = -0.0205 + 5.0191x$$

Que conclusões podemos obter destes modelos?



Análise das estatísticas da regressão

```
[b, \text{CI}, \text{stats}] = \text{regress}(\text{y}, [\text{o x}]) b = [b_0, b_1] Assume-se que b_0 \neq 0 CI = Confidence interval para b stats=  R2 \text{ statistic},  the F-statistic and its  p\text{-value},  estimate of the error variance.
```

The *F*-test looks for a significant linear regression relationship between the response variable and the predictor variables.

Se $R^2 \approx 1$ e p-value << $(1-\alpha)$, há evidências de que haja uma regressão linear

$$\hat{y} = -0.0205 - 0.0191x$$

b =

-0.0205 0.0191

bint =

-0.0821 0.0412 -0.0425 0.0808

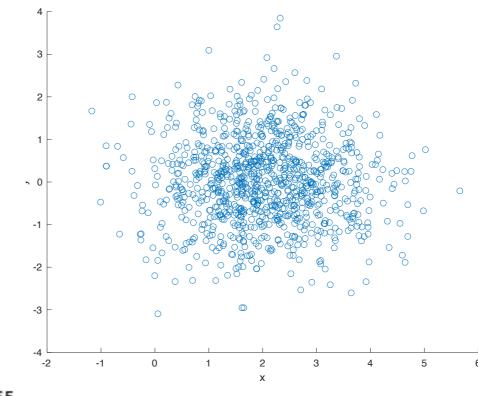
stats =

0.0004

0.3699

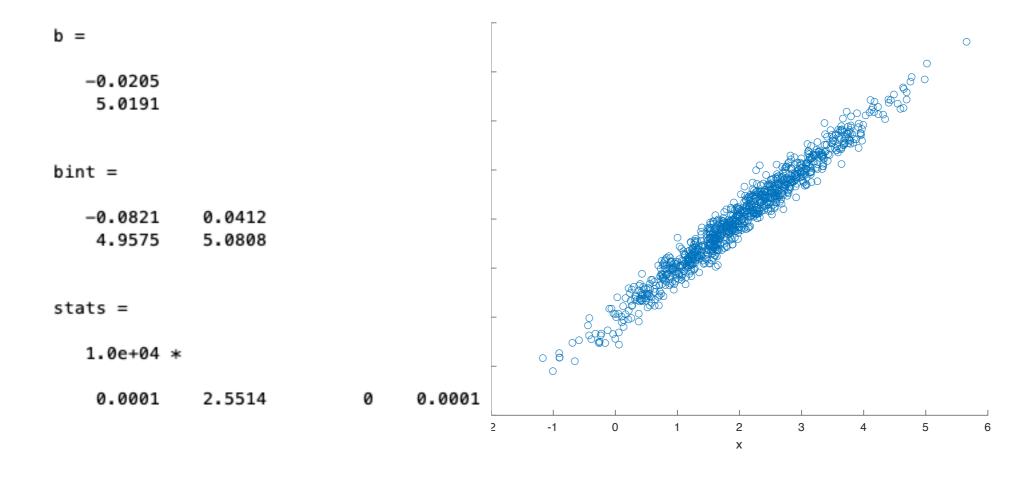
0.5432

0.9865



$$R^2, F, p$$
 – $value, \sigma$

$$\hat{z} = -0.0205 + 5.0191x$$



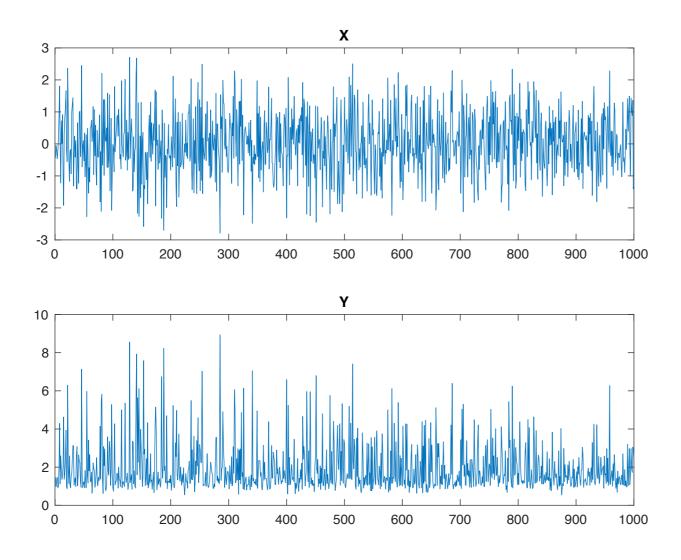
$$R^2$$
, F , p – $value$, σ

Outra alternativa é testar a correlação entre (x,y) e (x,z)

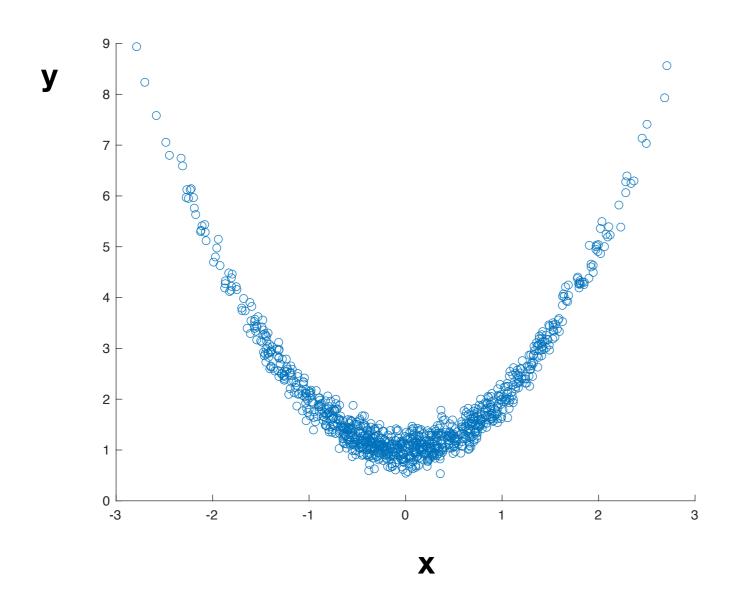
```
[r, p]=corr(y,x)
r=-0.0047
p=0.8827
```

Portanto, os testes estatísticos tem grande importância para decisões sobre a existência ou não de modelos de correlação

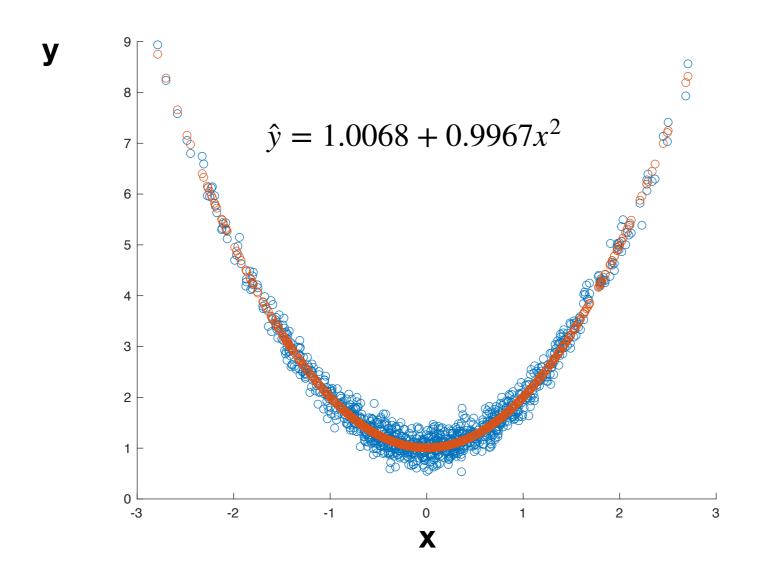
Atenção: não linearidade



[r, p]=corr(y,x) r=0.0322 p=0.3091

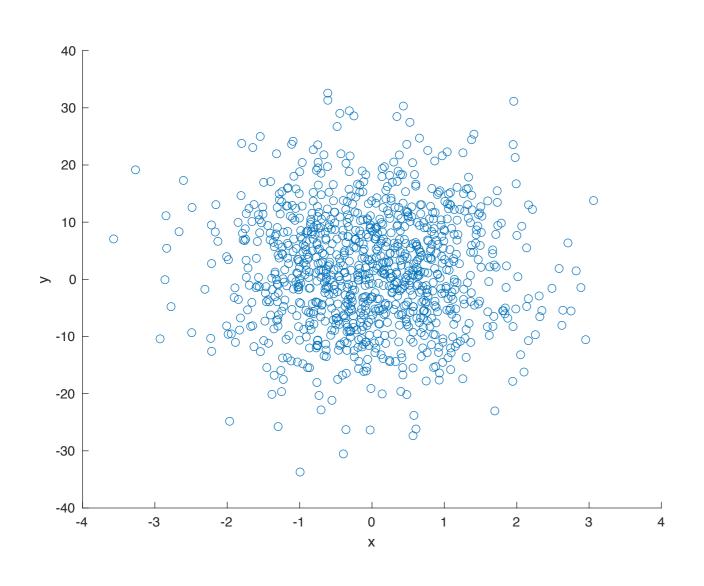


[r, p]=corr(y,x) r=0.0322 p=0.3091



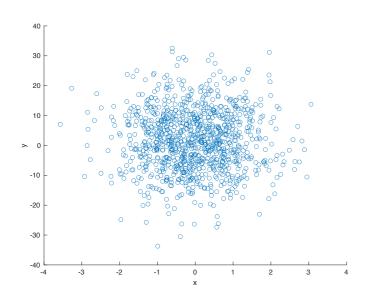
[r, p]=corr(y,x) r=0.0322 p=0.3091

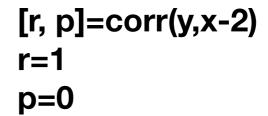
Outro caso: atraso entre x e y

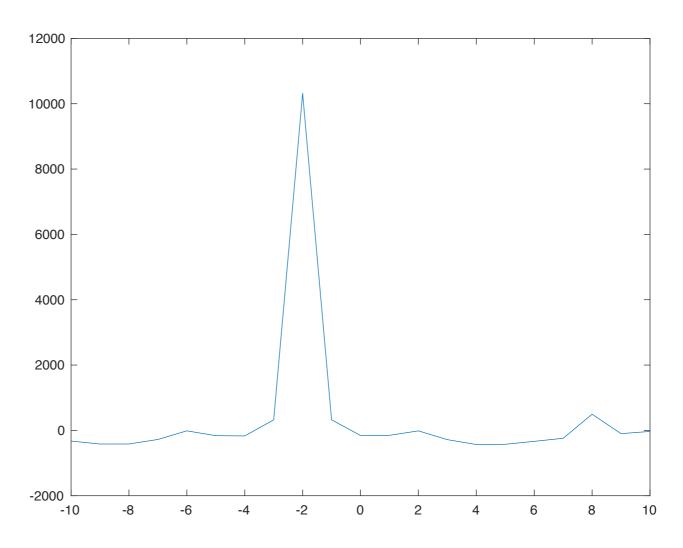


[r, p]=corr(y,x) r=-0.0093 p=0.7699

Outro caso:atraso entre y e x







Usar testes de correlação não-linear também:

Kendall, Spearman, são exemplos.

No Matlab,

[r, p]=corr(y,x, 'Type', 'Spearman')

Conclusão: Usar:

- Testes estatísticos
- Investigar atrasos
- Análise visual
- Testes nos modelos ajustados

Suponha que haja evidências de que os pontos estão distribuídos em torno de uma reta, para um intervalo de valores de x.

Neste caso, é razoável acreditar que os valores médios de Y podem ser previstos a partir dos valores de X através da equação

$$E(Y/x) = \mu_{Y|x} = \beta_0 + \beta_1 x$$

onde a declividade e interseção são os parâmetros da regressão.

Enquanto o valor médio de Y seja uma função x, o valor observado de y não cai em geral sobre essa reta.

Uma forma adequada para generalizar é supor um modelo probabilístico, em qual o valor médio de Y seja uma função de x mais um termo aleatório,

$$E(Y/x) = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon$$

Podemos considerar este modelo como empírico

• Lembrando que:

Valor Esperado

- E[c] = c
 - E[cX] = cE[X]
 - E[X + Y] = E[X] + E[Y]
 - E[XY] = E[X]E[Y]
 - E[aX + b] = aE[X] + b

Variância

- Definição: $V(X) = E[X^2] E[X]^2 = E[X E[X]]^2$
 - V(c) = 0
 - $V(cX) = c^2 V(X)$
 - V(X+c) = V(X)
 - V(X + Y) = V(X) + V(Y) se X e Y forem independentes
 - V(X Y) = V(X) + V(Y) se X e Y forem independentes
 - V(X + Y) = V(X) + V(Y) + 2Cov(X, Y)
 - V(X Y) = V(X) + V(Y) 2Cov(X, Y)
 - $V(\sum_i X_i) = \sum_i V(X_i) + 2 \sum_{i < j} Cov(X_i, X_j)$
 - V(X) = Cov(X, X)

A componente aleatória ϵ determina as propriedades de Y.

$$E(Y/x) = E(\beta_0 + \beta_1 x + \epsilon) = \beta_0 + \beta_1 x + E(\epsilon) = \beta_0 + \beta_1 x$$

$$V(Y/x) = V(\beta_0 + \beta_1 x + \epsilon) = V(\beta_0 + \beta_1 x) + V(\epsilon) = 0 + V(\epsilon) = \sigma^2$$

A variabilidade de Y para um valor de x é determinada pela variância σ^2

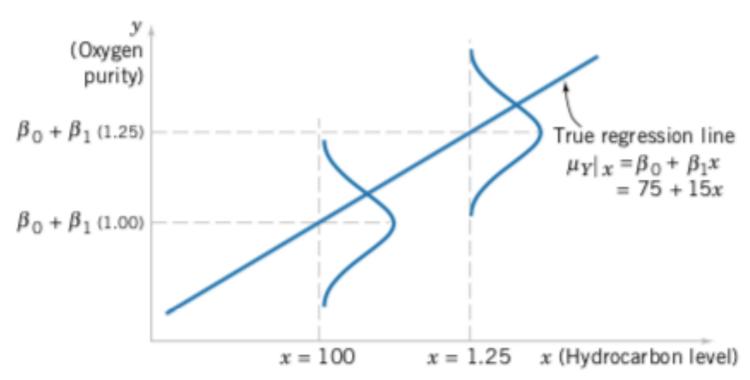


Figure 11-2 The distribution of Y for a given value of x for the oxygen purity-hydrocarbon data.

$$E(Y/x) = \beta_0 + \beta_1 x$$

Assumimos que cada nova observação Y pode ser dada por

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon$$

onde ϵ é um erro aleatório com média zero e variância σ^2 . Assume-se que os erros de diferentes observações não são correlacionados.

Como obter os parâmetros β_0 e β_1 do modelo?

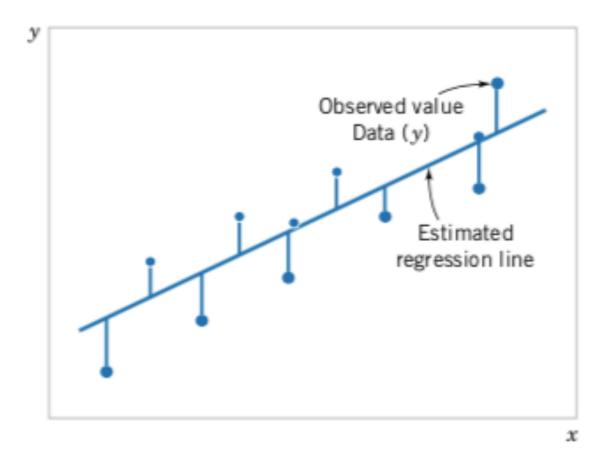


Figure 11-3 Deviations of the data from the estimated regression model.

Os parâmetros β_0 e β_1 do modelo são obtidos pelo método dos mínimos quadrados.

As n observações podem ser escritas por

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i$$
, $i = 1, 2, ..., n$

Os desvios das observações em relação ao modelo são dadas por

$$L = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

The least squares estimators of β_0 and β_1 , say, $\hat{\beta}_0$ and $\hat{\beta}_1$, must satisfy

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_0}\bigg|_{\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1} = -2\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_1}\Big|_{\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1} = -2\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)x_i = 0$$

Simplificando,

$$n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$\hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^n x_i + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i x_i$$

Essas duas equações fornecem os dois estimadores de mínimos quadrados, $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$.

Definição

The **least squares estimates** of the intercept and slope in the simple linear regression model are

$$\hat{\beta}_{0} = \bar{y} - \hat{\beta}_{1}\bar{x}$$

$$\hat{\beta}_{1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_{i} x_{i} - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} y_{i}\right)\left(\sum_{i=1}^{n} x_{i}\right)}{n}}{\sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2} - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_{i}\right)^{2}}{n}}$$
(11-8)

where
$$\overline{y} = (1/n) \sum_{i=1}^{n} y_i$$
 and $\overline{x} = (1/n) \sum_{i=1}^{n} x_i$.

The **fitted** or **estimated regression line** is therefore

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$$

Note that each pair of observations satisfies the relationship

$$y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i + e_i, \quad i = 1, 2, ..., n$$

Resíduo: $e_i = y_i - \hat{y}_i$

Símbolos para a equação (11.8):

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n}$$
(11-10)

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} y_i (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)}{n}$$
(11-11)

Table 11-1 Oxygen and Hydrocarbon Levels

| Observation Number | Hydrocarbon Level $x(\%)$ | Purity y (%) |
|-----------------------|---------------------------|--------------|
| 1 | 0.99 | 90.01 |
| 2 | 1.02 | 89.05 |
| 3 | 1.15 | 91.43 |
| 4 | 1.29 | 93.74 |
| 5 | 1.46 | 96.73 |
| 6 | 1.36 | 94.45 |
| 7 | 0.87 | 87.59 |
| 8 | 1.23 | 91.77 |
| 9 | 1.55 | 99.42 |
| 10 | 1.40 | 93.65 |
| 11 | 1.19 | 93.54 |
| 12 | 1.15 | 92.52 |
| 13 | 0.98 | 90.56 |
| 14 | 1.01 | 89.54 |
| 15 | 1.11 | 89.85 |
| 16 | 1.20 | 90.39 |
| 17 | 1.26 | 93.25 |
| 18 | 1.32 | 93.41 |
| 19 | 1.43 | 94.98 |
| 20 | 0.95 | 87.33 |

Exemplo 11.1

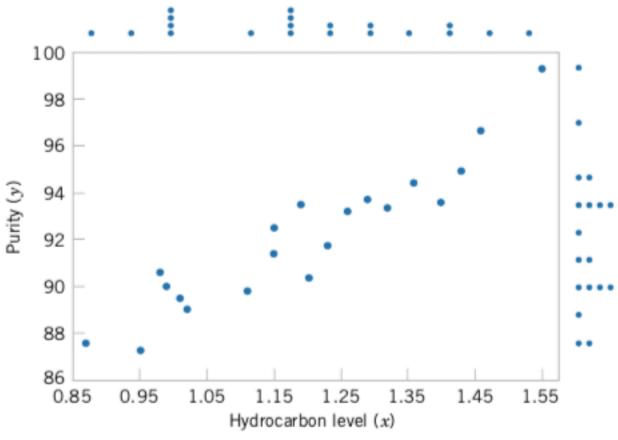


Figure 11-1 Scatter diagram of oxygen purity versus hydrocarbon level from Table 11-1.

Exemplo 11.1

$$n = 20$$
 $\sum_{i=1}^{20} x_i = 23.92$ $\sum_{i=1}^{20} y_i = 1,843.21$ $\bar{x} = 1.1960$ $\bar{y} = 92.1605$ $\sum_{i=1}^{20} y_i^2 = 170,044.5321$ $\sum_{i=1}^{20} x_i^2 = 29.2892$ $\sum_{i=1}^{20} x_i y_i = 2,214.6566$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{20} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{20} x_i\right)^2}{20} = 29.2892 - \frac{(23.92)^2}{20} = 0.68088$$

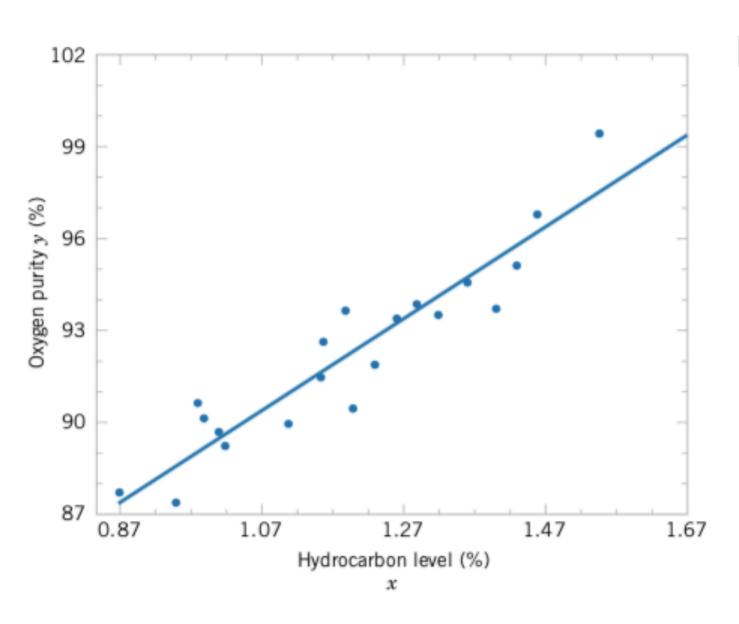
and

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^{20} x_i y_i - \frac{\left(\sum_{i=1}^{20} x_i\right) \left(\sum_{i=1}^{20} y_i\right)}{20} = 2,214.6566 - \frac{(23.92)(1,843.21)}{20} = 10.17744$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{10.17744}{0.68088} = 14.94748$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 92.1605 - (14.94748)1.196 = 74.28331$$

$$\hat{y} = 74.283 + 14.947x$$



Exemplo 11.1

Estimativa da variância

Exemplo 11.1

There is actually another unknown parameter in our regression model, σ^2 (the variance of the error term ϵ). The residuals $e_i = y_i - \hat{y}_i$ are used to obtain an estimate of σ^2 . The sum of squares of the residuals, often called the **error sum of squares**, is

$$SS_E = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 (11-12)

We can show that the expected value of the error sum of squares is $E(SS_E) = (n-2)\sigma^2$. Therefore an **unbiased estimator** of σ^2 is

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SS_E}{n-2} \tag{11-13}$$

Estimativa da variância

Exemplo 11.1

$$SS_E = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 (11-12)

Computing SS_E using Equation 11-12 would be fairly tedious. A more convenient computing formula can be obtained by substituting $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$ into Equation 11-12 and simplifying.

The resulting computing formula is

$$SS_E = SS_T - \hat{\beta}_1 S_{xy} \tag{11-14}$$

where $SS_T = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - n\bar{y}^2$ is the **total sum of squares of the response** variable y. The error sum of squares and the estimate of σ^2 for the oxygen purity data, $\hat{\sigma}^2 = 1.18$, are highlighted in the Minitab output in Table 11-2.

Os valores dos estimadores β_1 e β_0 dependem dos valores observados y

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon$$

Portanto, os estimadores por mínimos quadrados da regressão linear podem ser considerados variáveis aleatórias.

Podemos investigar a polarização (bias) e a variância de $\hat{\beta_0}$ e $\hat{\beta_1}$

A propriedade da não polarização garante que os valores estimados do parâmetro estão em torno do valor verdadeiro.

Espera-se que um estimador seja não polarizado e tenha pequena variância.

$$E(\hat{\beta_1}) = \beta_1$$

Portanto, $\hat{\beta}_1$ é um estimador não polarizado da inclinação β_1

Como $V(\epsilon_1) = \sigma^2$, segue que $V(Y_i) = \sigma^2$ e

$$V(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$$

Para \hat{eta}_0

$$E(\hat{\beta}_0) = \beta_0$$
 and $V(\hat{\beta}_0) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}} \right]$

Portanto, $\hat{\beta}_0$ é um estimador não polarizado de β_0 .

Por fim,

$$\operatorname{cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = -\sigma^2 \overline{x} / S_{xx}.$$

Definição:

In simple linear regression the estimated standard error of the slope and the estimated standard error of the intercept are

$$se(\hat{\beta}_1) = \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{S_{xx}}}$$
 and $se(\hat{\beta}_0) = \sqrt{\hat{\sigma}^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}\right]}$

respectively, where $\hat{\sigma}^2$ is computed from Equation 11-13.

Propriedades do estimador de mínimos quadrados

Conclusões:

- $\hat{\beta}_1$ is normally distributed with mean β_1 and variance $\frac{\sigma^2}{S_{xx}}$;
- $\hat{\beta}_0$ is normally distributed with mean β_0 and variance $\sigma^2 \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{nS_{rr}}$;
- $\frac{(n-2)S^2}{\sigma^2}$ has a χ^2 distribution with n-2 degrees of freedom;
- S^2 is independent of $\hat{\beta}_0$ and $\hat{\beta}_1$.

Os resíduos tem distribuição normal e são independentemente distribuídos (normally and independently distributed-NID)

$$\epsilon_i$$
 são $NID(0,\sigma^2)$

As observações Y_i são $NID(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$

$$\hat{\beta}_1 = NID(\beta_1, \frac{\sigma^2}{S_{xx}})$$
 uma combinação linear de variáveis aleatórias

 $(n-2)\hat{\sigma}^2/\sigma^2$ tem distribuição chi-quadrado com n-2 graus de liberdade

A estatística

$$T_0 = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_{1,0}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 / S_{xx}}}$$

$$T_0 = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_{1,0}}{se(\hat{\beta}_1)}$$

segue uma distribuição t com n-2 graus de liberdade

A hipótese H_0 : $\beta_1=\beta_{1,0}$ seria rejeitada se

$$|t_0| > t_{\alpha/2, n-2}$$

A similar procedure can be used to test hypotheses about the intercept. To test

$$H_0: \beta_0 = \beta_{0,0}$$

 $H_1: \beta_0 \neq \beta_{0,0}$ (11-21)

we would use the statistic

$$T_0 = \frac{\hat{\beta}_0 - \beta_{0,0}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{rr}} \right]}} = \frac{\hat{\beta}_0 - \beta_{0,0}}{se(\hat{\beta}_0)}$$
(11-22)

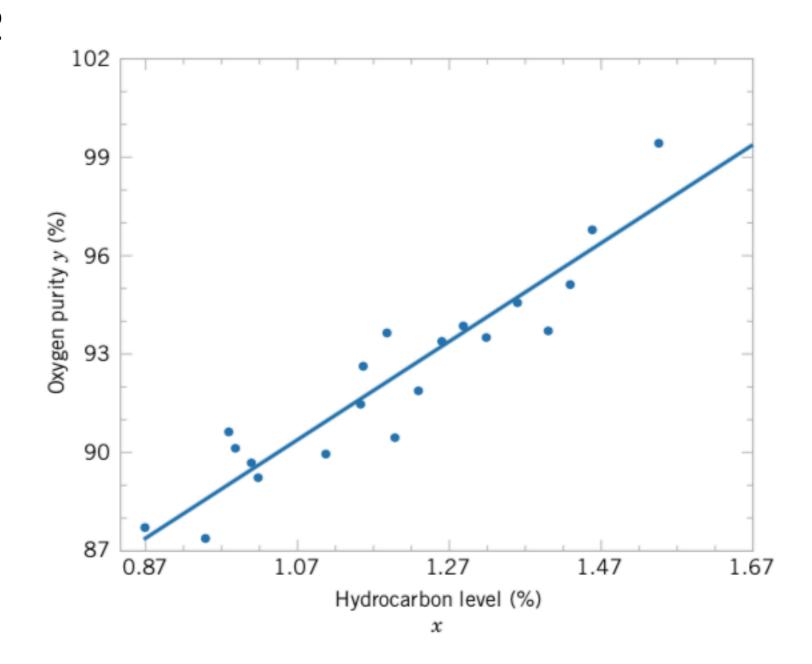
and reject the null hypothesis if the computed value of this test statistic, t_0 , is such that $|t_0| > t_{\alpha/2,n-2}$. Note that the denominator of the test statistic in Equation 11-22 is just the standard error of the intercept.

Significância da regressão

$$H_0$$
: $\beta_1 = 0$
 H_1 : $\beta_1 \neq 0$

A falha em rejeitar $H_0: \beta_1=0$ é equivalente a concluir que não há regressão entre x e y. Ou seja, x e y não estão relacionados, pelo menos pelo modelo de regressão.

Exemplo 11-2



Exemplo 11-2

We will test for significance of regression using the model for the oxygen purity data from Example 11-1. The hypotheses are

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_1$$
: $\beta_1 \neq 0$

and we will use $\alpha = 0.01$. From Example 11-1 and Table 11-2 we have

$$\hat{\beta}_1 = 14.97$$
 $n = 20$, $S_{xx} = 0.68088$, $\hat{\sigma}^2 = 1.18$

so the *t*-statistic in Equation 10-20 becomes

$$t_0 = \frac{\hat{\beta}_1}{\sqrt{\hat{\sigma}^2/S_{xx}}} = \frac{\hat{\beta}_1}{se(\hat{\beta}_1)} = \frac{14.947}{\sqrt{1.18/0.68088}} = 11.35$$

 $t_{0.005,18} = 2.88$ A hipotese H_0 deve ser rejeitada

IC dos coeficientes de regressão linear

Under the assumption that the observations are normally and independently distributed, a $100(1 - \alpha)\%$ confidence interval on the slope β_1 in simple linear regression is

$$\hat{\beta}_1 - t_{\alpha/2, n-2} \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{S_{xx}}} \le \beta_1 \le \hat{\beta}_1 + t_{\alpha/2, n-2} \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{S_{xx}}}$$
 (11-29)

Similarly, a $100(1 - \alpha)\%$ confidence interval on the intercept β_0 is

$$\hat{\beta}_{0} - t_{\alpha/2, n-2} \sqrt{\hat{\sigma}^{2} \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^{2}}{S_{xx}} \right]}$$

$$\leq \beta_{0} \leq \hat{\beta}_{0} + t_{\alpha/2, n-2} \sqrt{\hat{\sigma}^{2} \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^{2}}{S_{xx}} \right]}$$
(11-30)

IC dos coeficientes de regressão linear

Exemplo 11-1

We will find a 95% confidence interval on the slope of the regression line using the data in Example 11-1. Recall that $\hat{\beta}_1 = 14.947$, $S_{xx} = 0.68088$, and $\hat{\sigma}^2 = 1.18$ (see Table 11-2). Then, from Equation 10-31 we find

$$\hat{\beta}_1 - t_{0.025,18} \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{S_{xx}}} \le \beta_1 \le \hat{\beta}_1 + t_{0.025,18} \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{S_{xx}}}$$

or

$$14.947 - 2.101\sqrt{\frac{1.18}{0.68088}} \le \beta_1 \le 14.947 + 2.101\sqrt{\frac{1.18}{0.68088}}$$

This simplifies to

$$12.197 \le \beta_1 \le 17.697$$

Análise de resíduos

É importante checar se a suposição sobre os resíduos é válida, de que são independentes com distribuição normal e variância constante.

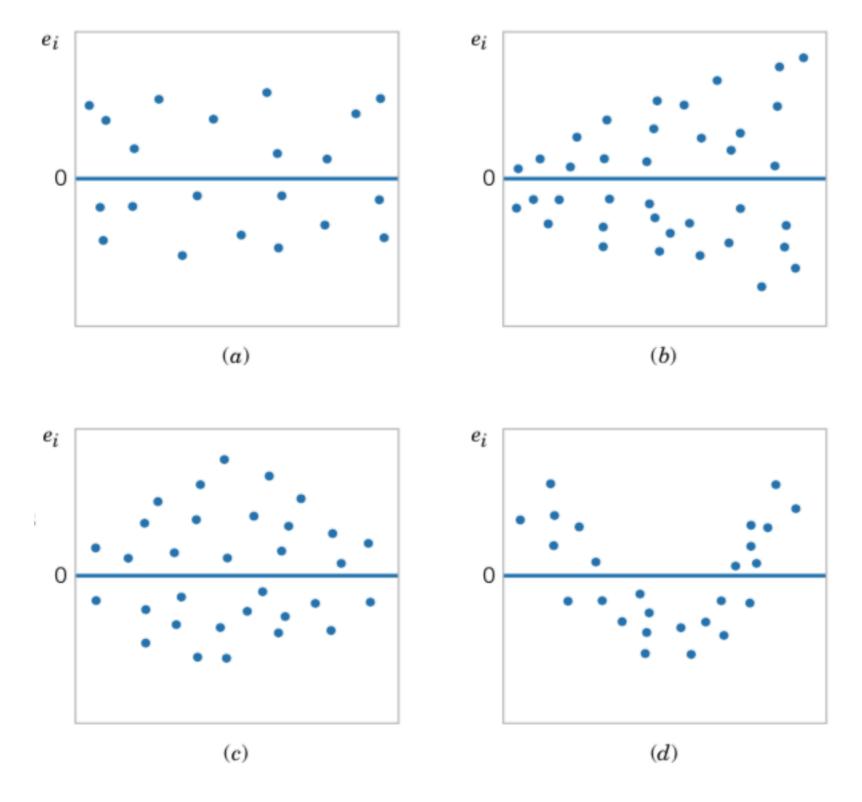
[c,lags]=xcorr(e)

Verificar a normalidade dos resíduos: normplot, histograma, valores dentro do intervalo de confiança

Também pode-se plotar os resíduos versus as observações y e a variável independe x

[c,lags]=xcorr(y,e)

Análise de resíduos



Coeficiente de regressão

A quantidade

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} = 1 - \frac{SS_E}{SS_T}$$

é chamada coeficiente de regressão, sendo usada normalmente para verificar a qualidade do modelo

$$SS_E = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$SS_T = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

 \mathbb{R}^2 : quanto mais próximo de 1, melhor

Coeficiente de regressão

Mau uso do coeficiente de regressão

Uso y Mal-Uso del Coeficiente de Regresión R² en Modelos de Correlación y Predicción

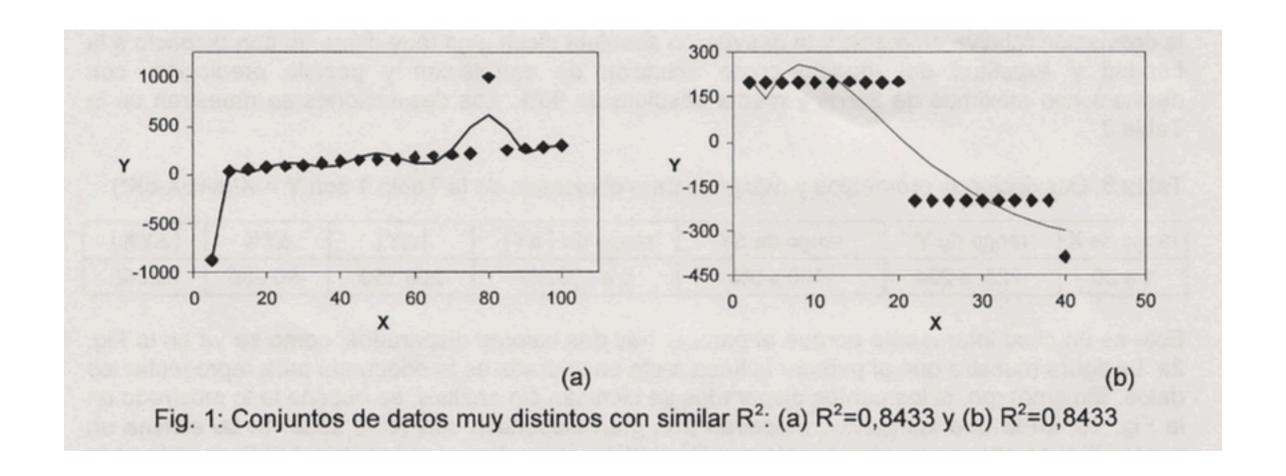
José O. Valderrama^{1, 2,} y Richard A. Campusano ^{2,3}

(1) Univ. de La Serena, Dpto. de Ingeniería Mecánica, Casilla 554, La Serena-Chile (2) Centro de Información Tecnológica, Casilla 724, La Serena – Chile

(3) Depto. de Física, Univ. de La Serena, Casilla 554, La Serena-Chile

Coeficiente de regressão

Mau uso do coeficiente de regressão



Uma importante aplicação da regressão linear é prever futuros valores Y para valores dados de x. Se x_0 é o valor da variável de regressão, então o valor futuro de Y_0 é dado pelo estimador pontual

$$\hat{Y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$$

Seja agora o problema de estimar um intervalo para futuros valores de Y. Essa nova observação é independente das observações usadas para construir o modelo de regressão.

O intervalo de confiança já calculado $\mu_{Y|x_0}$ não é apropriado pois é calculado usando os dados de regressão. Esse IC se refere ao valor real da resposta para $x=x_0$, que é um parâmetro da população, e não um valor futuro.

Seja Y_0 o valor observado futuro para $x=x_0$ e seja Y_0 dado por $\hat{Y}_0=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1x_0$

O erro de predição $e_p = Y_0 - \hat{Y}_0$ é uma variável aleatória com distribuição normal, média zero e variância

$$V(e_{\hat{p}}) = V(Y_0 - \hat{Y}_0) = \sigma^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]$$

pois Y_0 é independente de \hat{Y}_0

Usando $\hat{\sigma}^2$ para estimar σ , pode-se mostrar que

$$\frac{Y_0 - \hat{Y}_0}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}\right]}}$$

tem distribuição t com n-2 graus de liberdade.

Definição:

A $100(1 - \alpha)$ % **prediction interval on a future observation** Y_0 at the value x_0 is given by

$$\hat{y}_0 - t_{\alpha/2, n-2} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]}$$

$$\leq Y_0 \leq \hat{y}_0 + t_{\alpha/2, n-2} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]}$$
(11-33)

The value \hat{y}_0 is computed from the regression model $\hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$.

Observe que o intervalo é mínimo para $x = \bar{x}$

O erro de predição depende do erro do modelo de regressão e do erro dos futuros valores observados.

Ver Exemplo 11.6