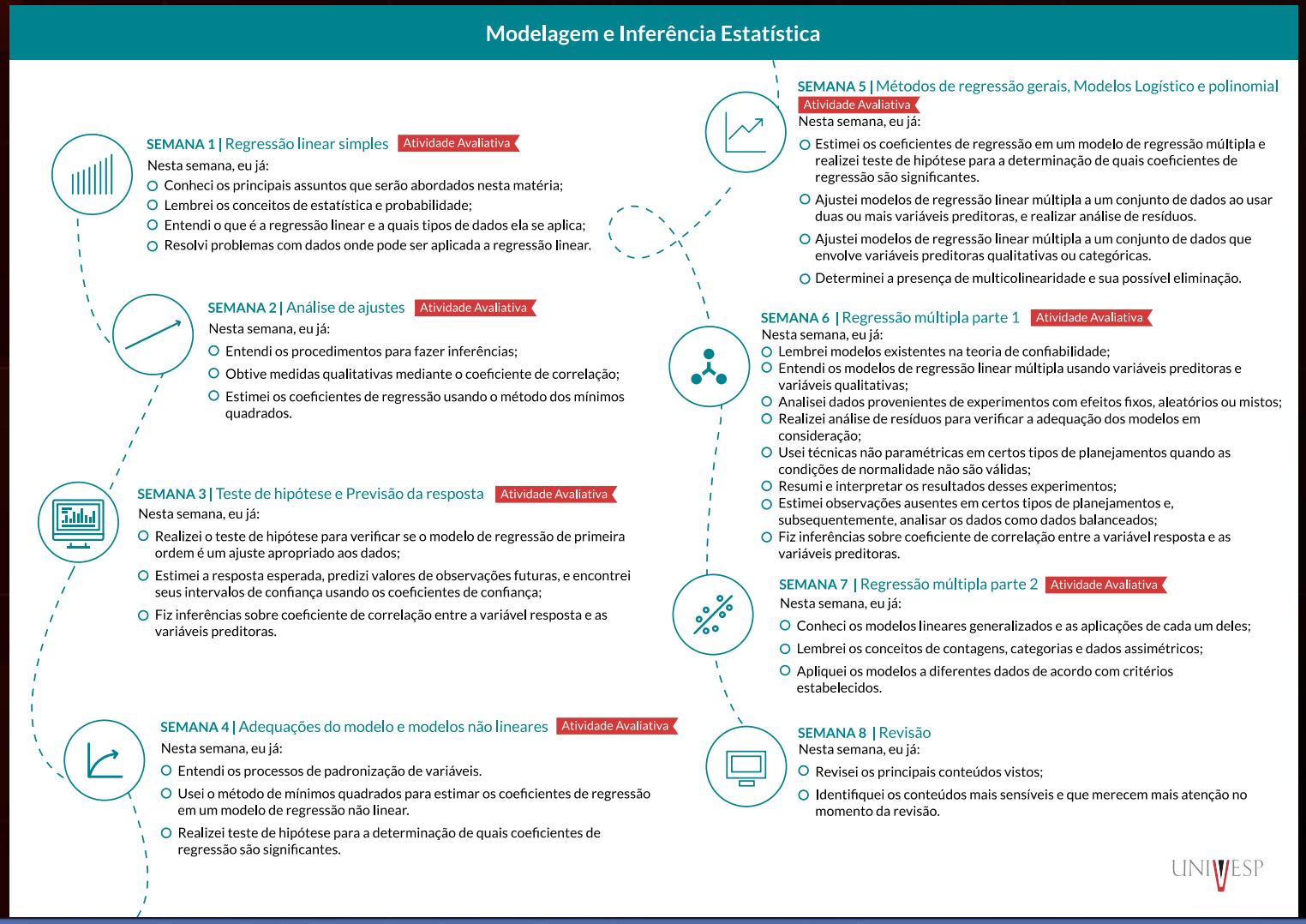
PES310 MODELAGEM E INFERÊNCIA ESTATÍSTICA

Revisão final

Resumo visual da disciplina



Algumas perguntas iniciais...

- Iremos aprender todas as bases estatísticas para fazer a análise de dados? A ciência de dados se preocupa em validar se os dados são confiáveis?

- Essa disciplina contempla cálculo numérico?

O modelo linear simples

Regressão linear simples

A regressão linear simples corresponde ao modelo mais simples que se pode propor para descrever a relação que eventualmente exista entre uma variável explanatória x e uma variável resposta Y

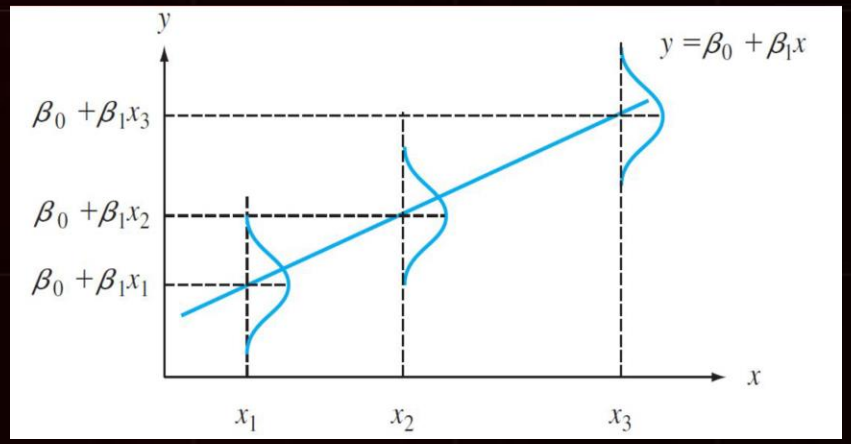
$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$$

Como não temos acesso à populações de Y, usamos dados para estimar os parâmetros β_0 e β_1

O modelo linear simples

Hipóteses do modelo linear simples

- Para cada valor da variável explicativa x, a distribuição populacional da resposta Y é normal, com média $\mu = \beta_0 + \beta_1 x$ e desvio padrão σ.



- A média geralmente muda para diferentes valores de x, enquanto o desvio padrão é o mesmo para todo x

O modelo linear simples

Hipóteses do modelo linear simples

- Se (x_i, y_i) denota um par de valores observados e $\hat{y}_i$ o valor previsto da resposta em $x = x_i$, então os resíduos

$$e_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)$$

são independentes

- Uma vez que tenhamos obtido a melhor estimativa dos parâmetros β_0 e β_1 e validado o modelo, podemos usá-lo para fazer predições para a resposta y em função de x e vice-versa

O modelo linear simples

Formulário

- A partir de um conjunto de observações (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)—isto é, dados—estimamos os parâmetros da regressão linear pelas fórmulas

$$\widehat{\beta}_1 = \frac{\sum_i (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_i (x_i - \overline{x})^2} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$$

$$\widehat{\beta}_0 = \overline{y} - \widehat{\beta}_1 \overline{x}$$

Validação do modelo linear

O modelo é útil?

- Geralmente propomos um modelo de regressão linear para fazer previsões. Portanto, devemos tanto quanto possível tentar validar a utilidade da reta de regressão estimada resultante $\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$

Avaliação do coeficiente de determinação

$$r^2 = 1 - \frac{SQE}{SQT} = 1 - \frac{S_{yy} - \hat{\beta}_1 S_{xy}}{S_{yy}}$$

Teste de significância

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

Validação do modelo linear

O coeficiente de determinação r^2

- Pode ser interpretado como a proporção da variação observada de y que pode ser atribuída a uma relação linear aproximada entre y e x (i.e., pelo modelo linear)
- O modelo é tanto mais adequado quanto r^2 for mais próximo de 1

A hipótese $H_0: \beta_1 = 0$

- Caso a hipótese H_0 seja plausível, o modelo não é adequado, pois $\beta_1 = 0$ significa que não existe relação entre y e x (poder de previsão nulo)

Validação do modelo linear

Teste da hipótese H_0: $\beta_1 = 0$

- Para realizar este teste de significância, precisamos conhecer a distribuição amostral de $\hat{\beta}_1$
- Sob as suposições para regressão linear simples $\hat{\beta}_1 \sim N(\beta_1, \sigma_{\hat{\beta}_1})$, onde a variância e o dp de $\hat{\beta}_1$ valem

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

Na prática desconhecemos $\sigma_{\hat{\beta}_1}$ e utilizamos a estimativa empírica $s_{\hat{\beta}_1}$ em seu lugar

Validação do modelo linear

Teste da hipótese H_0: $\beta_1 = 0$

- A fim de construir um intervalo de confiança (IC) para o estimador $\hat{\beta}_1$ de β_1 normalizamos essa variável

$$t = \frac{\hat{\beta}_1}{s_{\hat{\beta}_1}}$$

- Essa estatística t corresponde à razão de uma v. a. normal por outra v. a. do tipo χ^2 e possui portanto distribuição t de Student—no caso, de $n - 2$ graus de liberdade (gl ou df)

Validação do modelo linear

Teste da hipótese H_0: $\beta_1 = 0$

- O intervalo de confiança de nível $1 - \alpha$ para a estatística t é dado por

$$P\left(-t_{\alpha/2,n-2} < t < t_{\alpha/2,n-2}\right) \geq 1 - \alpha$$

- Encontrando o valor crítico $t_{\alpha/2,n-2}$ em uma tabela da distribuição t de Student estabelecemos o IC de nível $100\%(1 - \alpha)$ para a inclinação β_1 da linha de regressão da população na forma

$$\widehat{\beta}_1 \pm t_{\alpha/2,n-2} \cdot s_{\widehat{\beta}_1}$$

Validação do modelo linear

Teste da hipótese H_0: $\beta_1 = 0$

Normalmente $\alpha = 0,05$, i.e., confiança $c = 1 - \alpha = 0,95$

Hipótese nula: H_0: $\beta_1 = \beta_{10}$

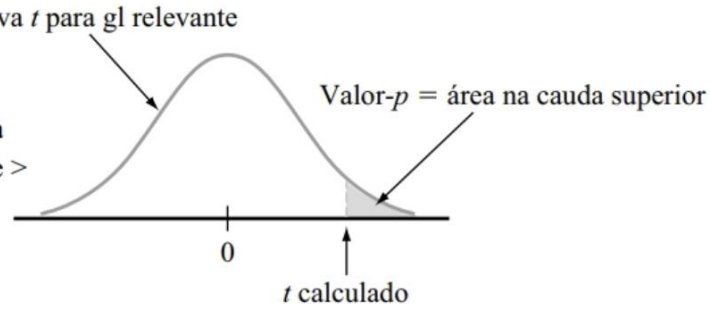
Valor da estatística do teste: $t = \dfrac{\hat{\beta}_1 - \beta_{10}}{s_{\hat{\beta}_1}}$

Hipótese alternativa	Determinação do valor-*p*
H_a: $\beta_1 > \beta_{10}$	Área sob a curva t_{n-2} à direita de t
H_a: $\beta_1 < \beta_{10}$	Área sob a curva t_{n-2} à esquerda de t
H_a: $\beta_1 \neq \beta_{10}$	$2 \cdot$ (Área sob a curva t_{n-2} à direita de $\lvert t \rvert$)

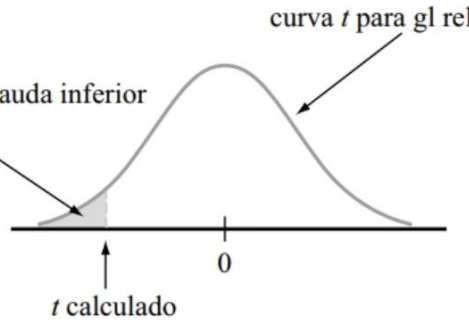
O **teste de utilidade do modelo** é o teste de H_0: $\beta_1 = 0$ *versus* H_a: $\beta_1 \neq 0$, sendo o valor da estatística de teste a **razão** $\boldsymbol{t} = \hat{\beta}_1 / s_{\hat{\beta}_1}$.

Validação do modelo linear

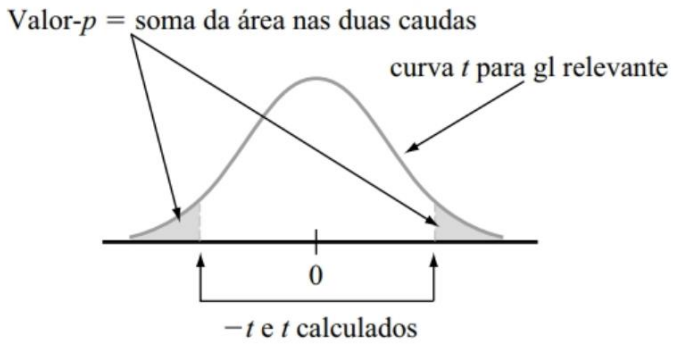
1. **Teste unilateral à direita**
   H_a contém a desigualdade >



2. **Teste unilateral à esquerda**
   H_a contém a desigualdade <



3. **Teste bilateral**
   H_a contém a desigualdade ≠



Predição de valores futuros

Um intervalo de confiança para $\widehat{Y}$

A partir das estimativas de $\widehat{\beta}_0$ e $\widehat{\beta}_1$ podemos estimar o valor de $\mu_{Y|x^*}$ para um valor dado de x^* a partir do estimador $\widehat{Y} = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x^*$

Essa estimativa pontual não fornece informações sobre a precisão da estimativa de $\widehat{Y}$...

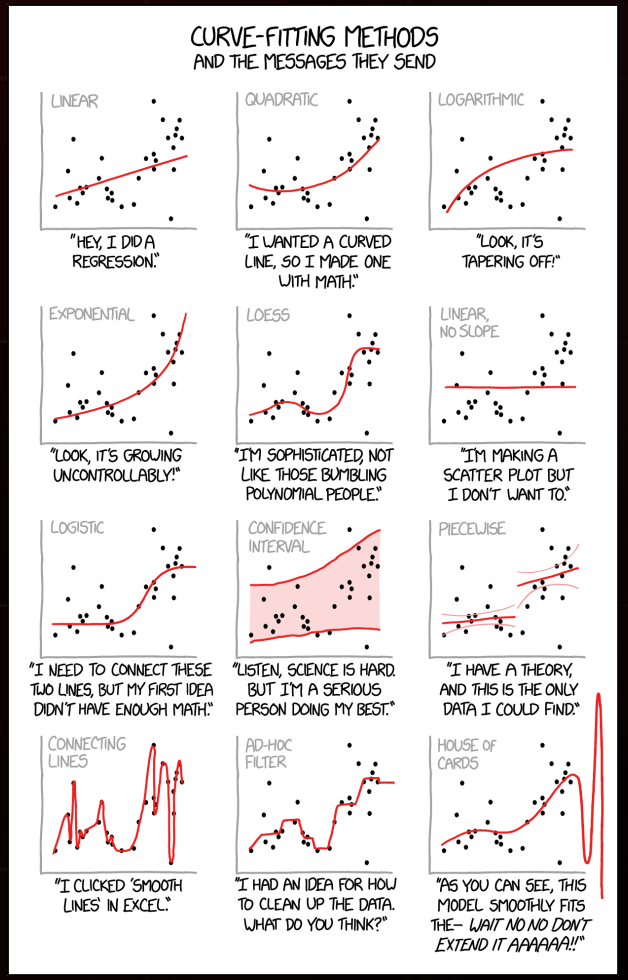
Solução: construir um intervalo de confiança para $\widehat{Y}$ usando o desvio padrão de $\widehat{Y} = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x^*$

$$s_{\widehat{Y}} = s\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x^* - \overline{x})^2}{S_{xx}}}$$

Modelos não lineares

Às vezes a regressão linear simples não funciona...

(Fonte xkcd #2048)



Modelos não lineares

Inadequação de modelos lineares

- Caso se constate que um modelo de regressão linear simples não descreve adequadamente os dados, pode-se tentar modelos não lineares ou de regressão múltipla
- Análise de adequação: resíduos padronizados

$$e_i^* = \frac{y_i - \hat{y}_i}{s\sqrt{1 - \frac{1}{n} - \frac{(x^* - \overline{x})^2}{S_{xx}}}}$$

quase todos os e_i^* recaem no intervalo $(-2, 2)$

Modelos não lineares

Nem todo modelo não linear é difícil

Os principais modelos não lineares usados em uma primeira abordagem são obtidos de um modelo linear por transformações de variáveis

Tabela 13.1 Funções intrinsecamente lineares úteis*

Função	Transformação(ões) para linearizar	Forma linear
a. Exponencial: $y = \alpha e^{\beta x}$	$y' = \ln(y)$	$y' = \ln(\alpha) + \beta x$
b. Potência: $y = \alpha x^{\beta}$	$y' = \log(y), x' = \log(x)$	$y' = \log(\alpha) + \beta x'$
c. $y = \alpha + \beta \times \log(x)$	$x' = \log(x)$	$y = \alpha + \beta x'$
d. Recíproca: $y = \alpha + \beta \cdot \frac{1}{x}$	$x' = \frac{1}{x}$	$y = \alpha + \beta x'$

* Quando log (·) aparece, tanto a base 10 quanto a base *e* podem ser usadas.

Modelos não lineares

Nem todo modelo não linear é difícil

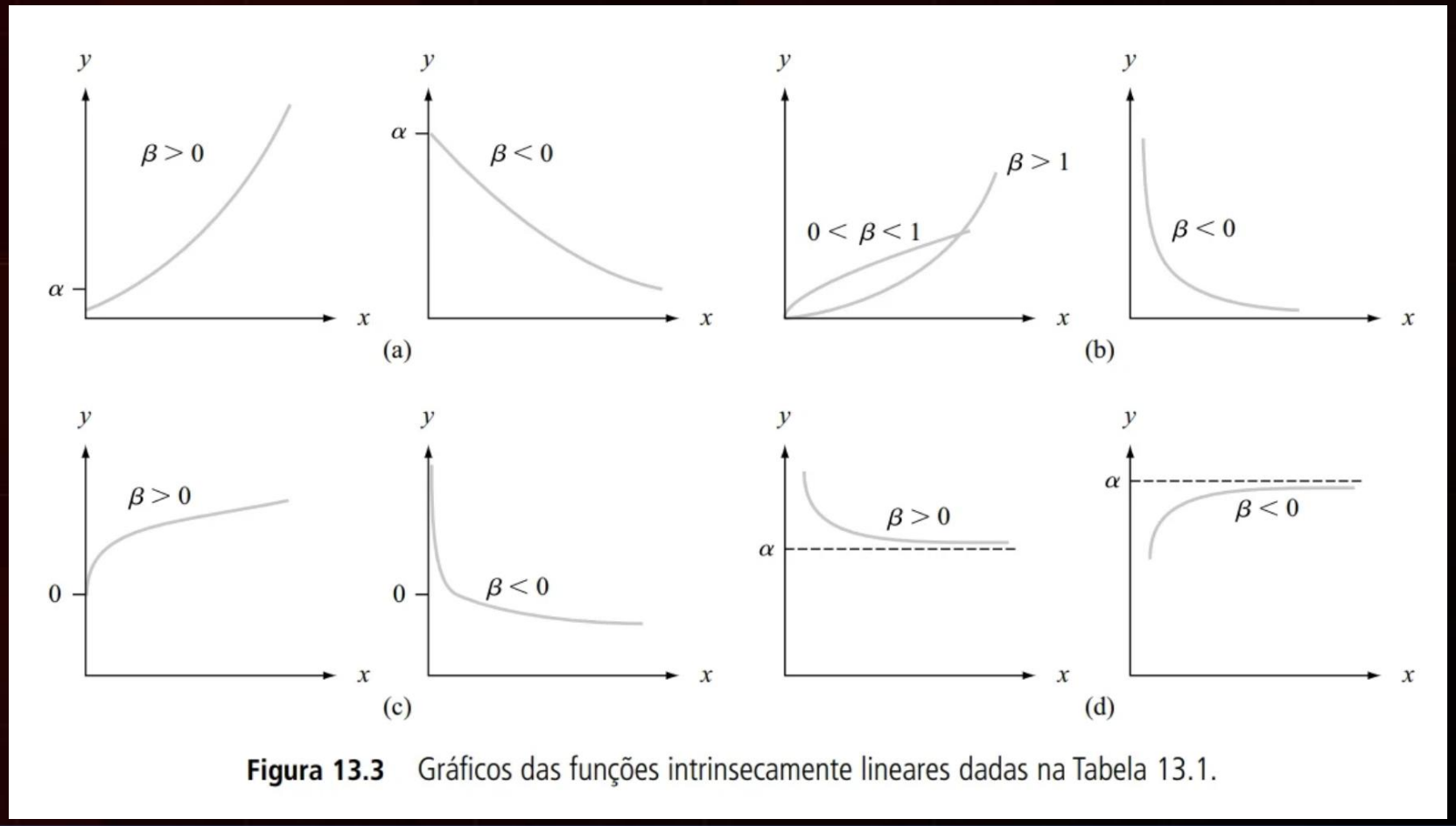


Figura 13.3 Gráficos das funções intrinsecamente lineares dadas na Tabela 13.1.

Modelos não lineares

Modelos intrinsecamente lineares

- Um modelo relacionando Y com x é intrinsecamente linear se por meio de uma transformação em Y ou x ou ambos puder ser reduzido a um modelo probabilístico linear $Y' = \beta_0 + \beta_1 x' + \varepsilon'$
- A vantagem de um modelo intrinsecamente linear é que os parâmetros β_0 e β_1 do modelo transformado podem ser imediatamente estimados usando o princípio dos mínimos quadrados simplesmente substituindo x' e y' nas fórmulas de estimativa

Métodos de regressão gerais

Modelos logístico e polinomial

- Muitas vezes a variável de resposta Y não tem suporte em toda a reta—por exemplo, é uma variável binária (0 ou 1), de contagem, estritamente positiva...
- Nestes casos, podemos empregar **modelos lineares generalizados** para ajustar os dados
- Os dois modelos lineares generalizados são o **modelo logístico** e o **modelo polinomial**

Métodos de regressão gerais

Modelos logístico

- Y assume dois valores (0 ou 1) dependendo do valor de alguma variável quantitativa $P(Y_i = 1 \mid x_i) = p(x_i)$
- Um modelo para $p(x)$ bastante útil é aquele que relaciona a razão das chances $p(x)/(1-p(x))$ com

$$\frac{p(x)}{1-p(x)} = e^{\beta_0+\beta_1 x}$$

- Tomando o logaritmo natural em ambos os lados obtemos o modelo logístico (linear no preditor x)

$$\log\left(\frac{p(x)}{1-p(x)}\right) = \beta_0 + \beta_1 x$$

Métodos de regressão gerais

Modelos polinomiais

- Y não se comporta de maneira monotônica, às vezes crescendo em um intervalo e decrescendo em outro
- Nestes casos, podemos empregar modelos polinomiais para ajustar os dados

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots \beta_k x^k + \varepsilon$$

- As estimativas para $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k$ são obtidas pela resolução de um sistema linear $(k+1) \times (k+1)$

Métodos de regressão gerais

Modelos polinomiais

- No modelo de regressão polinomial, a estimativa da variância do erro é dada por

$$\hat{\sigma}^2 = s^2 = \frac{SQE}{n-(k+1)}$$

o denominador $n-(k+1)$ indica que $k+1$ graus de liberdade são perdidos na estimativa de $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k$

- O coeficiente de determinação múltipla ajustado vale

$$R^2\,(\text{ajustado}) = 1 - \frac{n-1}{n-(k+1)} \cdot \frac{SQE}{SQT}$$

Modelos de regressão múltipla

Modelos de regressão múltipla

- Modelo probabilístico que relacione uma variável dependente Y a mais de uma variável preditora

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots \beta_k x_k + \varepsilon$$

- O coeficiente de regressão β_i fornece a variação esperada em Y devido a uma variação em x_i enquanto as outras variáveis preditoras x_j, $j \neq i$, se mantêm constantes

Modelos de regressão múltipla

Modelos com interação e preditores quadráticos

- Modelos de regressão múltipla podem ser usados para formular modelos com interação entre as variáveis preditoras
- O modelo com interação mais geral envolvendo no máximo produtos quadráticos possui a forma geral (usando somente duas variáveis preditoras, x_1 e x_2, no exemplo, mas poderiam ser em maior número)

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 + \varepsilon$$

Modelos de regressão múltipla

Teste de utilidade de modelos com interação e preditores quadráticos

- Testamos a hipótese H_0 de que todos os $\beta_i = 0$ usando a estatística de teste

$$f = \frac{R^2/k}{(1 - R^2)/[n - (k + 1)]}$$

onde $R^2 = 1 - SQE/SQT = SQR/SQT$

- A estatística f possui distribuição $F_{k,n-(k+1)}$ de Fisher-Snedecor com k graus de liberdade "em cima" e $n - (k + 1)$ graus de liberdade "embaixo"

Dicas finais

- As videoaulas de “Revisando conhecimentos” são valiosas, em particular nas 3 primeiras semanas
- As videoaulas são integralmente baseadas nos exemplos resolvidos do texto-base de Jay L. Devore, *Probabilidade e Estatística para Engenharia e Ciências*, (trad. 9ª ed.), Capítulos 12 e 13
- Estudem com base nos exemplos resolvidos do texto-base—eles estão muito mais claros e detalhados do que nas videoaulas (devido à curta duração das videoaulas)

Bom estudo e bom final de ano a tod@s!