Introdução à Estatística usando o R com Aplicação em Análises Laboratoriais

Profa Carolina & Prof Gilberto

Instituto de Matemática e Estatística
Universidade Federal da Bahia

23 de novembro de 2019

Análise de Regressão

Análise de Regressão: conjunto de técnicas estatísticas utilizada quando há interesse em **investigar o comportamento de uma variável com respeito à um conjunto de outras variáveis**.

Problema de regressão: consiste em **estabelecer e determinar uma função que descreva a relação** entre uma variável, chamada de **variável resposta** ou dependente e **denotada por** Y, e um conjunto de variáveis observáveis, chamadas de variáveis explicativas ou **covariáveis** e **denotadas por** $x_1, x_2, \ldots, x_p$.

Análise de Regressão

Uma vez estabelecida e determinada a relação funcional entre a variável resposta e a(s) variável(is) explicativas, podemos explorar esta relação para obter informações sobre a variável resposta a partir do conhecimento das covariáveis.

Importante: as relações estatísticas não necessariamente implicam em relações causais, mas a presença de qualquer relação estatística fornece um ponto inicial para outras pesquisas.

Modelos de regressão: podem ser **usados para predição, estimação, testes de hipótese e para modelar relações casuais**.

Modelo de regressão linear simples

Considere o seguinte problema:

Uma engenheira industrial de uma empresa que engarrafa bebidas deve analisar as operações de entrega de produtos e serviços para máquinas de venda automática.

Ela suspeita que o tempo exigido para que um entregador carregue e conserte uma máquina esteja relacionado com o número de caixas de produtos entregues.

A engenheira selecionados aleatoriamente $n = 25$ estabelecimentos de varejo com máquinas de venda automática. Ela então visita os 25 estabelicimentos selecionados e observa o tempo de entrega na entrada (em minutos) e o volume de produto entregue (em caixas) para cada um.

Modelo de regressão linear simples

Seja:

- Y: variável que representa o tempo de entrega;
- x: variável que representa o volume entregue.

Então, para $i = 1, \ldots, n$, podemos escrever:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i. \tag{1}$$

Os parâmetros β_0 e β_1 são chamados de coeficientes da regressão.

Estes coeficientes têm uma interpretação simples e útil:

- o parâmetro β_1 é a mudança na média da distribuição de Y_i por cada aumento unitário de x_i;
- se a amplitude dos dados dos x_i inclui o zero, β_0 fornece a média da distribuição de Y_i quando $x_i = 0$. Quando a amplitude dos dados dos x_i não inclui o zero, β_0 não tem uma interpretação prática.

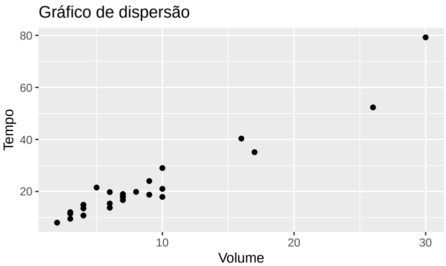
Modelo de regressão linear simples

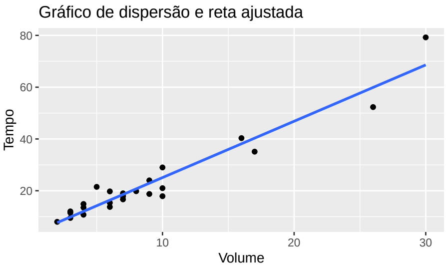
Os dados observados são os pares ordenados (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$.

```
dados <- read_xlsx("dados_regressao.xlsx",
                   sheet = "Tempo_Volume_Distancia")
glimpse(dados)
```

```
## Observations: 25
## Variables: 3
## $ Volume    <dbl> 7, 3, 3, 4, 6, 7, 2, 7, 30, 5, 16
## $ Distancia <dbl> 560, 220, 340, 80, 150, 330, 110,
## $ Tempo     <dbl> 16.68, 11.50, 12.03, 14.88, 13.75
```

Modelo de regressão linear simples





Modelo de regressão linear simples

Na Figura, os dados observados não estão exatamente sobre a reta. Logo, a equação (1) deve ser modificada para para acomodar este fenômeno.

Seja:

- ϵ uma variável aleatória (v.a.) não observável representando o erro entre a reta (1) e os valores observados de Y.É um erro estatístico, i.e., uma v.a. que explica a falha do modelo em ajustar os dados com exatidão.

Assim, um modelo estatístico mais plausível para o problema é dado por

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i; \quad i = 1, \ldots, n, \tag{2}$$

onde Y_i é a v.a. resposta, x_i é a variável preditora e ϵ_i é o erro aleatório.

Suposições do modelo de regressão linear simples

Suposição 1: $E(\epsilon_i) = 0$.

Suposição 2: $Var(\epsilon_i) = \sigma^2$.

Suposição 3: $cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0,\ i \neq j,\ j = 1, 2, \ldots, n$.

Estimação

O método de mínimos quadrados (MMQ) é mais utilizado do que qualquer outro procedimento de estimação em modelos de regressão.

O MMQ fornece os estimadores de β_0 e β_1 tal que a soma de quadrados das diferenças entre as observações y_i's e a linha reta ajustada seja mínima.

Assim, de todos os possíveis valores de β_0 e β_1, os estimadores de mínimos quadrados (EMQ) serão aqueles que minimizam a soma de quadrados dos erros.

Estimação

Os estimadores de mínimos quadrados (EMQ) de β_0 e β_1, denotados $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$, são dados por

$$\hat{\beta}_0 = \overline{Y} - \hat{\beta}_1 \overline{x}$$

e

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i x_i - n\overline{Y}\,\overline{x}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2},$$

onde $\overline{Y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i$ e $\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$ são as médias dos Y_i's e x_i's, respectivamente.

Portanto, $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ são os EMQ para o intercepto e inclinação, respectivamente.

Estimação

Os estimadores $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$ são não-viciados para os parâmetros do modelo β_0 e β_1. Isto é,

$$E(\hat{\beta}_1) = \beta_1$$

e

$$E(\hat{\beta}_0) = \beta_0.$$

A variância de $\hat{\beta}_1$ é dada por

$$\text{Var}(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2} = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}.$$

A variância de $\hat{\beta}_0$ é

$$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\overline{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2} \right) = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\overline{x}^2}{S_{xx}} \right).$$

Estimação

Reta de regressão estimada:

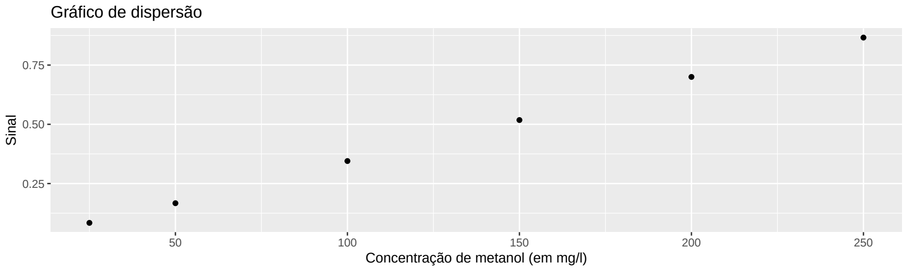
$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i,$$

A reta ajustada fornece a estimativa pontual da média de Y_i para um particular x_i.

O valor $\hat{y}_i$ é dito ser o valor predito de y_i.

Exemplo

```r
dados <- read_xlsx("dados.xlsx", sheet = "Metanol")

ggplot(data = dados) +
  geom_point(aes(x = x, y = y)) +
  labs(x = 'Concentração de metanol (em mg/l)',
       y = 'Sinal',
       title = 'Gráfico de dispersão')
```



Exemplo (continuação)

```
with(dados,
     cor.test(x, y,
              alternative = "two.sided",
              conf.level = 0.95))
```

```
##
##  Pearson's product-moment correlation
##
## data:  x and y
## t = 183.93, df = 4, p-value = 5.242e-09
## alternative hypothesis: true correlation is not equ
## 95 percent confidence interval:
##  0.9994318 0.9999939
## sample estimates:
##       cor
## 0.9999409
```

Exemplo (continuação)

```r
dados <- read_xlsx("dados.xlsx", sheet = "Metanol")

modelo <- lm(y ~ x, data = dados)
modelo
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x, data = dados)
##
## Coefficients:
## (Intercept)            x
##   -0.005112     0.003498
```

Estimação de σ^2

Resíduos:

A diferença entre o valor observado y_i e o valor predito $\hat{y}_i$ é um resíduo. Matematicamente, o $i-$ésimo resíduo é

$$e_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i), \; i = 1, \ldots, n.$$

Considere a soma de quadrados dos resíduos (SQR), definida por

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

Um estimador não viciado de σ^2 é

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SQR}{n-2} = QMR.$$

Teste de hipóteses

Suposição adicional: os erros ϵ_i do modelo são normalmente distribuídos.

Assim, as suposições completas do modelo de regressão linear simples (2) são: os erros são independentes e normalmente distribuídos com média zero e variância σ^2.

Teste de significância do modelo: um caso especial e muito importante em teste de hipóteses é testar

$$H_0 : \beta_1 = 0 \quad \textit{versus} \quad H_1 : \beta_1 \neq 0.$$

Podemos utilizar a análise de variância (ANOVA) para testar a significância da regressão.

A ANOVA é baseada no particionamento da variabilidade total da variável resposta Y.

Partição da soma de quadrados do modelo

Soma de quadrados total (SQT):

$$SQT = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2.$$

Soma de quadrados dos resíduos (SQR):

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

Soma de quadrados do modelo ou da regressão (SQM):

$$SQM = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \overline{y})^2.$$

Observação: $SQT = SQR + SQM$.

Partição da soma de quadrados do modelo

A separação dos graus de liberdade é determinado como segue.

SQT: tem $n - 1$ graus de liberdade.

SQR: tem $n - 2$ graus de liberdade.

SQM: tem 1 grau de liberdade.

Teste F (ANOVA)

Podemos utilizar o teste F da ANOVA para testar a hipótese $H_0 : \beta_1 = 0$.

Temos que:

$$F_0 = \frac{\frac{SQM}{gl_M}}{\frac{SQR}{gl_R}} = \frac{\frac{SQM}{1}}{\frac{SQR}{(n-2)}} = \frac{QMM}{QMR} \sim F_{1,n-2}.$$

Portanto, para testar a hipótese $H_0 : \beta_1 = 0$, calcula-se a estatística F_0 e rejeita-se H_0 se

$$F_0 > F_{\alpha,1,n-2}.$$

Analogamente, rejeitamos H_0 se o p-valor do teste for menor do que um nível de significância $\alpha \in (0, 1)$ pré-fixado.

Teste F (ANOVA)

Em resumo, temos a tabela ANOVA para testar a significância da regressão:

Fonte de Variação	Soma de Quadrados	Graus de Liberdade	Quadrado Médio	F_0
Modelo	SQM	1	QMM	$\dfrac{QMM}{QMR}$
Resíduo	SQR	$n-2$	QMR	
Total	SQT	$n-1$		

Exemplo

```r
dados <- read_xlsx("dados.xlsx", sheet = "Metanol")

modelo <- lm(y ~ x, data = dados)

anova_modelo <- anova(modelo)
```

Exemplo (continuação)

```
anova_modelo
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: y
##           Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
## x          1 0.46513 0.46513   33829 5.242e-09 ***
## Residuals  4 0.00005 0.00001
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Teste t para os parâmetros

Considere o teste

$$H_0 : \beta_j = \beta_{j_0} \quad \textit{versus} \quad H_1 : \beta_j \neq \beta_{j_0}.$$

$$T_0 = \frac{\hat{\beta}_j - \beta_{j_0}}{EP\left(\hat{\beta}_j\right)} \sim t_{n-2},$$

onde $EP\left(\hat{\beta}_j\right)$ é o erro padrão da estimativa, i.e,

$$EP\left(\hat{\beta}_j\right) = \sqrt{\widehat{\text{Var}}\,(\beta_j)}.$$

Esse procedimento rejeita a hipótese nula se

$$|T_0| > t_{\alpha/2,n-2}.$$

Analogamente, rejeitamos H_0 se o p-valor do teste for menor do que um nível de significância $\alpha \in (0, 1)$ pré-fixado.

Exemplo

```r
dados <- read_xlsx("dados.xlsx", sheet = "Metanol")

modelo <- lm(y ~ x, data = dados)

sum_modelo <- summary(modelo)
```

Exemplo (continuação)

```
sum_modelo
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x, data = dados)
##
## Residuals:
##          1          2          3          4          5          6
##  0.0016712 -0.0027699  0.0003479 -0.0015342  0.0055836 -0.0032986
##
## Coefficients:
##               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -5.112e-03  2.885e-03  -1.772    0.151
## x            3.498e-03  1.902e-05 183.927 5.24e-09 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.003708 on 4 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9999, Adjusted R-squared:  0.9999
## F-statistic: 3.383e+04 on 1 and 4 DF,  p-value: 5.242e-09
```

Coeficiente de determinação

O coeficiente de determinação é definido por

$$R^2 = \frac{SQM}{SQT} = 1 - \frac{SQR}{SQT},$$

- SQT: é uma medida de variabilidade em $\boldsymbol{y}$ sem considerar o efeito da variável regressora $\boldsymbol{x}$;
- SQR é uma medida da variabilidade remanescente em $\boldsymbol{y}$ após $\boldsymbol{x}$ ter sido considerada;
- então: R^2 é frequentemente dito ser a proporção de variação explicada pelo regressor $\boldsymbol{x}$.

Como $0 \leq SQR \leq SQT$, segue que $0 \leq R^2 \leq 1$.

Um valor de R^2 perto de 1 significa que a maior parte da variação em $\boldsymbol{y}$ é explicada pelo modelo de regressão.

Intervalo de confiança para os parâmetros

```r
dados <- read_xlsx("dados.xlsx", sheet = "Metanol")

modelo <- lm(y ~ x, data = dados)

ic_parametros <- confint(modelo, level = 0.95)
ic_parametros
```

```
##                    2.5 %      97.5 %
## (Intercept) -0.013123192 0.002898535
## x            0.003444846 0.003550442
```

Intervalos de predição

Para um novo valor x^*:

$$\hat{y}^* \pm t_{\alpha/2,n-2}\sqrt{QMR\left[1+\frac{1}{n}+\frac{(x^*-\overline{x})^2}{S_{xx}}\right]}$$

Exemplo

```r
dados <- read_xlsx("dados.xlsx", sheet = "Metanol")

modelo <- lm(y ~ x, data = dados)

x_novo <- data.frame(x = c(70, 90))

ic_novos_preditos <- stats::predict(modelo,
                                    newdata = x_novo,
                                    se.fit = TRUE,
                                    interval = "prediction",
                                    level = 0.95)
```

Exemplo (continuação)

```
ic_novos_preditos
```

```
## $fit
##         fit       lwr       upr
## 1 0.2397227 0.2281723 0.2512732
## 2 0.3096756 0.2983650 0.3209862
##
## $se.fit
##           1           2
## 0.001886132 0.001687097
##
## $df
## [1] 4
##
## $residual.scale
## [1] 0.003708007
```

Calibração e predição inversa

```
mod_cal <- calibrate(y ~ x, data = dados)

detectionLimitCalibrate(mod_cal, coverage = 0.95)

inversePredictCalibrate(mod_cal, obs.y = 0.24,
                        intervals = TRUE,
                        coverage = 0.95)
```

Calibração e predição inversa

```
##       obs.y   pred.x    lcl.x    ucl.x
## [1,]  0.24 70.07927 68.56907 71.56254
## attr(,"coverage")
## [1] 0.95
## attr(,"simultaneous")
## [1] FALSE
```

```
##         Decision Limit (Signal) Detection Limit (Concentration)
##                      0.01255754                      9.89486859
## attr(,"coverage")
## [1] 0.95
## attr(,"simultaneous")
## [1] TRUE
```

Análise de resíduos

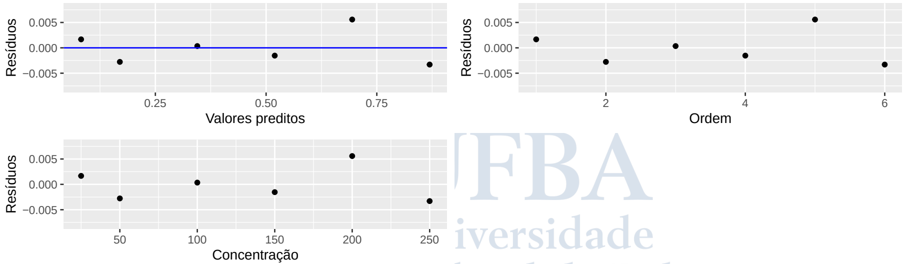
As principais suposições feitas até agora no estudo de análise de regressão linear simples foram as seguintes:

1. Linearidade: a relação entre a resposta Y e as variáveis regressoras é linear, pelo menos aproximadamente.
2. O termo de erro ϵ tem média zero.
3. Homoscedasticidade: o termo de erro ϵ tem variância constante σ^2.
4. Independência: os erros são não correlacionados.
5. Normalidade: os erros são normalmente distribuídos.

Exemplo

```r
tab <- augment(modelo)

g1 <- ggplot(tab, aes(x = .fitted, y = .resid)) +
  geom_point() +
  geom_abline(intercept = 0, slope = 0, color = 'blue') +
  ylim(c(-0.008, 0.008)) +
  labs(x = "Valores preditos", y = "Resíduos")

g2 <- ggplot(tab, aes(x = seq_along(.resid), y = .resid)) +
  geom_point() +
  ylim(c(-0.008, 0.008)) +
  labs(x = "Ordem", y = "Resíduos")

g3 <- ggplot(tab, aes(x = x, y = .resid)) +
  geom_point() +
  ylim(c(-0.008, 0.008)) +
  labs(x = "Concentração", y = "Resíduos")

cowplot::plot_grid(g1, g2, g3)
```

Exemplo


Resíduos
0.005
0.000
−0.005
0.25
0.50
0.75
Valores preditos
Resíduos
0.005
0.000
−0.005
2
4
6
Ordem
Resíduos
0.005
0.000
−0.005
50
100
150
200
250
Concentração

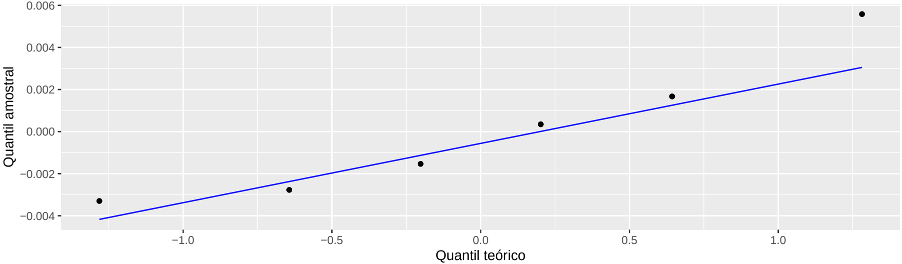
Exemplo

```
shapiro.test(modelo$residuals)
```

```
##
##  Shapiro-Wilk normality test
##
## data:  modelo$residuals
## W = 0.92274, p-value = 0.5253
```

Exemplo (continuação)

```
ggplot(tab, aes(sample = .resid)) +
  geom_qq() +
  geom_qq_line(color = "blue") +
  labs(x = "Quantil teórico", y = "Quantil amostral")
```



Exemplo (continuação)

```
bptest(modelo)
```

```
##
##  studentized Breusch-Pagan test
##
## data:  modelo
## BP = 1.7089, df = 1, p-value = 0.1911
```

Exemplo (continuação)

```
dwtest(modelo)
```

```
##
##  Durbin-Watson test
##
## data:  modelo
## DW = 2.9555, p-value = 0.79
## alternative hypothesis: true autocorrelation is gre
```