Formulação do Modelo de Regressão Linear Simples em Termos Matriciais

Modelo de Regressão Linear Simples

- O modelo de regressão linear simples:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i, \qquad i = 1, \ldots, n$$

pode ser escrito por:

$$\begin{aligned} Y_1 &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \varepsilon_1 \\ Y_2 &= \beta_0 + \beta_1 X_2 + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ Y_n &= \beta_0 + \beta_1 X_n + \varepsilon_n \end{aligned} \tag{2}$$

Modelo de Regressão Linear Simples em forma Matricial

- E pode ser definido pelos vetores das observações, matriz da variável explicativa, vetor dos parâmetros e vetor de erros:

$$\mathbf{Y}_{nx1} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots Y_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{X}_{nx2} = \begin{bmatrix} 1 & X_1 \\ 1 & X_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_n \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\beta}_{2x1} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{nx1} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

- Dessa forma, o modelo (1) pode ser escrito em termos matriciais:

$$\mathbf{Y}_{nx1} = \mathbf{X}_{nx2}\boldsymbol{\beta}_{2x1} + \boldsymbol{\varepsilon}_{nx1}$$

Modelo de Regressão Linear Simples em forma Matricial

- As condições do erro do modelo (1), $E(\varepsilon_i) = 0$ e $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$, podem ser escritas em termos matriciais por:

$$E(\boldsymbol{\varepsilon})_{nx1} = \mathbf{0}_{nx1} \tag{3}$$

que implica em:

$$\begin{bmatrix} E(\varepsilon_1) \\ E(\varepsilon_2) \\ \vdots \\ E(\varepsilon_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Modelo de Regressão Linear Simples em forma Matricial

- A condição que os erros têm variância constante σ^2 e que todas as covariâncias, $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$ para todo $i \neq j$ (e que os erros são normais e independentes) é expressa em termos matriciais através da matriz de variância-covariância:

$$Var(\varepsilon)_{nxn} = \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sigma^2 \end{bmatrix} = \sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$Var(\varepsilon)_{nxn} = \sigma^2 \mathbf{I}_{nxn} \tag{4}$$

Modelo de Regressão Linear Simples em forma Matricial

- Assim, o modelo de regressão (1), em termos matriciais é definido por:

$$\mathbf{Y}_{nx1} = \mathbf{X}_{nx2}\boldsymbol{\beta}_{2x1} + \boldsymbol{\varepsilon}_{nx1} \tag{5}$$

em que,

- ε é um vetor de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com $E(\varepsilon) = \mathbf{0}$ e $Var(\varepsilon) = \sigma^2\mathbf{I}$.
- Consequentemente,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{Y}) &= E(\mathbf{X}\beta + \varepsilon) = \mathbf{X}\beta + E(\varepsilon) = \mathbf{X}\beta \\ Var(\mathbf{Y}) &= Var(\mathbf{X}\beta + \varepsilon) = \mathbf{0} + Var(\varepsilon) = \sigma^2\mathbf{I} \end{aligned}$$

Estimação dos parâmtros do modelo em forma matricial

- Anteriormente, foi definido o método de mínimos quadrados para estimar os parâmetros do modelo de regressão linear simples, cujo objetivo é minimizar a soma do quadrado dos erros:

$$SQ(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i))^2. \tag{6}$$

- Em notação matricial, (6) é escrito por:

$$SQ(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\varepsilon}' \boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \tag{7}$$

Estimação dos parâmtros do modelo em forma matricial

- Ao expandir (7), tem-se que:

$$SQ(\beta) = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta)^{'}(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta) = \mathbf{Y}^{'}\mathbf{Y} - \mathbf{Y}^{'}\mathbf{X}\beta - \beta^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + \beta^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\beta$$

- $\mathbf{Y}^{'}\mathbf{X}\beta$ é um escalar $(1x1)$, que é igual a sua transposta: $(\mathbf{Y}^{'}\mathbf{X}\beta)^{'} = \beta^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y}$. Dessa forma, escrevemos:

$$SQ(\beta) = \mathbf{Y}^{'}\mathbf{Y} - 2\beta^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + \beta^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\beta \tag{8}$$

- Para encontrar o vetor $\boldsymbol{\beta}$ que minimiza (8), faz-se:
$$\frac{\partial SQ(\boldsymbol{\beta})}{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial SQ(\boldsymbol{\beta})}{\beta_0} \\ \frac{\partial SQ(\boldsymbol{\beta})}{\beta_1} \end{bmatrix}$$

Estimação dos parâmtros do modelo em forma matricial

$$\frac{\partial SQ(\beta)}{\beta} = -2\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + 2\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\beta \tag{9}$$

- Igualando (9) a zero e substituindo β por $\hat{\beta}$, encontra-se as equações normais em forma matricial:

$$\begin{aligned} -2\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + 2\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\hat{\beta} &= 0 \\ -\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + \mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\hat{\beta} &= 0 \\ \text{equações normais} \Rightarrow \mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\hat{\beta} &= \mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} \end{aligned}$$

Estimação dos parâmtros do modelo em forma matricial

- Para obter os coeficientes estimados através das equações normais por métodos matriciais, multiplica-se ambos os lados pela inversa de $\mathbf{X}'\mathbf{X}$:

$$(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

- Sabendo que $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{I}$, matriz identidade, tem-se que:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} \tag{10}$$

- Os estimadores de β_0 e β_1 são os mesmos definidos anteriormente.

Estimação dos parâmtros do modelo em forma matricial

Quando as colunas de $\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}$ são linearmente dependentes, as equações normais são linearmente dependentes também. Neste caso não podem ser obtidas soluções únicas para $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$. Entretanto, na maioria das aplicações de regressão, as colunas de $\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}$ são linearmente independentes, levando a uma solução única para $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$.

Exercício

1) Encontre a matriz $\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}$.

2) Encontre a matriz $\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y}$.

3) Obtenha o sistema de equações normais definido anteriormente utilizando o sistema de equações normais definido em forma matricial.

Valores ajustados

- Seja o vetor de valores ajustados $\hat{Y}_i$ denotado por $\hat{\mathbf{Y}}$:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{nx1} = \begin{bmatrix} \hat{Y}_1 \\ \hat{Y}_2 \\ \vdots \\ \hat{Y}_n \end{bmatrix}$$

- Em notação matricial tem-se que:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\beta} \tag{11}$$

porque:

$$\begin{bmatrix} \hat{Y}_1 \\ \hat{Y}_2 \\ \vdots \\ \hat{Y}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & X_1 \\ 1 & X_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 \\ \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_n \end{bmatrix}$$

Valores ajustados

- A equação (11) pode ser escrita como:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\beta} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y}$$

ou, de forma equivalente:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{H}\mathbf{Y} \tag{12}$$

em que:

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{'}$$

é conhecida como a matriz chapéu. Essa matriz tem importante papel na análise de diagnóstico. A matriz **H** é simétrica e tem a propriedade de ser idempotente. Ou seja,

$$\mathbf{H}\mathbf{H} = \mathbf{H}$$

Resíduo

- Seja o vetor de resíduos $e_i = Y_i - \hat{Y}_i$ denotado por **e**:

$$\mathbf{e}_{nx1} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}$$

- Em notação matricial tem-se que:

$$\mathbf{e} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta} \qquad (13)$$

ou,

$$\mathbf{e} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y} - \mathbf{HY} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{Y}$$

Estimador de σ^2

- Como definido anteriormente, o estimador de σ^2 é dado por:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} e_i^2}{n-2} = \frac{SQRes}{n-2} = MSRes$$

- Em termos matriciais $SQRes = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2$ pode ser definido por:

$$\begin{aligned}
SQRes &= \mathbf{e}^{'}\mathbf{e} \\
&= (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta})^{'}(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta}) \\
&= (\mathbf{Y}^{'} - \hat{\beta}^{'}\mathbf{X}^{'})(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta}) \\
&= \mathbf{Y}^{'}\mathbf{Y} - \mathbf{Y}^{'}\mathbf{X}\hat{\beta} - \hat{\beta}^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + \hat{\beta}^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\hat{\beta} \\
&= \mathbf{Y}^{'}\mathbf{Y} - 2\hat{\beta}^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{Y} + \hat{\beta}^{'}\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\hat{\beta}
\end{aligned}$$

Estimador de σ^2

- Desde que $\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$, tem-se que:

$$\begin{aligned} SQRes &= \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} \\ &= \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} \\ &= \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} \end{aligned}$$

- Dessa forma, o estimador de σ^2 em termos matriciais é definido por:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{Y}}{n-2} = MSRes$$

Propriedades dos estimadores de Mínimos Quadrados

- O Teorema de Gauss Markov, afirma que os estimadores de mínimos quadrados de β_0 e β_1 são não viesados. Em termos matriciais o Teorema é definido por:
- Lembrando que $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} = \mathbf{CY}$
- Sendo que $\mathbf{C} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ é uma matriz de constante.
- Dessa forma, tem-se que:

$$E(\hat{\beta}) = (\mathbf{CY}) = \mathbf{C}E(\mathbf{Y}) = \mathbf{CX}\beta = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta$$

$$E(\hat{\beta}) = \boldsymbol{\beta}$$

Propriedades dos estimadores de Mínimos Quadrados

- A matriz de covariâncias de $\hat{\beta}$ é definida por:

$$Var(\hat{\beta}) = Var(\mathbf{CY}) = \mathbf{C}Var(\mathbf{Y})\mathbf{C}^{'}$$

como $Var(\mathbf{Y}) = \sigma^2\mathbf{I}$

$$\begin{aligned}
Var(\hat{\beta}) &= \mathbf{C}\sigma^2\mathbf{I}\mathbf{C}^{'} \\
&= \sigma^2\mathbf{C}\mathbf{C}^{'} \\
&= \sigma^2(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{'}[(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{'}]^{'} \\
&= \sigma^2(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1} \\
&= \sigma^2(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1}
\end{aligned}$$

Propriedades dos estimadores de Mínimos Quadrados

- A matriz de covariâncias estimada é obtida ao substituir σ^2 por seu estimador, $\hat{\sigma}^2$. Ou seja,

$$\widehat{Var}(\hat{\beta}) = \hat{\sigma}^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = MSRes(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$$

Propriedades dos estimadores de Mínimos Quadrados

Observação: Para obter intervalos de confiança e testes de hipóteses para os parâmetros β_0 e β_1, valem as mesmas fórmulas definidas anteriormente. Em que as estimativas dos parâmetros e suas respectivas variâncias estimadas são retiradas do vetor $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ e da matriz de variância-covariância $\widehat{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}})$, respectivamente.

Soma de Quadrados

- Vamos definir a soma de quadrados total em termos matriciais. Lembrando que:

$$SQT = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{n} Y_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^{n} Y_i)^2}{n}$$

- O termo $\frac{(\sum_{i=1}^{n} Y_i)^2}{n}$ pode ser escrito como:

$$\frac{(\sum_{i=1}^{n} Y_i)^2}{n} = (\frac{1}{n})\mathbf{Y}'\mathbf{J}\mathbf{Y}$$

em que $\mathbf{J}$ é uma matriz de 1s. Isto é:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Soma de Quadrados

- Verifique que $\frac{(\sum_{i=1}^{n} Y_i)^2}{n} = (\frac{1}{n})\mathbf{Y}'\mathbf{J}\mathbf{Y}$
- Defina a SQT em termos matriciais.
- Defina a SQReg em termos matriciais.