REGRESSÃO LINEAR

 Ex. Crescimento da crista em capões recebendo doses diferentes de androsterona (hormona sexual secundária masc.)

Dose (mg. androst.)	1/2	1	2	4	8
Log_2 dose (x)	-1	0	1	2	3
Crescimento da crista (Y)	8	5	13	17	17
	1	6	7	14	17
	1	9	12	14	20
	3	7	10	19	18
	1	4	11	13	15

• Em R:

```
> x=c(-1,-1,-1,-1,-1,0,0,0,0,0,1,1,1,1,1,1,2,2,2,2,2,2,3,3,3,3,3,3)
> y=c(8,1,1,3,1,5,6,9,7,4,13,7,12,10,11,17,14,14,19,13,17,17,20,18,15)
> plot(x,y)
```

- Há uma relação aproximadamente linear.
 Obviamente o crescimento é a var. dep. e a dose ind.
- É claro que para um valor fixo de x, o valor de y varia consideravelmente de ave para ave; pode por isso ser considerada uma var. aleatória com média,

$$E(Y|x)$$
, variância, $V(Y|x)$,

- A função f(x) = E(Y|x) é a regressão de Y em \boldsymbol{x} .
- O nosso propósito consiste em fazer inferências sobre esta função.
- Regressão linear: assumir que $E(Y|x) = \alpha + \beta x$. lpha e eta minimizam $E\{(Y-(lpha+eta x))^2\}$.
- ullet Agora temos de estimar lpha e eta. Vamos usar os estimadores dos mínimos quadrados:

MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

- ullet Suponhamos que temos n pares de obs. $(x_1, Y_1), (x_2, Y_2), \ldots, (x_n, Y_n).$
- Temos de estimar α e β . •
- Vamos usar os valores de α e β que minimizam: •
- ullet $S^2(lpha,eta)=\sum_{i=1}^n(y_i-lpha-eta x_i)^2$

A solução é (porquê ?):

$$\hat{\alpha} = \overline{y} - \hat{\beta}\overline{x};$$

$$\hat{eta} = rac{\sum x_i y_i - n \overline{x}. \overline{y}}{\sum x_i^2 - n \overline{x}^2} = rac{\sum (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum (x_i - \overline{x})^2} = rac{SS_{xy}}{SS_{xx}};$$

 $S^2(\hat{lpha},\hat{eta}) = \sum (y_i - \hat{lpha} - \hat{eta}x_i)^2 = \ \sum (y_i - \overline{y})^2 - \hat{eta}^2 \sum (x_i - \overline{x})^2;$

Isto é:
$$S^2(\hat{lpha},\hat{eta}) = SS_{yy} - \hat{eta}SS_{xy}$$

JUSTIFICAÇÃO DO MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

- Sup. que para x fixo, Y tem dist. normal com variância σ^2 (que não depende de x). O modelo é: $Y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i$ com $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
- Teorema: De todos os est. centrados, $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ do MMQ são os que têm menor variância. (dem em Dudewicz p. 683)
- Teorema: Os EMV de α e β são também o $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ anteriores. O EMV de σ^2 é $S^2(\hat{\alpha},\hat{\beta})/n$.

- Estes estimadores são conjuntamente suficientes.
- ullet Exercicio. A altura, x, e o peso, y, de 20 alunos forneceu: $\overline{x}=1.74m, s_{x}^{2}=0.0045m^{2}, \overline{y}=$ $69.6Kg, s_u^2 = 47.31Kg^2 ext{ e } \sum x_i y_i = 2429.585.$
- Determine a recta de regressão do peso na altura. Estime o peso de um aluno com 1.78 m de altura.

 Seria talvez mais útil obter um intervalo de valores para o peso do aluno.

INFERÊNCIA EM REGRESSÃO

• $\hat{\alpha}=\overline{y}-\hat{\beta}\overline{x}$ e $\hat{\beta}=\frac{SS_{xy}}{SS_{xx}}$ são combinações lineares dos $y_i's$; logo: •

$$\hat{lpha} \sim N(lpha, rac{\sum x_i^2}{n\sum (x_i - \overline{x})^2} \sigma^2)$$

$$\hat{eta} \sim N(eta, rac{\sigma^2}{\sum (x_i - \overline{x})^2})$$

• Mas σ^2 é desconhecido; no entanto,

$$rac{S^2(\hat{lpha},\hat{eta})}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-2}, \; ext{ e ind. de } \hat{lpha},\hat{eta}$$

- logo, $\hat{\sigma}^2 = \frac{S^2(\hat{\alpha}, \hat{\beta})}{n-2}$ é um estimador centrado de σ^2 .
- Vem então: I

$$\frac{(\hat{lpha}-lpha)}{\hat{\sigma}}\sqrt{rac{n\sum(x_i-\overline{x})^2}{\sum x_i^2}}\sim t_{n-2} ext{ (porquê?)}$$

Análogamente

$$\frac{(\hat{eta}-eta)}{\hat{\sigma}}\sqrt{\sum(x_i-\overline{x})^2}\sim t_{n-2} \; ext{(porquê?)}$$

- Podemos assim fazer inferência sobre estes parâmetros.
- Se os erros não tiverem dist. normal, as dist. acima já não são válidas, MAS continuam estimadores centrados com a mesma variância.
- Se a variância de Y depender de x, $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ continuam a ser centrados e com dist. normal (se Y a tiver), mas as variâncias mudam

- Seja agora $H_0: \beta = 0$. O que significa não rejeitar H_0 ?
 - 1. Não existe rel. entre X e Y (são ind.)
 - 2. A relação existe e é linear mas o declive é muito próximo de 0.
 - 3. A relação não é linear, mas curvílinea.
 - 4. Cometeu-se um erro tipo II (aceitar H_0 quando H_0 é falsa)
- ullet O que significa rejeitar H_0 ?
 - 1. A relação é linear o suficiente.
 - 2. Um modelo linear aproxima bem os dados embora um de grau superior fosse melhor.

3. Cometeu-se um erro tipo I (rejeitar H_0 quando H_0 é verdadeira)

• Exercicio: teste a hipótese de $\beta=0$ com os dados do exemplo anterior.

INTERVALOS DE CONFIANÇA E DE PREDIÇÃO

- Suponhamos agora que queremos fazer inferências não sobre os parâmetros mas sobre o valor de Y a prever no futuro. Sup. que queremos prever o valor de Y em x^* .
- $\hat{lpha}+\hat{eta}x^*$ é um estimador de $lpha+eta x^*$, resposta média em x^* ou $E(Y|x^*)$. I
- ullet E se quisermos estimar o valor de $Y|x^*$, e não apenas o seu valor médio $E(Y|x^*)$?
- ullet O único estimador disponível é $\hat{y} = \hat{lpha} + \hat{eta} x^*$ ullet

- Portanto, $\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*$ é um estimador de duas coisas diferentes:
 - 1. de $\alpha + \beta x^*$, resposta média em x^* .
 - 2. de Y em x^* .

- Suponhamos que queremos um IC para o valor médio, $\mu_{Y|x^*} = \alpha + \beta x^*$. •
- Vamos usar a quantidade fulcral

$$\frac{(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) - (\alpha + \beta x^*)}{\sqrt{\operatorname{Var}((\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) - (\alpha + \beta x^*))}}$$

- Mas $Var((\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) (\alpha + \beta x^*)) = Var(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) =$ $\operatorname{Var}(\overline{Y} + \hat{\beta}(x^* - \overline{x})) = \operatorname{Var}(\overline{Y}) + (x^* - \overline{x})^2 \operatorname{Var}(\hat{\beta}) +$ $2(x^*-\overline{x})\mathrm{Cov}(\overline{Y},\hat{eta})$
- ullet Prove que $\mathrm{Cov}(\overline{Y},\hat{eta})=0$; logo \overline{Y} e \hat{eta} estatísticamente independentes. Segue que $\hat{lpha}+\hat{eta}x^*$ tem uma dist. normal (porquê?)
- Vem então que

$$\operatorname{Var}(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) = \frac{\sigma^2}{n} + (x^* - \overline{x})^2 \frac{\sigma^2}{\sum (x_i - \overline{x})^2}$$

Logo,

$$rac{(\hat{lpha}+\hat{eta}x^*)-(lpha+eta x^*)}{\sigma\sqrt{rac{1}{n}+rac{(x^*-\overline{x})^2}{\sum(x_i-\overline{x})^2}}} \, \sim \, N(0,1)$$

• Mas σ é desconhecido; no entanto sabemos que $\hat{\sigma}^2=rac{S^2(\hat{lpha},\hat{eta})}{n-2}$ e que $rac{S^2(\hat{lpha},\hat{eta})}{\sigma^2}\sim\chi_{n-2}^2$. Logo vem que

$$rac{(\hat{lpha}+\hat{eta}x^*)-(lpha+eta x^*)}{\hat{\sigma}\sqrt{rac{1}{n}+rac{(x^*-\overline{x})^2}{\sum (x_i-\overline{x})^2}}} \, \sim \, t_{n-2}$$

ullet Finalmente o IC a 100(1-lpha)% para o valor médio

de Y em x^* é:

$$(\hat{lpha}+\hat{eta}x^*)\pm t_{n-2,1-rac{lpha}{2}}\sqrt{\hat{\sigma}^2\left(rac{1}{n}+rac{(x^*-\overline{x})^2}{\sum(x_i-\overline{x})^2}
ight)}$$

- Fazendo variar x^* obtemos uma banda de confiança para a recta de regressão. \blacksquare
- Suponhamos agora que queremos um intervalo de predição para Y em x^st . Usamos a quantidade fulcral

$$\frac{(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) - Y}{\sqrt{\operatorname{Var}((\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) - Y)}}$$

- Mas $Var((\hat{\alpha} + \hat{\beta}x^*) Y) = Var(\overline{Y} + \hat{\beta}(x^* \overline{x}) Y) = Var(\overline{Y} + \hat{\beta}(x^* \overline{x})) + Var(Y)$ (porquê?) = $\frac{\sigma^2}{n} + (x^* \overline{x})^2 \frac{\sigma^2}{\sum (x_i \overline{x})^2} + \sigma^2$
- Procedendo de forma análoga obtém-se um IP para Y em x^* :

$$(\hat{lpha}+\hat{eta}x^*)\pm t_{n-2,1-rac{lpha}{2}}\sqrt{\hat{\sigma}^2\left(1+rac{1}{n}+rac{(x^*-\overline{x})^2}{\sum(x_i-\overline{x})^2}
ight)}$$

• Fazendo variar x^* obtemos uma banda de predição para Y.

Exercicio:

- a) Encontre um ICa 95% para o peso médio de um estudante cuja altura é 1.78m.
- b) Encontre um IP para o <u>peso</u> de um estudante cuja altura é 1.78m.

Exercicio:

Considere a amostra aleatória Y_1, \ldots, Y_{12} para valores fixos de x:

 x_i 8 6 11 22 14 17 18 24 19 23 26 40 Y_i 59 58 56 53 50 45 43 42 39 38 30 27

ullet $\sum x_i$ = 228, $\sum x_i^2$ = 5256, $\sum x_i Y_i$ =

9324,
$$\sum Y_i = 540$$
, $\sum Y_i^2 = 25522$.

• Encontre $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$. Se $x^* = 20$ encontre o valor previsto para Y e um IP a 95% para Y. Desenhe a recta de regressão com as bandas de confiança e de predição (a 95%).

Em R:

```
> x=c(8,6,11,12,14,17,18,24,19,23,26,40)
> y=c(59,58,56,53,50,45,43,42,39,38,30,27)
> plot(x,y)
> modelo=lm(y ^{\sim} x)
> modelo
> confint(modelo)
> confint(modelo,level=0.99)
> predict(modelo,data.frame(x=20))
> predict(modelo,data.frame(x=20),int="c")
ou então:
> predict(modelo,data.frame(x=20),int="confidence")
> predict(modelo,data.frame(x=20),int="p")
```

ou então

- > predict(modelo,data.frame(x=20),int="prediction")
- > novo=data.frame(x=seq(7,40,1))
- > bandas.prev= predict(modelo, novo, interval="prediction")
- > bandas.conf= predict(modelo, novo, interval="c")
- > matplot(novo\$x,cbind(bandas.conf, bandas.prev[,-1]),
- + lty=c(1,2,2,3,3), type="l",xlab="x", ylab="y")
- > points(x,y)

COEFICIENTE DE DETERMINAÇÃO

- Fornece um critério de avaliação da qualidade do ajustamento. Considere a soma dos quadrados dos resíduos $S^2(\hat{\alpha},\hat{\beta}) = \sum (y_i \hat{\alpha} \hat{\beta}x_i)^2$.
- $ullet 0 \leq S^2(\hat{lpha},\hat{eta}) \leq ?$
- Uma forma de avaliar a utilidade da recta é comparando a dispersão dos pontos em torno dela com a dispersão dos pontos em torno do modelo mais simples $Y=\overline{Y}$. •

ullet Parece óbvio que a dispersão em torno de \overline{Y} é muito maior do que em torno da recta de regressão.

- $SS_{yy}=\sum (y_i-\overline{y})^2=\sum y_i^2-(\sum y_i)^2/n$: soma de quadrados total •
- $SSR=\sum (\hat{y}_i-\overline{y})^2=\hat{eta}^2[\sum x_i^2-(\sum x_i)^2/n]=\hat{eta}^2SS_{xx}$: soma de quad. explicada pela regressão •
- $SSE=\sum (y_i-\hat{y}_i)^2=SS_{yy}-\hat{\beta}SS_{xy}=SS_{yy}-SSR$: soma de quad. não explicada pela regressão.

• $SS_{yy} = SSR + SSE$.

- ullet Se a recta de regressão for adequada, então é de esperar que SSR seja bem superior a SSE.
- Uma forma de o determinar é através do coeficiente de determinação:

$$rac{SSR}{SS_{yy}} = 1 - rac{SSE}{SS_{yy}} = rac{\sum (\hat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum (y_i - \overline{y})^2} = r^2$$

• r^2 (quadrado do coef. de correlação) é um estimador de ρ^2 , coef. de determinação na população.

REGRESSÃO POLINOMIAL E REGRESSÃO MÚLTIPLA

- Generalização:
- ullet Regressão Quadrática: $Y_i = lpha + eta x_i + \gamma x_i^2 + \epsilon_i$ I
- ullet Podemos assim testar se o modelo linear é adequado testando $H_0: \gamma = 0$
- Regressão Polinomial:

$$Y_i = eta_0 + eta_1 x_i + eta_2 x_i^2 + \ldots + eta_p x_i^p + \epsilon_i$$

- São tudo casos particulares da
- Regressão Linear Múltipla:

$$Y_i = eta_0 + eta_1 x_{1i} + eta_2 x_{2i} + \ldots + eta_p x_{pi} + \epsilon_i$$

- ullet As variáveis x_1, x_2, \ldots, x_p podem ser quantitativas; codificação binária de var. qualitativas; potências de outras variáveis; produto de 2 ou mais variáveis....
- É por isso um modelo muito genérico que permite construir funções lineares e não lineares com uma ou mais var. independentes.