# **ESTATÍSTICA II**

#### Michelle Hanne Soares de Andrade

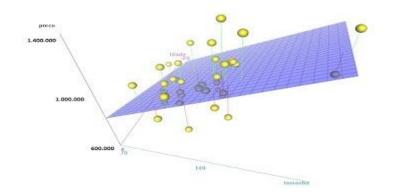
michellehanne@cefetmg.br
1º. SEMESTRE 2018

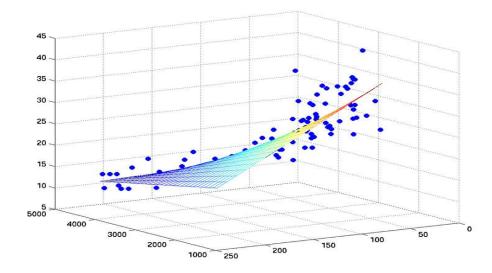
# **REGRESSÃO LINEAR SIMPLES**

#### Introdução

- É a relação entre duas ou mais variáveis quantitativas: uma variável dependente, cujo valor deverá ser previsto e uma variável (ou variáveis) independente(s) ou explicativa(s), sobre a(s) qual(is) existe conhecimento teórico disponível.
- Estimar uma equação é geometricamente equivalente a ajustar uma curva aos dados dispersos = REGRESSÃO.

# Introdução





#### Regressão Linear Múltipla

- A análise de uma regressão múltipla segue, basicamente, os mesmos critérios da análise de uma regressão simples.
- A regressão múltipla envolve três ou mais variáveis, portanto, estimadores. Ou seja, ainda uma única variável dependente, porém duas ou mais variáveis independentes.
- A finalidade das variáveis independentes adicionais é melhorar a capacidade de predição em confronto com a regressão linear simples.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \ldots + \beta_k X_k + E$$

 $X_1, \ldots, X_k$  – variáveis explicativas ou independentes medidas sem erro (não aleatórias);

E – variável aleatória residual na qual se procuram incluir todas as influências no comportamento da variável Y que não podem ser explicadas linearmente pelo comportamento das variáveis  $X_1, \ldots, X_k$  e os possíveis erros de medição;

 $\beta_0, \ldots, \beta_k$  – parâmetros desconhecidos do modelo (a estimar);

Y – variável explicada ou dependente (aleatória).

Num estudo de regressão temos *n* observações de cada variável independente:

Para cada i, i.e., para  $x_{1i}, \ldots, x_{ki}$  fixos,  $Y_i$  é uma variável aleatória.

Temos então *n* variáveis aleatórias:  $Y_1, Y_2, \ldots, Y_n$ :

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + ... + \beta_k X_{ki} + E_i$$
  $i = 1, ..., n$ 

$$Y_1 = \beta_0 + \beta_1 X_{11} + \ldots + \beta_k X_{k1} + E_1$$
  
 $\vdots$   
 $Y_n = \beta_0 + \beta_1 X_{1n} + \ldots + \beta_k X_{kn} + E_n$ 

Admite-se que  $E_1, \ldots, E_n$  são variáveis aleatórias independentes de média zero e variância  $\sigma^2$ 

Então, para quaisquer valores  $x_{1i}, \ldots, x_{ki}$  fixos,  $Y_i$  é uma variável aleatória de média

$$\mu_{Y_i} = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \ldots + \beta_k X_{ki}$$

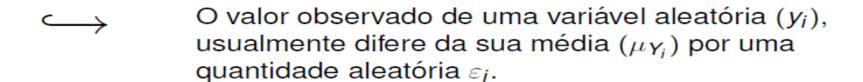
e variância  $\sigma^2$ .

Os dados para a análise de regressão e de correlação múltipla são da forma:

$$(y_1, X_{11}, X_{21}, \ldots, X_{k1}), (y_2, X_{12}, X_{22}, \ldots, X_{k2}), \ldots, (y_n, X_{1n}, X_{2n}, \ldots, X_{kn})$$

Cada observação obedece à seguinte relação:

$$y_i = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \ldots + \beta_k X_{ki}}_{\mu Y_i} + \varepsilon_i, \qquad i = 1, \ldots, n.$$



Temos então o seguinte sistema escrito em notação matricial:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \dots & x_{kn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \Leftrightarrow y = X\beta + \varepsilon$$

- y Vector das observações da variável dependente;
- X Matriz significativa do modelo;
- $\beta$  Vector dos parâmetros do modelo;
- $\varepsilon$  Vector das realizações da variável aleatória residual.

A partir dos dados disponíveis estimamos  $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k$  e substituímos estes parâmetros pelas suas estimativas  $b_0, b_1, \ldots, b_k$  para obter a equação de regressão estimada.

$$\hat{y} = \hat{\mu}_{Y|X_1,X_2,...,X_k} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + ... + b_k x_k$$



Esta equação estima o valor médio de Y para um dado conjunto de valores  $x_1, x_2, \ldots, x_k$  fixo, mas é usada para estimar o próprio valor de Y.

• O problema então é estimar o valor dos coeficientes  $\beta_i$  a partir de um conjunto de dados do tipo:

Y	$X_{I}$	$X_2$	 $X_k$	
$y_1$	$x_{11}$	$x_{12}$	 $x_{1k}$	
$y_1$ $y_2$	$x_{21}$	$x_{22}$	 $x_{2k}$	
$y_n$	$x_{nI}$	$x_{n2}$	 $x_{nk}$	

 Novamente, o método dos Mínimos Quadrados é usado para minimizar a soma dos quadrados dos resíduos.

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1 x_{1i} - b_2 x_{2i} - \dots - b_k x_{ki})^2$$

Para determinar  $b_0, b_1, \ldots, b_k$ , de modo a minimizar SSE resolve-se o seguinte sistema de equações:

$$\frac{\partial SSE}{\partial b_0} = 0 \quad \wedge \quad \frac{\partial SSE}{\partial b_1} = 0 \quad \wedge \quad \dots \quad \wedge \quad \frac{\partial SSE}{\partial b_k} = 0$$

Obtém-se 
$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} = (X^T X)^{-1} X^T y$$
 estimativa para  $\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}$ 

O estimador é 
$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

Cada coeficiente de regressão estimado  $b_i$ , i = 1, ..., k (estimativa de  $\beta_i$ ), estima o efeito sobre o valor médio da variável dependente Y de uma alteração unitária da variável independente  $X_i$ , mantendo-se constantes todas as restantes variáveis independentes.

No caso k = 1 (regressão simples) temos:

$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix} = (X^T X)^{-1} X^T y,$$

onde X tem apenas duas colunas.

Como já vimos,  $b_0$  e  $b_1$  podem também ser determinados pelas relações:

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n \, \overline{x} \, \overline{y}}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n \, \overline{x}^2} \qquad \text{e} \qquad b_0 = \overline{y} - b_1 \overline{x}.$$

Assim, temos:

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \dots \\ Y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & X_1 & X_{21} & X_{k1} \\ 1 & X_2 & X_{22} & X_{k2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & X_n & X_{2n} & X_{kn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_k \end{bmatrix}$$

Que escrevendo ainda em outra em sua forma mais compacta temos:

$$Y = bX + \varepsilon$$

O estimador para b será dado por:

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

Há necessidade que o produto X'X, tenha uma matriz inversa, o que implica na condição obrigatória que nenhuma coluna da matriz X seja

Os dados apresentados no quadro seguinte representam as vendas, Y, em milhares de Euros, efectuadas por 10 empregados de uma dada empresa, o nº de anos de experiência de cada vendedor,  $X_1$  e o respectivo score no teste de inteligência,  $X_2$ .

Vendedor	Vendas (Y)	Anos de experiência( $X_1$ )	Score no teste de inteligência $(X_2)$
1	9	6	3
2	6	5	2
3	4	3	2
4	3	1	1
5	3	4	1
6	5	3	3
7	8	6	3
8	2	2	1
9	7	4	2
10	4	2	2

Pretende-se determinar se o sucesso das vendas pode ser medido em função das duas variáveis explicativas  $X_1$  e  $X_2$  através de um modelo linear.

```
Matriz significativa do modelo: X = \begin{bmatrix} 1 & 6 & 3 \\ 1 & 5 & 2 \\ 1 & 3 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 4 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ 1 & 6 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}
```

Vector das estimativas dos coeficientes de regressão:

$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = (X^T X)^{-1} X^T y = \begin{bmatrix} -0.262712 \\ 0.745763 \\ 1.338983 \end{bmatrix}$$

Equação de regressão estimada:

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mu}_{Y|X_1,X_2} = -0.262712 + 0.745763X_1 + 1.338983X_2$$



Estima-se que o volume médio de vendas de um vendedor (em milhares de Euros) é igual a 0.745763 vezes os seus anos de experiência mais 1.338983 vezes o seu score no teste de inteligência menos 0.262712.

Por exemplo, o volume médio de vendas para vendedores com 4 anos de experiência e com score 3 no teste de inteligência é estimado por:

$$\hat{y} = -0.262712 + 0.745763 \times 4 + 1.338983 \times 3 = 6.737289$$

b₁ = 0.745763 → Em média, um ano extra de experiência entre vendedores com o mesmo score no teste de inteligência, conduz a um aumento no volume de vendas de uma quantidade que pode ser estimada em 745.763 Euros.

b₂ = 1.338983 → Em média, um vendedor com score no teste de inteligência igual a 2 vende mais 1338.983 Euros (valor estimado) do que um vendedor com a mesma experiência e score 1, e menos 1338.983 Euros do que um vendedor com a mesma experiência e com score 3.

#### Atenção:

- ▶ b<sub>0</sub> = -0.262712 não pode ser interpretado como sendo o volume médio de vendas de um vendedor hipotético sem experiência prévia e com score zero no teste de inteligência. Com efeito, vendas negativas são impossíveis. Note que valores nulos de X<sub>1</sub> e X<sub>2</sub> encontram-se fora do âmbito dos dados.
- Trata-se de uma relação média, assim um vendedor com determinados anos de experiência e determinado score no teste de inteligência não obterá necessariamente o volume de vendas exacto indicado pela equação.

Pretende-se investigar a utilização de um modelo de regressão linear múltiplo para se tentar explicar a variação da viscosidade de um polímero (Y) em função da temperatura de reação,  $x_1$ , e da taxa de alimentação do catalisador,  $x_2$ . Realizando-se uma experiência, para os diferentes valores de  $x_1$  e  $x_2$ , obtiveram-se os valores de Y, respectivos, conforme tabela abaixo:

N.º da	Viscosidade	Temperatura	Catalisador
observação	(y)	$(x_1, {}^{\mathrm{o}}\mathrm{C})$	$(x_2, lb/h)$
1	2256	80	8
2	2340	93	9
3	2426	100	10
4	2293	82	12
5	2330	90	11
6	2368	99	8
7	2250	81	8
8	2409	96	10
9	2364	94	12
10	2379	93	11
11	2440	97	13
12	2364	95	11
13	2404	100	8
14	2317	85	12
15	2309	86	9
16	2328	87	12

O modelo a ser ajustado é do tipo  $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$ , onde se deve estimar os coeficientes de regressão. Em notação matricial,  $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ , considerando a amostra obtém-se

$$X^T X = \begin{bmatrix} 16 & 1458 & 164 \\ 1458 & 133560 & 14946 \\ 164 & 14946 & 1726 \end{bmatrix}$$
 (matriz é simétrica),

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 14,176004 & -0,129746 & -0,223453 \\ -0,129746 & 1,429184 \times 10^{-3} & -4,763947 \times 10^{-5} \\ -0,223453 & -4,763947 \times 10^{-5} & 2,222381 \times 10^{-2} \end{bmatrix} \text{ e } \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} 37577 \\ 3429550 \\ 385562 \end{bmatrix}, \text{ donde }$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_0 = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1566,07777 \\ 7,62129 \\ 8,58485 \end{bmatrix}.$$

Assim, o modelo de regressão ajustado aos dados é, com quatro casas decimais,

$$y = 1566,0777 + 7,6213x_1 + 8,5848x_2$$
.

A partir desta equação é possível obter os valores estimados (esperados através do modelo) de Y e predizer observações futuras para a mesma variável. Por exemplo, para a primeira observação  $x_{11} = 80$  e  $x_{12} = 8$ , o valor ajustado será  $\hat{y}_1 = 1566,00777 + 7,6213x_{11} + 8,5848x_{12} = 2244,46$ , o valor observado correspondente é  $y_1 = 2256$ , o resíduo para esta observação é  $e_1 = y_1 - \hat{y}_1 = 11,54$ .

Apresentam-se na tabela seguinte os valores ajustados (estimativas) da variável resposta a partir deste modelo de regressão e os respectivos erros de ajustamento para cada observação.

N.º da observação	$y_i$	$\hat{\mathcal{Y}}_i$	$e_{i}$	
1	2256	2244,46	11,54	
2	2340	2352,12	-12,12	
3	2426	2414,06	11,94	
4	2293	2294,04	-1,04	
5	2330	2346,43	-16,43	
6	2368	2389,26	-21,26	
7	2250	2252,08	-2,08	
8	2409	2383,57	25,43	
9	2364	2385,50	-21,50	
10	2379	2369,29	9,71	
11	2440	2416,95	23,05	
12	2364	2384,53	-20,53	
13	2404	2396,89	7,11	
14	2317	2316,91	0,09	
15	2309	2298,77	10,23	
16	2328	2332,15	-4,15	

Tabela2.3 - Observações e estimativas da variável resposta e respectivos resíduos

#### Qualidade do Ajustamento do Modelo

A equação de regressão estimada pode ser vista como uma tentativa para explicar as variações na variável dependente Y que resultam das alterações nas variáveis independentes  $X_1, X_2, \ldots, X_k$ .

Seja  $\overline{y}$  a média dos valores observados para a variável dependente.

Uma medida útil associada ao modelo de regressão é o grau em que as predições baseadas na equação,  $\hat{y}_i$ , superam as predições baseadas em  $\overline{y}$ .

Se a dispersão (erro) associada à equação é muito menor que a dispersão (erro) associada a  $\overline{y}$ , as predições baseadas no modelo serão melhores que as baseadas em  $\overline{y}$ .

#### Qualidade do Ajustamento do Modelo

Dispersão em torno de y - Variação total:

$$SST = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2$$
 (Soma dos quadrados totais)

Dispersão em torno da equação de regressão - Variação não explicada:

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 (Soma dos quadrados dos resíduos)

O ajustamento será tanto melhor quanto mais pequeno for SSE relativamente a SST.

#### Qualidade do Ajustamento do Modelo

Pode-se mostrar que:

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

$$\downarrow \qquad \qquad \downarrow$$

$$SST = SSE + SSR$$

 $SST \longmapsto$ Soma dos quadrados totais - Variação total  $SSE \longmapsto$ Soma dos quadrados dos resíduos - Variação não explicada  $SSR \longmapsto$ Soma dos quadrados da regressão - Variação explicada

Isto é:

#### **Coeficiente de Determinação**

O quociente entre SSR e SST dá-nos uma medida da proporção da variação total que é explicada pelo modelo de regressão. A esta medida dá-se o nome de coeficiente de determinação ( $r^2$ ),

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} = \frac{SST - SSE}{SST} = \frac{SST}{SST} - \frac{SSE}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$$

#### Note que:

- ▶  $0 \le r^2 \le 1$ ;
- r<sup>2</sup> ≅ 1 (próximo de 1) significa que grande parte da variação de Y é explicada linearmente pelas variáveis independentes;
- $r^2 \cong 0$  (próximo de 0) significa que grande parte da variação de Y não é explicada linearmente pelas variáveis independentes.

## Coeficiente de Determinação

Este coeficiente pode ser utilizado como uma medida da qualidade do ajustamento, ou como medida da confiança depositada na equação de regressão como instrumento de previsão:

- $ightharpoonup r^2 \cong 0 \longmapsto \text{modelo linear muito pouco adequado};$
- $ightharpoonup r^2 \cong 1 \longmapsto \text{modelo linear bastante adequado.}$

#### Coeficiente de Correlação Múltiplo

É uma medida do grau de associação linear entre Y e o conjunto de variáveis  $X_1, X_2, \ldots, X_k$ .

- r varia entre 0 e 1;
- r = 1 indica a existência de uma associação linear perfeita, ou seja, Y pode ser expresso como uma combinação linear de X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>,..., X<sub>k</sub>;
- ▶ r = 0 indica a inexistência de qualquer relação linear entre a variável dependente Y e o conjunto de variáveis independentes  $X_1, X_2, \ldots, X_k$ .

#### Para o exemplo em estudo temos a seguinte tabela

i	Уi	X <sub>1i</sub>	X <sub>2i</sub>	$\hat{y}_i$	$d_i$	$d_i^2$	$(y_i - \overline{y})^2$	$(\hat{y}_i - \overline{y})^2$
					$= y_i - \hat{y}_i$			
1	9	6	3	8,22881	0,77119	0,59473		
2	6	5	2	6,14407	-0,14407	0,02076		
3	4	3	2	4,65254	-0,65254	0,42581		
4	3	1	1	1,82203	1,17797	1,38760		
5	3	4	1	4,05932	-1,05932	1,12216		
6	5	3	3	5,99153	-0,99153	0,98312		
7	8	6	3	8,22881	-0,22881	0,05236		
8	2	2	1	2,56780	-0,56780	0,32239		
9	7	4	2	5,39831	1,60169	2,56543		
10	4	2	2	3,90678	0,09322	0,00869		
Total	51					SSE	SST	SSR
						=7.48305	=48.9	=41.41695

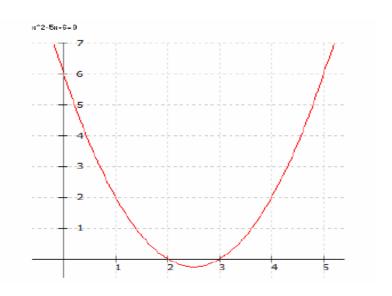
Coeficiente de determinação:

 $r^2 = \frac{SSR}{SST} = \frac{41.41695}{48.9} = 0.84697 \longrightarrow 84.7\%$  da variação nas vendas está relacionada linearmente com variações nos anos de experiência e no QI. Por outras palavras, as duas variáveis independentes utilizadas no modelo linear ajudam a explicar cerca de 84.7% da variação nas vendas. Ficam por explicar 15.3% das variações no volume de vendas, que se devem a outros factores não considerados, como por exemplo:

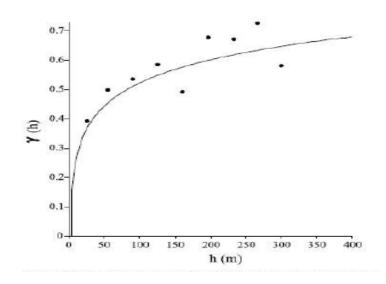
- a simpatia do vendedor;
- a reputação do vendedor;
- etc.

## **Outros Tipos de Modelagem**

## **Modelo Quadrático**

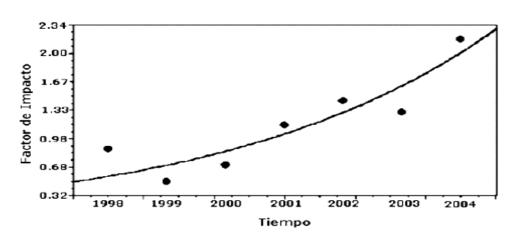


# Modelo Logarítmico

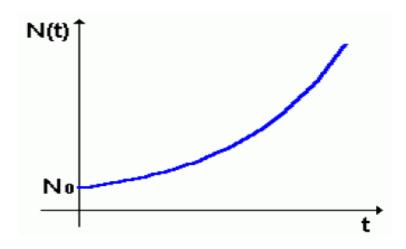


#### **Outros Tipos de Modelagem**

# **Modelo Exponencial**

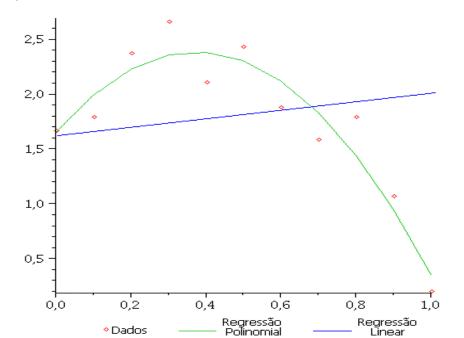


## **Modelo Potencial**



#### Regressão Polinomial

 Existem muitos casos em que o modelo obedece a um comportamento polinomial. Para tais modelos é necessário adaptar o ajuste para uma função polinomial de grau superior.



#### Regressão Polinomial

 A regressão polinomial pode ser tida como uma generalização da regressão linear. Para isso, podemos ver a regressão linear simples como a regressão polinomial de um polinômio de grau um. Assim, ao invés de ajustarmos a função

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x + \epsilon$$

Utilizamos

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \cdots + \alpha_m x^m + \epsilon$$

#### Regressão Polinomial

Para ajustarmos os parâmetros dessa função, basta que resolvamos um sistema de m+1 equações lineares simultâneas, tal o desenvolvimento da regressão linear múltipla. Assim, no caso da regressão polinomial, o erro padrão pode ser formulado como polinomial, o erro padrão pode ser formulado como:

$$s = \sqrt{\frac{S_r}{n-(m+1)}}$$

#### Modelos de Regressão Polinomial

- As variáveis explanatórias devem ser quantitativas.
- Servem para representar modelos com resposta curvilínea.
- São fáceis de serem ajustados, pois são um caso especial do modelo de regressão linear múltipla.

#### **Quando Utilizar Regressão Polinomial**

- Se a função de resposta curvilínea verdadeira é realmente uma função polinomial.
- Se a função de resposta curvilínea verdadeira é desconhecida (ou complexa), porém, uma função polinomial é uma boa aproximação para a verdadeira função.
- O principal problema com o uso de modelos polinomiais é com a extrapolação

- Uma variável preditora Modelo de segunda ordem
- A variável preditora, xi, é dada como desvio em relação a sua média. A razão para usar uma variável preditora centrada no modelo de regressão polinomial é que X e X2 são altamente correlacionadas.
- Isto pode causar sérias dificuldades para inverter a matriz X'X para estimar os coeficientes de regressão.

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \varepsilon_i$$
 onde  $x_i = X_i - \overline{X}$ 

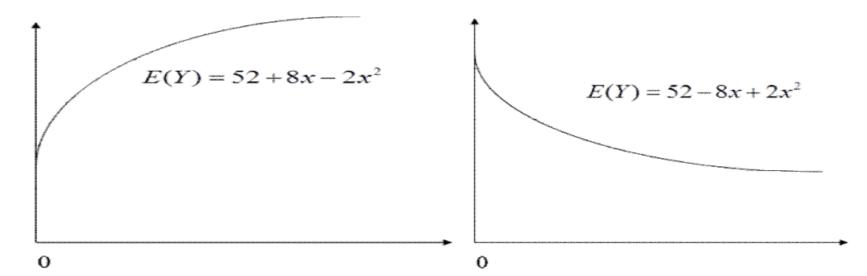
- Uma variável preditora Modelo de segunda ordem
- A variável preditora, xi, é dada como desvio em relação a sua média. A razão para usar uma variável preditora centrada no modelo de regressão polinomial é que X e X2 são altamente correlacionadas.
- Isto pode causar sérias dificuldades para inverter a matriz X'X para estimar os coeficientes de regressão.

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \varepsilon_i$$
 onde  $x_i = X_i - \overline{X}$ 

#### Exemplo:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_{11} x_i^2 + \varepsilon_i$$

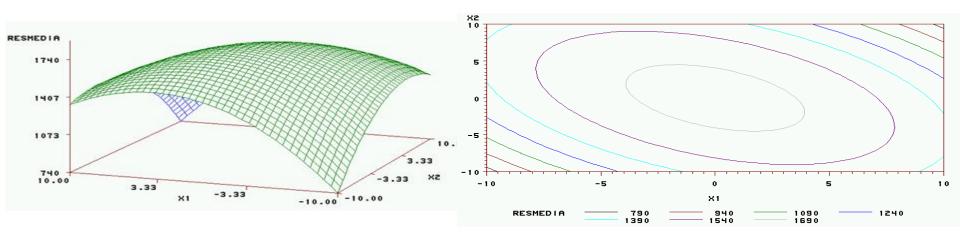
O gráfico desta função é uma parábola e denominada de função de resposta quadrática.



#### Duas variáveis preditoras - Modelo de segunda ordem

Mostra as várias combinações dos níveis das 2 variáveis preditoras que resultam na mesma resposta

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \beta_{11} x_{i1}^2 + \beta_{22} x_{i2}^2 + \beta_{12} x_{i1} x_{i2} + \varepsilon_i$$
 Linear quadrático



#### Modelos de regressão polinomial

 Os modelos de regressão polinomial são casos especiais do modelo de regressão linear múltipla geral, assim, todos os resultados vistos para o ajuste de modelos e para inferência estatística são válidos.