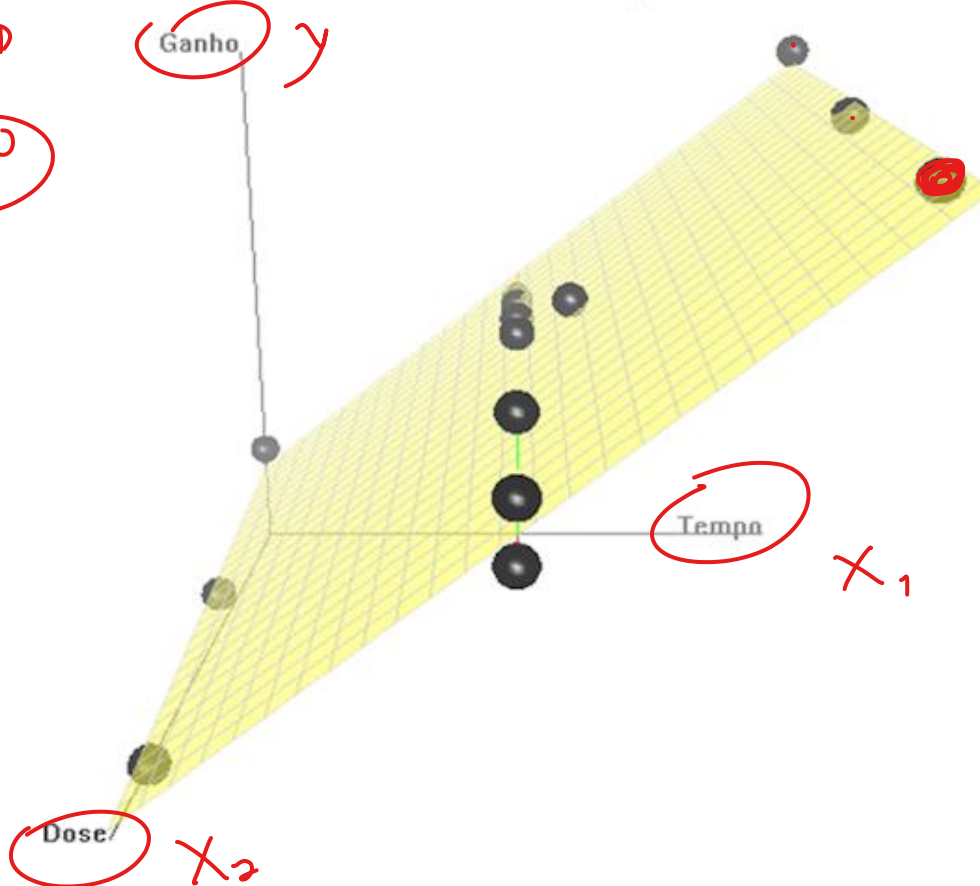


MODELO DE REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA

Apostila Suely Ruiz Giolo

Scatter do Ganho vs Tempo e Dose



$$y = X_1 X_2 \dots X_n$$

$$\hat{y}_{||}$$

$$E(y | x_i)$$

02/12 - Análise de Regressão Múltipla - ARM

09/12 - Análise de Regressão Múltipla - ARM

(16/12 - Aula Prática) (amínwona)

1. ARM (Interpretação, ANOVA, Coeficientes (Determinação e correlação), Matricial, MMQO)

2. IC ✓

3. TH ✓

4. Diagnósticos

5. Multicolineariedade

6. Diagnóstico de Influência

7. Métodos para tratar multicolineariedade

8. Seleção de variáveis e construção do modelo

9. Extrapolações

10. Validações MRLM

11. Regressão com parte categórica (Variáveis Dammy)

12. Regressão Polinomial

13. Exemplos

APOSTILA

13/01 - Seleção Variáveis

20/01 - Variáveis Dammy

27/01 - Trabalho prático

03/02 - 10/02 e 17/02 - Apresentação artigo e Trabalho Prático

(Trabalho)

Final !!

FÓRUM !!

1- Introdução

A **ANR** é uma extensão da análise de regressão linear simples

Dificuldades:

- ✓ escolher um *bom* modelo;
- ✓ visualizar o modelo ajustado na presença de mais do que duas variáveis independentes;
- ✓ interpretar as estimativas dos parâmetros do modelo de regressão escolhido.

Objetivo:

Ajustar um **MRLM** é o de prever a variável resposta por meio das variáveis independentes.

1- Introdução

Dentre um conjunto possível de variáveis independentes, a intenção é escolher um subconjunto que produza um bom modelo, isto é, um modelo parcimonioso que forneça estimativas precisas da variável resposta e que faça sentido prático, uma vez que nem sempre o modelo escolhido, em termos estatísticos, é aplicável ou faz sentido na prática.

No ajuste de um MRLM, a variável resposta, bem como as variáveis independentes, geralmente são contínuas. Na prática, as variáveis independentes (regressoras) podem ser de qualquer outra natureza. As categóricas, por exemplo, são incorporadas ao modelo por meio de variáveis indicadoras (dummy).

(Y)

$y \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$

1.1- Modelo de Regressão Linear Múltipla (MRLM)

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1$$

Considerando duas variáveis independentes (regressoras) X_1 e X_2 , o modelo de regressão linear múltipla é expresso por $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon$ e é chamado modelo de primeira ordem por ser linear nos parâmetros e nas regressoras.

Assumindo que $E(\varepsilon) = 0$ tem-se, para valores fixos $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ de $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$, que $E(Y | \mathbf{x}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$, o qual geometricamente descreve um plano (superfície de resposta). A cada ponto nesse *plano* tem-se a esperança de Y , isto é $E(Y | \mathbf{x})$, em uma dada combinação dos níveis de X_1 e X_2 .

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

1.1.1 – Interpretação dos parâmetros da ausência de interações

Considere o modelo $E(Y | \mathbf{x}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$.

- O parâmetro β_0 é o intercepto do plano da regressão. Se a extensão do modelo incluir o ponto $\mathbf{x} = (x_1, x_2) = (0, 0)$, o parâmetro β_0 fornece a resposta esperada nesse ponto. Caso contrário, não possui qualquer significado como um termo isolado no modelo de regressão.
- O parâmetro β_1 indica a mudança ocorrida na esperança de Y a cada unidade de mudança em X_1 *quando X_2 é mantida fixa*.
- Similarmente β_2 indica a mudança ocorrida na esperança de Y a cada unidade de mudança em X_2 *quando X_1 é mantida fixa*.

1.1.1 – Interpretação dos parâmetros da ausência de interações

β_0 β_1 β_2

Exemplo: Considere o modelo $E(Y | \mathbf{x}) = 20 + 0,95x_1 - 0,5x_2$ e suponha que X_2 é mantida fixa em $x_2 = 20$ de modo que $E(Y | x_2 = 20) = 10 + 0,95x_1$. Então, $\beta_1 = 0,95$ indica, a cada acréscimo de uma unidade em X_1 , um acréscimo esperado em Y de 0,95 unidades, desde que o valor de X_2 seja mantido fixo em 20. O mesmo é

verdadeiro para qualquer outro valor fixo de X_2 . Similarmente, $\beta_2 = -0,5$ indica que o decréscimo esperado em Y é de 0,5 unidades a cada acréscimo de uma unidade em X_2 , desde que o valor de X_1 permaneça fixo.

1.1.1 – Interpretação dos parâmetros da ausência de interações

Os parâmetros β_1 e β_2 são usualmente denominados coeficientes de regressão parciais por refletirem o efeito parcial de uma variável independente quando a outra variável é incluída no modelo e mantida fixa.

De modo geral, a resposta Y pode estar associada a k regressoras X_1, \dots, X_k e, sendo assim, tem-se, para $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ que:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_p x_k + \varepsilon$$

$$= \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \varepsilon.$$

regressora
parâmetros

Assumindo-se que $E(\varepsilon) = 0$, segue que:

$$E(Y | \mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j,$$

1.1.1 – Interpretação dos parâmetros da ausência de interações

A interpretação dos parâmetros é análoga ao caso de duas regressoras, ou seja, o parâmetro β_j ($j = 1, 2, \dots, k$) indica a mudança esperada em Y a cada acréscimo de uma unidade em X_j , mantendo fixas as demais regressoras.

1.2 – Efeito da interação das regressoras

Considere, agora, o modelo de regressão linear com duas regressoras X_1 e X_2 dado por $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1 X_2 + \varepsilon$ ou $E(Y | \mathbf{x}) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1 X_2$, se for assumido que $E(\varepsilon) = 0$. No modelo citado, $X_1 X_2$ representa a interação entre as regressoras X_1 e X_2 .

$$\beta_2 X_2$$

$$\beta_3 X_1 X_2$$

Se a interação for significativa, então o efeito de X_1 na esperança de Y depende do nível de X_2 e, analogamente, o efeito de X_2 na esperança de Y depende do nível de X_1 . Assim:

- quando X_2 for mantida fixa tem-se, a cada unidade de mudança em X_1 , que a mudança ocorrida na esperança de Y é de $\beta_1 + \beta_3 X_2$ unidades e, similarmente,
- quando X_1 for mantida fixa tem-se, a cada unidade de mudança em X_2 , uma mudança na esperança de Y de $\beta_2 + \beta_3 X_1$ unidades.

1.2 – Representação Matricial

$$\mathbf{Y}_{n \times 1} = \mathbf{X}_{n \times p} \boldsymbol{\beta}_{p \times 1} + \boldsymbol{\varepsilon}_{n \times 1}$$

$$\beta_0 + \sum x\beta + \varepsilon$$

↑
linha
↑
coluna

em que: $\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \dots \\ Y_n \end{bmatrix}_{n \times 1}$ $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix}_{n \times p}$ $\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \dots \\ \beta_k \end{bmatrix}_{p \times 1}$ $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}_{n \times 1}$

X

com k o número de regressoras, $p = k + 1$ o número de parâmetros, \mathbf{Y} o vetor associado à variável resposta, \mathbf{X} uma matriz de constantes, $\boldsymbol{\beta}$ o vetor de p parâmetros desconhecidos e $\boldsymbol{\varepsilon}$ o vetor de erros tal que $\boldsymbol{\varepsilon} \sim \text{Normal}$ com $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$ e matriz de variância-covariância $\Sigma(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 \mathbf{I}$.

De acordo com o modelo e suposições apresentadas, segue que $\mathbf{Y} \sim \text{Normal}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{I})$, visto que $E(\mathbf{Y} | \mathbf{x}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ e $\Sigma(\mathbf{Y}) = \sigma^2 \mathbf{I}$.

1.4 – Estimação dos parâmetros por Mínimos Quadrados Ordinários

$$e = y_i - \hat{y}_i$$

$$\text{SQerros} = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \dots + \varepsilon_n^2 = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \dots & \varepsilon_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} = \varepsilon' \varepsilon.$$

Handwritten notes: $1 \times n$ under the first row vector, $n \times 1$ next to the second column vector.

Como $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$, segue que $\varepsilon = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta$ e, desse modo, tem-se:

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

1.5 – Valores ajustados, preditos ou resíduos

O vetor de valores ajustados \hat{Y}_i será denotado por \hat{Y} e o vetor dos termos residuais $e_i = Y_i - \hat{Y}_i$ por e , de modo que:

$$\hat{Y}_{n \times 1} = \begin{bmatrix} \hat{Y}_1 \\ \hat{Y}_2 \\ \dots \\ \hat{Y}_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad e_{n \times 1} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_n \end{bmatrix}.$$

sim. $H' = H$
idemp. $HH = H$

Em termos matriciais, o vetor \hat{Y} pode então ser representado por:

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= X\hat{\beta} \quad (\text{como } \hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y) \\ \hat{Y} &= X(X'X)^{-1} X'Y \quad (\text{fazendo } H = X(X'X)^{-1} X') \\ \hat{Y} &= HY \end{aligned}$$

conhecida por matriz “chapéu”

A matriz chapéu é a matriz de projeção dos valores ajustados sobre os valores observados



Porque ela coloca um chapéu (acento circunflexo) em y

1.5 – Valores ajustados, preditos ou resíduos

e, os resíduos, por sua vez, representados por:

$$e = Y - \hat{Y}$$

$$e = Y - X\hat{\beta}$$

$$e = Y - HY = (I - H)Y$$

$$e = MY$$

$$(\text{como } \hat{Y} = X\hat{\beta})$$

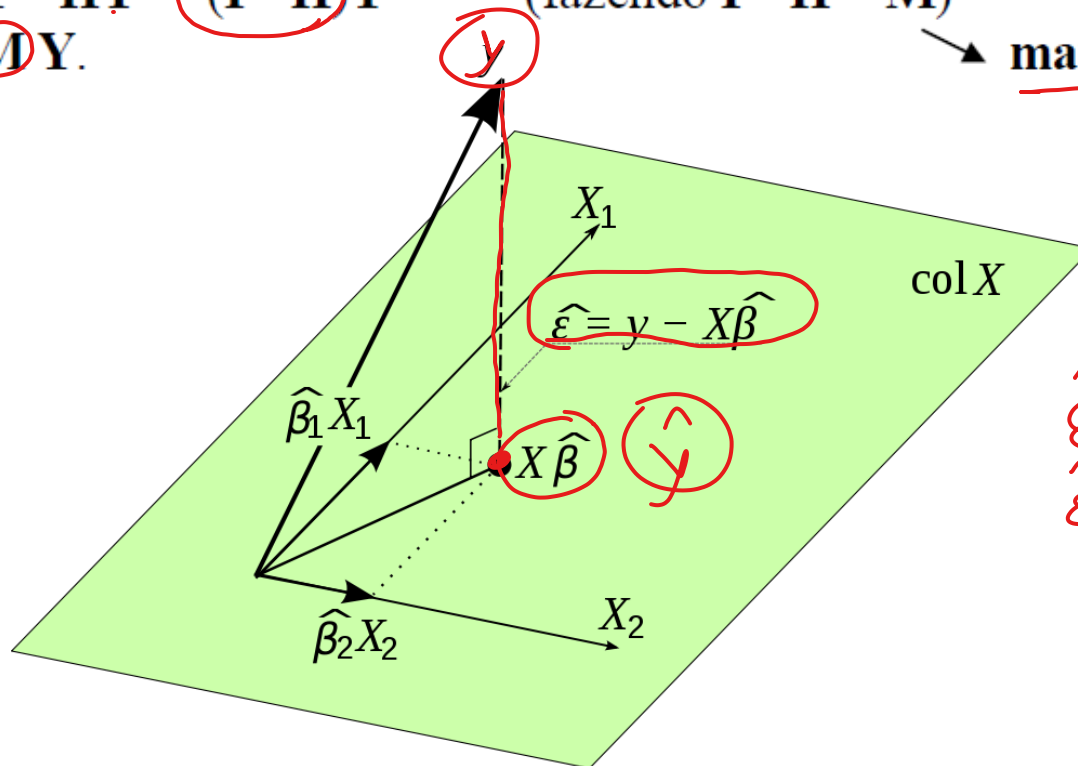
$$(\text{como } X\hat{\beta} = HY)$$

$$(\text{fazendo } I - H = M)$$

$$X(X'X)^{-1}X'$$

matriz de projeção

CPE



$$\hat{e} = y - \hat{y}$$
$$\hat{e} = y - X\hat{\beta}$$

1.6 – Propriedades dos estimadores de MQO

- $\hat{\beta}$ é não-viciado, isto é, $E(\hat{\beta}) = \beta$.
- $\hat{\beta}$ é não-viciado de mínima variância e sua matriz de variância-covariância é dada por $\text{Var-Cov}(\hat{\beta}) = \Sigma(\hat{\beta}) = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$

em que, considerando $\mathbf{C} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} =$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1,k+1} \\ C_{12} & C_{22} & \dots & C_{2,k+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{k1} & C_{k2} & \dots & C_{k+1,k+1} \end{bmatrix},$$

$$t = \frac{\hat{\beta}}{E(\hat{\beta})}$$

tem-se: $\text{Var}(\hat{\beta}_j) = \sigma^2 C_{j+1,j+1}$

$$\text{Cov}(\hat{\beta}_m, \hat{\beta}_j) = \sigma^2 C_{m+1,j+1}$$

$$\beta_0 \beta_1 \beta_2 \dots \beta_k$$

$$j = 0, 1, \dots, k$$

$$m, j = 0, 1, \dots, k \text{ e } m \neq j.$$

1.6 – Propriedades dos estimadores de MQO

- Ainda, assumindo os erros ε_i ($i = 1, \dots, n$) normalmente distribuídos, segue que $\hat{\beta}$ é também estimador de máxima verossimilhança (EMV) de β e, sendo assim, $\hat{\beta}$ é não-viciado, de mínima variância, consistente e suficiente.

1.7 – Estimação de σ^2

Assim como em regressão linear simples, é possível obter um estimador para σ^2 utilizando-se a soma de quadrados residual, SQres, dada por:

$$\begin{aligned}\text{SQres} &= \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \mathbf{e}'\mathbf{e} = \\ &= (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}.\end{aligned}$$

$$\text{SQres} = \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

$$\text{QMres} = \text{SQres} / (n - p),$$

$$\hat{\sigma}^2 = \text{QMres}.$$

$$\text{QM}_{\text{Res}} = \hat{\sigma}^2 = \frac{\text{SQ}_{\text{res}}}{\text{gl}_{\text{res}}}$$

\downarrow
(n-p)

$$\frac{\text{SQ}_{\text{Res}}}{n-p} = \hat{\sigma}^2$$

1.8 – ANOVA

$$\left\{ \begin{array}{l} H_0: \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_k = 0 \\ H_a: \text{nem todos os } \beta_j \text{ (} j = 1, 2, \dots, k \text{) são iguais a zero.} \end{array} \right.$$

Em termos matriciais tem-se:

$$\begin{aligned} \text{SQ}_{\text{res}} &= \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} \\ \text{SQ}_{\text{reg}} &= \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n Y_i\right)^2}{n} \\ \text{SQ}_{\text{total}} &= \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n Y_i\right)^2}{n}. \end{aligned}$$

1.8 – ANOVA

Tabela da análise de variância (ANOVA) do modelo de regressão.

F.V.	S.Q.	g.l.	Q.M.	F	p-valor
Regressão	$\hat{\beta}'X'Y - \frac{\left(\sum_{i=1}^n Y_i\right)^2}{n}$	$p - 1$	$SQ_{reg}/(p - 1)$	QM_{reg}/QM_{res}	depende de F
Resíduos	$Y'Y - \hat{\beta}'X'Y$	$n - p$	$SQ_{res}/(n - p)$	---	---
Total	$Y'Y - \frac{\left(\sum_{i=1}^n Y_i\right)^2}{n}$	$n - 1$	----		

n = tamanho amostral e p = número de parâmetros.

$$p = k + 1$$

$$n - 1 - (p - 1) = n - p$$

1.8 – ANOVA

Coeficiente de Determinação Múltiplo \bar{R}^2

$$R^2 = \frac{SQ_{reg}}{SQ_{total}} = 1 - \frac{SQ_{res}}{SQ_{total}} \quad (0 \leq R^2 \leq 1).$$

Problemas:

- ✓ Um valor de R grande não implica necessariamente que o modelo ajustado seja útil.
- ✓ Adicionar mais variáveis independentes ao modelo pode somente aumentar R

$$R_a^2 = 1 - \frac{SQ_{res}/(n-p)}{SQ_{total}/(n-1)} = 1 - \frac{(n-1)SQ_{res}}{(n-p)SQ_{total}}.$$

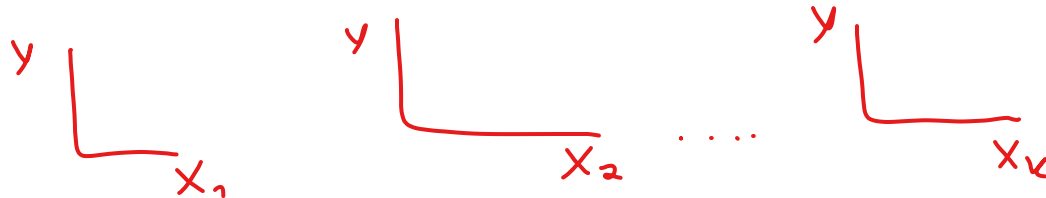
1.8 – ANOVA

Coeficiente de Correlação Múltiplo r

$$r = + \sqrt{R^2}$$

1.9 Diagrama de Dispersão

Contudo, quando diversas regressoras são importantes, ou quando as regressoras estiverem relacionadas entre si, esses diagramas serão praticamente inúteis.



2- Intervalos de Confiança

(Inferência)

2.1 Intervalo de confiança para os coeficientes da regressão

Na obtenção de intervalos de confiança dos coeficientes β_j ($j = 0, 1, \dots, k$), tem-se, em decorrência da suposição de que $\varepsilon_i \sim N(0; \sigma^2)$, $i = 1, \dots, n$, que:

$$Y_i \sim N\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij}, \sigma^2\right) \quad i = 1, \dots, n.$$

Como $\hat{\beta}$ é uma combinação linear dos Y_i 's segue que:

$$\hat{\beta} \sim N(\beta, \underbrace{\sigma^2 (X'X)^{-1}}_{\text{variância}}).$$

Logo,

$$\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j; \sigma^2 C_{jj}) \quad \begin{array}{l} j = 0, 1, \dots, k \\ i = j + 1, \end{array}$$

em que C_{ii} é o i -ésimo elemento da diagonal da matriz $(X'X)^{-1}$. Assim,

$$\frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}} \sim t_{n-p} \quad \text{para } j = 0, 1, \dots, k \quad \text{e } i = j + 1,$$

em que p = número de parâmetros do modelo ajustado e $\hat{\sigma}^2 = \text{QMres.} = \frac{\text{SQRs}}{n-p}$

$$E(\beta) = \beta$$

$$C = (X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1k} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{k1} & C_{k2} & \dots & C_{kk} \end{bmatrix}$$

β_0
 β_1
 β_k

2- Intervalos de Confiança

Portanto, um I.C.(1- α)100% para β_j ($j = 0, 1, \dots, k$) é dado por:

$$\hat{\beta}_j \pm t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}} .$$

Usualmente $\sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}$ é chamado erro-padrão do coeficiente de regressão $\hat{\beta}_j$. Note que se o valor zero pertencer ao I.C., haverá evidências de que o parâmetro β_j não é estatisticamente significativo ao nível de significância α .

2- Intervalos de Confiança

2.2 Intervalo de confiança para a resposta esperada

Para um particular ponto $\mathbf{x}_0 = (1, x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0k})$ pode-se estimar a resposta esperada, bem como seu respectivo intervalo de confiança. O valor estimado em \mathbf{x}_0 e sua variância estimada são obtidos, respectivamente, por:

$$\hat{Y}_0 = \mathbf{x}_0 \hat{\boldsymbol{\beta}} \quad \text{e} \quad \hat{V}(\hat{Y}_0) = \hat{\sigma}^2 \mathbf{x}_0' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0,$$

de modo que um I.C.(1- α)100% para a resposta esperada em \mathbf{x}_0 é:

$$\hat{Y}_0 \pm t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{\hat{V}(\hat{Y}_0)}.$$

3- Teste de Hipóteses

3.1 – Teste para significância da regressão (ANOVA)

$$F = QM_{reg} / QM_{res}$$

$\overline{F_c}$

e que, sob H_0 , tem distribuição $F_{p-1; n-p}$. Se H_0 for rejeitada, haverá evidências de que pelo menos um β_j difere de zero.

$$F_c = F(p-1; n-p)$$

3.2 – Teste para os coeficientes individuais da Regressão

$$H_0: \beta_j = 0$$

$$H_a: \beta_j \neq 0.$$

A estatística de teste usada, em geral, para testar as hipóteses apresentadas é dada por:

$$t^* = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}} = \frac{\hat{\beta}_j}{e.p.(\hat{\beta}_j)} \overset{\text{sob } H_0}{\sim} t_{n-p} \quad (j = 0, 1, \dots, k \text{ e } i = j + 1),$$

em que C_{jj} é o j -ésimo elemento da diagonal da matriz $(X'X)^{-1}$ e $\hat{\sigma}^2 = QM_{res}$. Se H_0 não for rejeitada, haverá evidências de que a contribuição da regressora X_j para a explicação de Y não é significativa e, desse modo, X_j pode ser excluída do modelo. Caso contrário, a regressora deve ser mantida no modelo.

Exemplo

Operador	y	x_1	x_2
1	12	18	2 ✓
2	3	16	3 ✓
3	11	25	2 ✓
4	1	12	3
5	13	20	3
6	20	35	2
7	2	17	1.5
8	25	25	5
9	26	39	1
10	15	20	2.5
11	1	18	2
12	15	29	3.5
13	11	20	5
14	5	16	1
15	7	29	1.5

$n = 15$

Em que:

→ y: número de itens produzidos com defeito, em certo dia.

{ x_1 : produção média por hora

{ x_2 : tempo, em semanas, decorrido desde o último reparo na máquina

Pede-se:

- a) Ajuste um modelo para o número de itens produzidos com defeito em função da produção média por hora e do tempo decorrido desde o último reparo na máquina.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \epsilon. \text{ Represente-o matricialmente.}$$

Interprete

- b) Pode se afirmar que há evidências suficientes de que o modelo encontrado em contribui na predição de y?

\hat{y}

→

$\hat{\beta}$

ANOVA

- c) Encontre o valor de R^2 e o R^2 ajustado. Interprete o valor de R^2 .
d) Teste os coeficientes de regressão individualmente.
e) Intervalo de Confiança para os Coeficientes de Regressão.
f) Intervalo de Confiança para a resposta esperada $x_1=13$ e $x_2=3.2$