

Contents

4 CONTENTS

Introdução

Introdução a matrizes

O estudo de Regressão Linear Múltipla requer conhecimento de notação matricial. Seguem as definições necessárias para o início do estudo desta técnica.

Neste texto são apresentadas definições e operações utilizadas na regressão linear múltipla, já a operação com matrizes no R será apresentada em outro capítulo.

2.1 Definições

• Matriz é um arranjo retangular de elementos organizados em linhas e em colunas. Uma matriz é denotada por uma letra maíuscula e os elementos por letras minúsculas, como em A:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & \cdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Uma matriz com $m \times n$ elementos, ordenados em m linhas e n colunas, é uma matriz de ordem m por n e denotada por $m \times n$. Na notação a_{ij} o índice i indica a linha e o j a coluna.

Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 10 \\ 3 & 6 & 12 \end{bmatrix}$$

• Matriz Quadrada é caracterizada por ter o número de linhas igual ao numero de colunas, m=n.

8

Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 8 & 2 \\ 4 & 10 \end{bmatrix}$$

Em uma matriz quadrada, os elementos a_{ij} , com i=j, forma a diagonal principal.

• Matriz diagonal é caracterizada por ter os elementos $a_{ij}=0$ para todo $i\neq j.$

Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

• Matriz identidade é uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal principal são iguais a 1. É donotada por ${\bf I}$.

Exemplo

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Observe que $a_{ij}=0$ para $i\neq j$ e $a_{ij}=1$ para i=j.

• Matriz nula é uma matriz cujos elementos são iguais a 0.

Exemplo

$$I = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Observe que $a_{ij}=0$ para $i\neq j$ e $a_{ij}=1$ para i=j.

• Matriz transposta é o resultado da troca das linhas pelas colunas e denotada por A^T ou A'.

2.1. DEFINIÇÕES

9

Exemplo

Para

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 7 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$$

a sua transposta A' é

$$A' = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 7 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

• Matriz Simétrica é uma matriz quadrada com a propriedade de ser igual a sua transposta. Assim, A = A'.

Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 4 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

• Traço de matriz quadrada é a soma dos elementos da diagonal principal:

$$Trao(A) = \sum_{i,j} a_{ij} \quad \forall i = j$$

Exemplo

Para

$$A = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 9 \end{bmatrix}$$

os elementos da diagonal principal são 7, 8 e 9, logo:

$$Trao(A) = 7 + 8 + 9 = 24$$

- Determinante de matriz é um valor associado a uma matriz quadrada, A, e denotada por |A|.
- Matriz singular é a matriz A cujo determinante é nulo, |A| = 0.

2.2 Operações com matrizes

• Soma e subtração de duas matrizes com as mesmas dimensões podem ser somadas ou subtraídas adicionandos pela soma ou subtração dos elementos correspondentes.

Exemplo

• Produto por escalar de uma matriz A por um escalar c é obtida multiplicando cada elemento de A pelo valor de c.

Exemplo

$$5 \times \begin{bmatrix} 3 & 8 & 7 \\ 8 & 2 & 6 \\ 7 & 6 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 & 40 & 35 \\ 40 & 10 & 30 \\ 35 & 30 & 5 \end{bmatrix}$$

• Produto de matrizes só pode ser realizada caso o número de colunas da matriz que pré-multiplica for igual ao número de linhas da matriz que pós-multiplica. A operação consiste na soma dos produtos de cada elementos da linha da matriz que pré-multiplica pelos respectivos elementos da coluna da matriz que pós-multiplica. O resultado será uma matriz com o número de linhas da que pré-multiplica e com número de colunas das que pós-multiplica.

Exemplo

$$\begin{bmatrix} 7 & 2 \\ 2 & 8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 & 8 & 7 \\ 8 & 2 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \times 3 + 2 \times 8 & 7 \times 8 + 2 \times 2 & 7 \times 7 + 2 \times 6 \\ 2 \times 3 + 8 \times 8 & 2 \times 8 + 8 \times 8 & 2 \times 7 + 8 \times 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 37 & 60 & 61 \\ 70 & 80 & 62 \end{bmatrix}$$

• Matriz inversa de uma matriz A é representada por A^{-1} e aquela que

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

onde I é a matriz identidade. Para uma matriz A ter inversa é necessário e suficiente que seja **quadrada** e **não sigular**, isto é, o determinante é diferente de zero.

11

Exemplo

Para

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

a sua matriz inversa é

$$A^{-1} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 5 & -1 & -2 \\ -2 & 4 & -1 \\ 1 & -2 & 5 \end{bmatrix}$$

Verificando $A^{-1}A = I$

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 5 & -1 & -2 \\ -2 & 4 & -1 \\ 1 & -2 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Propriedades de matrizes 2.3

Considerando que as operação de multiplicação, transposição e inversão das matrizes A, B e C. São válidas as seguintes propriedades.

Multiplicação

- ABC = A(BC) = A(BC)
- A(B+C) = AB + AC
- (B+C)A = BA + CA

Transposta de Matrizes

- (A')' = A
- (A+B)' = A' + B'
- (AB)' = B'A'

Inversão de Matrizes

- $(A^{-1})^{-1} = A$ $(AB)^{-1} = B^{-1}a^{-1}$ $(A')^{-1} = (A^{-1})'$

Matrizes no R

O R tem uma estrutura de dados que organiza os seus valores em linhas e colunas, cujos os elemetentos devem ser do mesmo tipo. Essa estrutura é uma matriz e quando os seus valores são numéricos o seu coportamento é igual ao de uma matriz.

Uma **matriz** é um arranjo retangular de elementos organizados em linhas e em colunas. Uma matriz é denotada por uma letra maíuscula e os elementos por letras minúsculas, como em A:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & \cdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Uma matriz com $m \times n$ elementos, ordenados em m linhas e n colunas, é uma matriz de ordem m por n e denotada por $m \times n$. Na notação a_{ij} o índice i indica a linha e o j a coluna.

3.1 Gerar matrizes no R

A função matrix() gera uma matriz com $m \times n$ valores organizados em m linhas e n colunas. A matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 10 \\ 3 & 6 & 12 \end{bmatrix}$$

pode ser gerada pelo código abaixo.

```
dados <- c(2,3,5,6,10,12)
m = 2 # Número de linhas
n = 3 # Número de colunas
A <- matrix(dados, nrow = m, ncol = n)
A</pre>
```

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 2 5 10
## [2,] 3 6 12
```

Observe que a matriz gerada tem m=2 linhas e n=3 colunas e os $n\times m=6$ valores são alocados por colunas, iniciando pela $1^{\rm a}$ coluna da $1^{\rm a}$ linha, esse comporpamento é o padrão e pode ser alterado pelo argumento byrow =T.

Uma **matriz quadrada** é caracterizada por ter o número de linhas igual ao numero de colunas, m = n. Assim,

$$A = \begin{bmatrix} 8 & 2 \\ 4 & 10 \end{bmatrix}$$

A matriz acima é gerada por

```
dados <- c(8,4,2,10)
m = 2 # Número de linhas
n = 2 # Número de colunas
A <- matrix(dados, nrow = m, ncol = n)
A</pre>
```

```
## [,1] [,2]
## [1,] 8 2
## [2,] 4 10
```

Em uma matriz quadrada, os elementos a_{ij} , com i = j, forma a diagonal principal. Os elementos de uma diagonal podem ser obtidos pela função diag().

```
A <- matrix(c(2,5,5,3),2,2)
diag(A)
```

```
## [1] 2 3
```

Uma matriz diagonal é caracterizada por ter os elementos $a_{ij}=0$ para todo $i\neq j$. A função diag(), além de obter os elementos da diagonal principal, gera uma matriz diagonal. A matriz

$$A = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

pode ser criada pelo código

```
aux <- c(8,2,5)
A<- diag(aux)
A</pre>
```

A Matriz identidade pode ser uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal principal são iguais a 1. A matriz

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

pode ser gerada por

```
aux <- rep(1,3)
I <- diag(aux)
I</pre>
```

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 1 0 0
## [2,] 0 1 0
## [3,] 0 0 1
```

Observe que $a_{ij} = 0$ para $i \neq j$ e $a_{ij} = 1$ para i = j.

A Matriz nula tem todos os elementos iguais a 0. Por exemplo

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

é gerada pela função $\mathtt{matrix}()$ com o valor 0 (zero) sendo o único para preencher todas as possições da matriz.

```
B <- matrix (0, nrow=2, ncol=3)
B
```

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 0 0 0
## [2,] 0 0 0
```

3.2 Transposta de uma matriz

Matriz transposta é o resultado da troca das linhas pelas colunas e denotada por A^T ou A^\prime .

Para

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 7 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$$

a sua transposta A' é

$$A' = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 7 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

A função t() gera a matriz transposta de uma matriz. Observe o códio seguinte

```
aux <- c(2,0,2,7,1,0)
A <- matrix (aux,nrow=3,ncol=2)
tranposta_A <- t(A)
A</pre>
```

```
## [,1] [,2]
## [1,] 2 7
## [2,] 0 1
## [3,] 2 0
```

 ${\tt tranposta_A}$

3.3 Traço de uma matriz

• Traço de matriz quadrada é a soma dos elementos da diagonal principal de uma matriz:

$$Trao(A) = \sum_{i,j} a_{ij} \quad \forall i = j$$

Para

$$A = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 9 \end{bmatrix}$$

os elementos da diagonal principal são 7, 8 e 9, logo:

$$Trao(A) = 7 + 8 + 9 = 24$$

O traço de A pode ser obtido por meio das funções diag() e sum() como abaixo.

```
aux<-c(7,2,3,2,8,4,3,4,9)
A<- matrix(aux,3,3)
sum(diag(A))</pre>
```

[1] 24

3.4 Determinante de uma matriz

O **Determinante de matriz** é um valor associado a uma matriz quadrada, A, e denotada por |A|. A função det() calcula o determinante de uma matriz.

```
aux<-c(7,2,3,2,8,4,3,4,9)
A<- matrix(aux,3,3)
det(A)</pre>
```

[1] 332

A Matriz singular é a matriz A cujo determinante é nulo, $|A|=0.\,$ A matriz B é singular

```
aux<-c(7,2,3,14,4,6,3,4,9)
A<- matrix(aux,3,3)
det(A)</pre>
```

[1] 0

Propriedades do determinante:

- O determinante de uma matriz quadrada A é igual ao determinante da sua transposta: |A| = |A'|;
- Caso exista uma linha ou coluna na matriz igual a zero, o determinante é zero;
- Caso exista duas filas paralelas, iguais ou proporcional, o determinante é zero;
- O determinante do produto de um número real k por uma matriz A é igual ao produto de k elevado a n, onde n é o número de linhas de A, pelo determinante de A: $|k.A| = k^n.|A|$;
- Caso os elementos abaixo ou acima da diagonal principal forem nulos, o determinante será o produto dos elementos da diagonal principal;
- Teorema de Binet: Seja A e B matrizes quadradas de ordem n, o determinante do produto de A por B é igual ao produto dos determinantes de A e B: |AB| = |A|.|B|.

3.5 Matriz inversa

A Matriz inversa de uma matriz A é representada por A^{-1} é aquela que

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

onde I é a matriz identidade. Para uma matriz A ter inversa é necessário e suficiente que seja **quadrada** e **não sigular**, isto é, o determinante é diferente de zero.

Para

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -5 \\ -1 & 3 \end{bmatrix}$$

a sua matriz inversa é

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 3 & 5 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Verificando $A^{-1}A = I$

$$\begin{bmatrix} 2 & -5 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 5 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A função solve() é usada para resulver sistemas de equações lineares e em uma de suas chamadas retornar a matriz inversa do seu argumento.

```
A = matrix(c(2,-1,-5,3),2,2)
inv_A = solve(A)
inv_A
```

para verificar a relação entre a sua matriz e a suam matriz inversa

```
A %*% inv_A
```

3.6 Operações com matrizes no R

A Soma ou subtração de duas matrizes com as mesmas dimensões é obtida pela soma/subtração dos elementos correspondentes.

O operador para essas operações são + e -.

```
A <- matrix (c(7,2,3,2,8,4,3,4,9),3,3)
B <- matrix (c(3,8,7,8,2,6,7,6,1),3,3)
A
```

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 7 2 3
## [2,] 2 8 4
## [3,] 3 4 9
```

В

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 3 8 7
## [2,] 8 2 6
## [3,] 7 6 1
```

A+B

O **Produto por escalar** de uma matriz A por um escalar c é obtida multiplicando cada elemento de A pelo valor de $c \in \mathbf{R}$.

O operador para essa operação *.

$$5 \times \begin{bmatrix} 3 & 8 & 7 \\ 8 & 2 & 6 \\ 7 & 6 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 & 40 & 35 \\ 40 & 10 & 30 \\ 35 & 30 & 5 \end{bmatrix}$$

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 3 8 7
## [2,] 8 2 6
## [3,] 7 6 1
```

5*A

Na situação quando duas matrizes A e B tem o mesmo número de linhas e colunas o operador * executa o produto elemento a elemento.

$$\begin{bmatrix} 7 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 9 \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} 3 & 8 & 7 \\ 8 & 2 & 6 \\ 7 & 6 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21 & 16 & 21 \\ 16 & 64 & 24 \\ 21 & 24 & 9 \end{bmatrix}$$

No R seria

```
A <- matrix(c(7,2,3,2,8,2,3,4,8),3,3)
B <- matrix(c(3,8,7,8,2,6,7,6,1),3,3)
A
```

```
## [,1] [,2] [,3]
## [1,] 7 2 3
## [2,] 2 8 4
## [3,] 3 2 8
```

В

A*B

O **Produto de matrizes** só pode ser realizada caso o número de colunas da matriz que pré-multiplica for igual ao número de linhas da matriz que pós-multiplica. A operação consiste na soma dos produtos de cada elementos da linha da matriz que pré-multiplica pelos respectivos elementos da coluna da matriz que pós-multiplica. O resultado será uma matriz com o número de linhas da que pré-multiplica e com número de colunas das que pós-multiplica.

O operador para essas operações são %*%.

$$\begin{bmatrix} 7 & 2 \\ 2 & 8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 & 8 & 7 \\ 8 & 2 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 37 & 60 & 61 \\ 70 & 80 & 62 \end{bmatrix}$$

```
A <- matrix(c(7,2,2,8),2,2)
B <- matrix(c(3,8,8,2,7,6),nrow = 2, ncol =3)
A
```

```
## [,1] [,2]
## [1,] 7 2
## [2,] 2 8
```

В

[,1] [,2] [,3] ## [1,] 3 8 7 ## [2,] 8 2 6

A%*%B

[,1] [,2] [,3] ## [1,] 37 60 61 ## [2,] 70 32 62

Regressão Linear Múltipla

4.1 Modelo de Regressão Linear Múltipla

Seja a relação linear entre uma variável dependente Y e p variáveis independentes X. Então, o modelo estatístico de uma regressão linear, nos parâmetros, múltipla com p variáveis independentes e um termo aleatório, ϵ , é dado por

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \dots + + \beta_p X_{pi} + \epsilon_i$$

com $i=1,2,\ldots,n$. De forma alternativa, tem-se

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j X_{ji} + \epsilon_i$$

Uma outra forma de expressar as relações, fazendo $i=1,2,\dots,n,$ surgem as equações:

$$Y_1 = \beta_0 + \beta_1 X_{11} + \beta_2 X_{21} + \dots + \beta_n X_{n1}$$

$$\tag{4.1}$$

$$Y_2 = \beta_0 + \beta_1 X_{12} + \beta_2 X_{22} + \dots + \beta_p X_{p2}$$
 (4.2)

$$Y_3 = \beta_0 + \beta_1 X_{13} + \beta_2 X_{23} + \dots + \beta_p X_{p3}$$
 (4.3)

$$\vdots (4.4)$$

$$Y_n = \beta_0 + \beta_1 X_{1n} + \beta_2 X_{2n} + \dots + \beta_p X_{pn}$$
 (4.5)

Em notação matricial, esse sistema de equações pode ser expressa por

$$Y = X\beta + \epsilon$$

que de forma explícita é

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2p} \\ \vdots & & \cdots & & \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_0 \\ \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_p \end{bmatrix}$$

Sendo

- n o número de observações e p a quantidade de variáveis explicativas;
- X uma matriz $n \times (p+1)$;
- Y um vetor $n \times 1$;
- β um vetor $(p+1) \times 1$; e
- ϵ um vetor $n \times 1$.

O problema consiste em obter o modelo ajustado:

$$\hat{Y}_{i} = \hat{\beta}_{0} + \hat{\beta}_{1} X_{1i} + \hat{\beta}_{2} X_{2i} + \dots + + \hat{\beta}_{n} X_{ni}$$

É, para isso, deve-se obter o vetor β . Admita-se as seguintes pressuposições:

- 1. A variável dependente Y é a função linear das variáveis independentes X.
- 2. Os valores das variáveis independentes são fixos.
- 3. A média dos erros é nula, isto é, $E(\epsilon_i) = 0$.
- 4. Os erros são homoscedásticos, assim, $V(\epsilon_i) = \sigma^2$.
- 5. Os erros são não correlacionados entre si, isto é, $E(\epsilon_i \epsilon_j) = 0$, para $i \neq j$.
- 6. Os erros têm distribuição normal.

Considere algumas consequências:

- Combine (4) e (5) para $E(\epsilon'\epsilon) = I\sigma^2$.
- As pressuposições (1), (2) e (3) são necessárias para demostrar que os estimadores de Mínimos Quadrados são **não tendenciosos**.
- As pressuposições de (1) a (5) permitem demonstrar que tais estimadores são **não tendenciosos** e de **variância mínima**.
- A pressuposição (6) é necessária para construção de teste de hipóteses e de intervalos de confiânça para os parametros.

4.2 Estimadores dos parâmetros

O Método dos Mínimos Quadrados consiste em adotar como estimativas dos parâmetros os valores que minimiza a soma de quadrados dos desvios.

O modelo $Y=X\beta+\epsilon$ têm $\epsilon=Y-X\beta,$ então a soma dos quadrados dos desvios é dada por

$$Z = \epsilon' \epsilon \tag{4.6}$$

$$= (Y - X\beta)'(Y - X\beta) \tag{4.7}$$

$$= Y'Y - Y'X\beta - \beta'X'Y + \beta'X'X\beta \tag{4.8}$$

Como $Y'X\beta = \beta'X'Y$ são iguais, então

$$Z = Y'Y - 2\beta'X'Y + \beta'X'X\beta \tag{4.9}$$

A função Z apresenta seu valor mínimo para β que tornem a diferencial de Z e igualar a 0 (zero).

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -2 \left(\partial \beta' \right) X'Y + \left(\partial \beta' \right) X'X \hat{\beta} + \hat{\beta}' X'X \left(\partial \beta \right) = 0$$

Uma vez que $\left(\partial\beta'\right)X'X\hat{\beta}=\hat{\beta}'X'X\left(\partial\beta\right)$ tem-se

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -2 \left(\partial \beta' \right) X'Y + 2 \left(\partial \beta' \right) X'X\hat{\beta} \tag{4.10}$$

$$=2\left(\partial \beta ^{\prime }\right) \left[X^{\prime }X\hat{\beta }-X^{\prime }Y\right] \tag{4.11}$$

Assim, para definir $\hat{\beta}$ faça

$$X'X\hat{\beta} - X'Y = 0$$

Logo,

$$\hat{\beta} = \left(X'X \right)^{-1} X'Y.$$

Ajuste do modelo