

# Forma matricial do MRLS

Prof. Juvêncio Santos Nobre

Departamento de Estatística e Matemática Aplicada

Universidade Federal do Ceará-Brasil

<http://www.dema.ufc.br/~juvencio>

DEMA-UFC

Capital do **Ceará**, setembro de 2022

# Conteúdo

## 1 Forma matricial do MRLS

## 2 Método de Mínimos Quadrados

# MRLS

Considere o MRLS com forma funcional

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

organizando lexicograficamente, temos que

$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_1 + e_1$$

$$y_2 = \beta_0 + \beta_1 x_2 + e_2$$

$$\vdots$$

$$y_n = \beta_0 + \beta_1 x_n + e_n.$$

# MRLS

Perceba que podemos reescrever a estrutura do modelo da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \beta_0 + \beta_1 x_1 \\ \beta_0 + \beta_1 x_2 \\ \vdots \\ \beta_0 + \beta_1 x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}. \tag{2}
 \end{aligned}$$

# MRLS

Denotando

■  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  de variáveis respostas.

■  $\mathbf{X}$ : matriz  $(n \times 2)$  de especificação do modelo, dada por

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$$

■  $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^\top$ : vetor  $(2 \times 1)$  de parâmetros de regressão.

■  $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  da fonte de variação/erro de medida.

■ Então, podemos reescrever o MRLS (1) da seguinte forma

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}.$$

# MRLS

Denotando

- $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  de variáveis respostas.
- $\mathbf{X}$ : matriz  $(n \times 2)$  de especificação do modelo, dada por

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^\top$ : vetor  $(2 \times 1)$  de parâmetros de regressão.
- $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  da fonte de variação/erro de medida.
- Então, podemos reescrever o MRLS (1) da seguinte forma

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}.$$

# MRLS

Denotando

- $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  de variáveis respostas.
- $\mathbf{X}$ : matriz  $(n \times 2)$  de especificação do modelo, dada por

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^\top$ : vetor  $(2 \times 1)$  de parâmetros de regressão.
- $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  da fonte de variação/erro de medida.
- Então, podemos reescrever o MRLS (1) da seguinte forma

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}.$$

# MRLS

Denotando

- $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  de variáveis respostas.
- $\mathbf{X}$ : matriz  $(n \times 2)$  de especificação do modelo, dada por

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^\top$ : vetor  $(2 \times 1)$  de parâmetros de regressão.
- $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  da fonte de variação/erro de medida.
- Então, podemos reescrever o MRLS (1) da seguinte forma

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}.$$



# MRLS

Denotando

- $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  de variáveis respostas.
- $\mathbf{X}$ : matriz  $(n \times 2)$  de especificação do modelo, dada por

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)^\top$ : vetor  $(2 \times 1)$  de parâmetros de regressão.
- $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^\top$ : vetor  $(n \times 1)$  da fonte de variação/erro de medida.
- Então, podemos reescrever o MRLS (1) da seguinte forma

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}.$$

# MRLS

- Em geral, para ajustar o MRLS assume-se que

$$\mathbf{e} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

- Tal suposição implica que  $e_1, \dots, e_n$  representa uma sequência de variáveis aleatórias de média zero, homoscedásticos com variância  $\sigma^2$  e não-correlacionados.
- Para se realizar inferências de segunda ordem (construção de intervalos de confiança e testes de hipóteses, por exemplo) é comum assumir normalidade, i.e.,

$$\mathbf{e} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

# MRLS

- Em geral, para ajustar o MRLS assume-se que

$$\mathbf{e} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

- Tal suposição implica que  $e_1, \dots, e_n$  representa uma sequência de variáveis aleatórias de média zero, homoscedásticos com variância  $\sigma^2$  e não-correlacionados.
- Para se realizar inferências de segunda ordem (construção de intervalos de confiança e testes de hipóteses, por exemplo) é comum assumir normalidade, i.e.,

$$\mathbf{e} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

# MRLS

- Em geral, para ajustar o MRLS assume-se que

$$\mathbf{e} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

- Tal suposição implica que  $e_1, \dots, e_n$  representa uma sequência de variáveis aleatórias de média zero, homoscedásticos com variância  $\sigma^2$  e não-correlacionados.
- Para se realizar inferências de segunda ordem (construção de intervalos de confiança e testes de hipóteses, por exemplo) é comum assumir normalidade, i.e.,

$$\mathbf{e} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

# Exercícios (entregar próxima aula)

**Exercício 1:** Faça um breve ensaio sobre distribuição normal multivariada e suas propriedades apresentadas de forma matricial. Em especial, apresente as 3 definições equivalentes da distribuição normal multivariada (algumas sem a necessidade da fdp).

**Exercício 2:** Usando um software de sua preferência, plote a função densidade de probabilidade e a respectiva curva de nível (mapa de contorno) da  $\mathcal{N}_2(0, 0, 1, 1, \rho)$ , para  $\rho = 0, \pm 0.1, \pm 0.5, \pm 0.9$ . Interprete os gráficos.

# Exercícios (entregar próxima aula)

**Exercício 3:** Faça um breve ensaio sobre distribuição  $t$ -Student multivariada e suas propriedades apresentadas de forma matricial.

**Exercício 4:** Usando um software de sua preferência, plote a função densidade de probabilidade e a respectiva curva de nível (mapa de contorno) da  $t_\nu(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ , para  $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ ,  $\boldsymbol{\Sigma} = \rho \mathbf{I}_2$ ,  $\rho = 0, \pm 0.1, \pm 0.5, \pm 0.9$  e  $\nu = 1, 2, 10, 30$  e  $100$ . Interprete os gráficos.

**Exercício 5:** Apresente um resumo sobre:

- i) Distribuições  $\chi^2$  e  $F$  não centrais.
- ii) Distribuições de formas lineares e quadráticas (sob suposição de normalidade).

# Método de Mínimos Quadrados

- Sob as suposições usuais associadas ao MRLS é possível obter o Estimador de Mínimos Quadrados (EMQ) de  $\beta$  através da minimização da seguinte função objetivo

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2. \quad (3)$$

- Lembrando que qualquer soma de quadrados pode ser reescrita como (Lista 0) uma forma quadrática

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 = \mathbf{a}^\top \mathbf{a} = \|\mathbf{a}\|^2$$

com  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)^\top$ .

- Então podemos reescrever (3) como

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2,$$

i.e.,  $Q(\beta)$  é uma forma quadrática.

# Método de Mínimos Quadrados

- Sob as suposições usuais associadas ao MRLS é possível obter o Estimador de Mínimos Quadrados (EMQ) de  $\beta$  através da minimização da seguinte função objetivo

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2. \quad (3)$$

- Lembrando que qualquer soma de quadrados pode ser reescrita como (Lista 0) uma forma quadrática

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 = \mathbf{a}^\top \mathbf{a} = \|\mathbf{a}\|^2$$

com  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)^\top$ .

- Então podemos reescrever (3) como

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2,$$

i.e.,  $Q(\beta)$  é uma forma quadrática.



# Método de Mínimos Quadrados

- Sob as suposições usuais associadas ao MRLS é possível obter o Estimador de Mínimos Quadrados (EMQ) de  $\beta$  através da minimização da seguinte função objetivo

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2. \quad (3)$$

- Lembrando que qualquer soma de quadrados pode ser reescrita como (Lista 0) uma forma quadrática

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 = \mathbf{a}^\top \mathbf{a} = \|\mathbf{a}\|^2$$

com  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)^\top$ .

- Então podemos reescrever (3) como

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2,$$

i.e.,  $Q(\beta)$  é uma forma quadrática.

# Método de Mínimos Quadrados

Note que

$$\begin{aligned}Q(\beta) &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) \\&= \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - \mathbf{y}^\top \mathbf{X}\beta - \beta^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{y} + \beta^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\beta.\end{aligned}$$

Dado que  $\mathbf{y}^\top \mathbf{X}\beta = \beta^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$  (Por que isso é verdade?), então a função objetivo se simplifica a

$$Q(\beta) = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^\top \mathbf{X}\beta + \beta^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})\beta.$$

# Resultados - Q15 Lista 0

**Lembrete:** Considere  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top$  e  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)^\top$  vetores reais de dimensão  $n \times 1$  e  $\mathbf{A}$  uma matriz quadrada de ordem  $n$ . Então,

$$\text{i)} \quad \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{a}.$$

$$\text{ii)} \quad \frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top.$$

$$\text{iii)} \quad \frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top)\mathbf{x}.$$

# Equações normais

Logo, dado que a matriz  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  é simétrica, tem-se que

$$\frac{\partial Q(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}^\top \mathbf{y} + 2(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})\boldsymbol{\beta},$$

de forma que o sistema de **equações normais** (equação de estimação) é dado por

$$\left. \frac{\partial Q(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\hat{\boldsymbol{\beta}}} = \mathbf{0},$$

implicando que

$$-2\mathbf{X}^\top \mathbf{y} + 2(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{0} \Leftrightarrow (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

Considerando que  $\mathbf{X}$  é de **posto completo**, implicando que  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  é **não singular**, tem-se que a solução do sistema de equações, e respectivo candidato a EMQ de  $\boldsymbol{\beta}$ , é

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}. \quad (4)$$

# Matriz de segundas derivadas

A matriz de segundas derivadas, com relação ao vetor de parâmetros, da função objetivo é dada por

$$\frac{\partial^2 Q(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top} = 2(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})$$

que é uma matriz **positiva definida** (exercício - fazer quadro). Portanto,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

corresponde ao estimador de Mínimos Quadrados de  $\boldsymbol{\beta}$ .

# Exercícios (entregar próxima aula)

**Exercício 6:** Discuta sob que condição a matriz de especificação  $\mathbf{X}$  associada ao MRLS (2) é de posto completo.

**Exercício 7:** Mostre que  $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}$  é não-singular, se e somente se,  $\mathbf{A}$  é de posto completo, sendo  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ , i.e., uma matriz de dimensão  $n \times p$ .

**Exercício 8:** Se  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ , mostre que  $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}$  é positiva definida, i.e.,  $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0.$$

**Exercício 9:** Mostre que

$$Q(\beta) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}\|^2 + \|\mathbf{X}(\beta - \hat{\beta})\|^2.$$

# Observações

Obs1. Note que

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \mathbf{A}_x \mathbf{y},$$

i.e.,  $\hat{\beta}$  é uma **transformação linear** do vetor de variáveis respostas, implicando que  $\hat{\beta}_0$  e  $\hat{\beta}_1$  são combinações lineares de  $\mathbf{y}$  como já provamos.

Obs2. Perceba que

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x}_n \\ n\bar{x}_n & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \begin{pmatrix} n\bar{y}_n \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{pmatrix}$$

$$\text{e } (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{S_{xx}} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 / n & -\bar{x}_n \\ -\bar{x}_n & 1 \end{pmatrix}.$$

# Observações

Portanto,

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \frac{1}{S_{xx}} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 / n & -\bar{x}_n \\ -\bar{x}_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n\bar{y}_n \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{pmatrix}.$$

Lembrando que

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 = S_{xx} + n\bar{x}_n^2 \text{ e } \sum_{i=1}^n x_i y_i = S_{xy} + n\bar{x}_n \bar{y}_n,$$

então

$$\left( \sum_{i=1}^n x_i^2 / n \right) n\bar{y}_n - \bar{x}_n \sum_{i=1}^n x_i y_i = S_{xx} \bar{y}_n - \bar{x}_n S_{xy}$$

e

$$-\bar{x}_n n\bar{y}_n + \sum_{i=1}^n x_i y_i = S_{xy}.$$



# Observações

Logo, pode-se concluir que

$$\therefore (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \frac{1}{S_{xx}} \begin{pmatrix} S_{xx} \bar{y}_n - \bar{x}_n S_{xy} \\ S_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{y}_n - \bar{x}_n S_{xy} / S_{xx} \\ S_{xy} / S_{xx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{pmatrix}$$

**Obs3.** Sob o MRLS tem-se que

$$\mathbf{y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{I}_n),$$

em que  $\mathbf{I}_n$  denota a matriz identidade de ordem,  $n$ . Adicionalmente, sob a suposição de normalidade

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{I}_n).$$

# Observações

Obs4. Tem-se que

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\hat{\beta}] &= \mathbb{E}[(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}] = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbb{E}[\mathbf{y}] \\ &= (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \beta = \beta,\end{aligned}$$

i.e.,  $\hat{\beta}$  é um estimador não viesado de  $\beta$ , como já havíamos provado de forma marginal.

Por outro lado, a matriz de variâncias-covariâncias do EMQ de  $\beta$  é dada por

$$\begin{aligned}\text{Var}[\hat{\beta}] &= \text{Var}[\mathbf{A}_x \mathbf{y}] = \mathbf{A}_x \text{Var}[\mathbf{y}] \mathbf{A}_x^\top = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \sigma^2 \mathbf{I}_n [(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top]^\top \\ &= \sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{X} (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \\ &= \frac{\sigma^2}{S_{xx}} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 / n & -\bar{x}_n \\ -\bar{x}_n & 1 \end{pmatrix} = \sigma^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{S_{xx}} & -\frac{\bar{x}_n}{S_{xx}} \\ -\frac{\bar{x}_n}{S_{xx}} & \frac{1}{S_{xx}} \end{pmatrix},\end{aligned}$$

dado que  $\sum_{i=1}^n x_i^2 = S_{xx} + n\bar{x}_n^2$ .

# Observações

Obs5. Sob a suposição de normalidade, tem-se que

$$\hat{\beta} \sim \mathcal{N}_2 \left[ \beta, \sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \right].$$

Obs6. (Teorema de Gauss-Markov) Sob as suposições do MRLS,  $\hat{\beta}$  é o BLUE de  $\beta$ .

A versão **multivariada** do teorema de Gauss-Markov será demonstrada nas próximas aulas.



Obs7. O vetor de valores preditos é dado por

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\beta} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{y},$$

que é uma transformação linear das observações. A matriz  $\mathbf{H} := \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$  é uma matriz simétrica e idempotente, que representa a matriz de projeção ortogonal do subespaço gerado pelas colunas de  $\mathbf{X}$  ( $\mathcal{C}(\mathbf{X})$ ).

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  **$H$**  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  **$H$**  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  **$H$**  “coloca” o chapéu no vetor  **$y$** . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  **$H$** :

- $H^2 = H$  e  $H^\top = H$ .
- $H\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(I_n - H)\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .
- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .
- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .
- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .
- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.
- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .

- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .

- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .

- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .

- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .

- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.

- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .

- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .

- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .

- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .

- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .

- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.

- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .
- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .
- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .
- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .
- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .
- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.
- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .
- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .
- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .
- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .
- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .
- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.
- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.



# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .
- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .
- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .
- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .
- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .
- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.
- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .
- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .
- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .
- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .
- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .
- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.
- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

**Obs7.** (cont.) A matriz  $\mathbf{H}$  também é comumente denominada de matriz **Hat** (chapéu em Inglês), denominação dada pelo J.W. Tukey, se deve ao fato de  $\mathbf{H}$  ser base da transformação linear do vetor dos valores observados no vetor de valores ajustados,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ , ou seja,  $\mathbf{H}$  “coloca” o chapéu no vetor  $\mathbf{y}$ . Ela também é comumente chamada de matriz de predição. Abaixo, seguem algumas propriedades e características da matriz  $\mathbf{H}$ :

- $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\top = \mathbf{H}$ .
- $\mathbf{H}\mathbf{X} = \mathbf{X}$  e  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .
- $\text{Var}[\hat{\mathbf{y}}] = \text{Var}[\mathbf{H}\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{H}\mathbf{H}^\top = \sigma^2 \mathbf{H}^2 = \sigma^2 \mathbf{H}$ .
- $\text{Var}[\hat{y}_i] = \sigma^2 h_{ii}$ , ou seja quanto maior for  $h_{ii}$  maior é a imprecisão na predição de  $y_i$ .
- $\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{y}} = \mathbf{H}$ .
- $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial y_i} = h_{ii}$  que reflete a taxa de variação de  $\hat{y}_i$  quando  $y_i$  varia de forma infinitesimal, ou seja,  $h_{ii}$  reflete a influência de  $y_i$  no seu respectivo valor predito.
- $h_{ii}$  é chamada de alavancagem (*high leverage*) da  $i$ -ésima observação.

# Observações

Dado que  $\mathbf{H}$  é idempotente, obtemos que  $\forall i = 1, \dots, n$

$$h_{ii} = \sum_{j=1}^n h_{ij}^2 = h_{ii}^2 + \sum_{j \neq i} h_{ij}^2$$

$$\Rightarrow h_{ii}(1 - h_{ii}) = \sum_{j \neq i} h_{ij}^2 \geq 0,$$

implicando que  $h_{ii} \in [0, 1]$ ,  $\forall i = 1, \dots, n$ .

No caso do MRLS é possível mostrar que (exercício Lista I)

$$h_{ij} = \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x}_n)(x_j - \bar{x}_n)}{S_{xx}} \right\}, \forall i, j = 1, \dots, n.$$

Outras propriedades e extensões serão apresentadas em formato de exercício. 😊

# Observações

**Obs8.** O vetor de resíduos ordinários é dado por

$$\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{y} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{y},$$

que é uma transformação linear de  $\mathbf{y}$ . Dado que  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})$  é simétrica e idempotente, então sob a suposição de normalidade tem-se

$$\hat{\mathbf{e}} \sim \mathcal{N}_n[\mathbf{0}, \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})],$$

implicando que os resíduos podem não ser **homoscedásticos**. Ademais, como  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})$  é idempotente, então  $\text{posto}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) = \text{tr}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) = n - 2$ , implicando que a mesma é singular. Logo,

$$\hat{\mathbf{e}} \sim \mathcal{N}_n[\mathbf{0}, \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})],$$

é **normal multivariada singular**. 😊 🤖 ⚠️

# Observações

Obs9. Sob normalidade, tem-se que

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim \mathcal{N}_2 \left[ \boldsymbol{\beta}, \sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \right],$$

implicando que  $\forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^2 \neq \mathbf{0}$

$$\mathbf{c}^\top \hat{\boldsymbol{\beta}} \sim \mathcal{N} \left[ \mathbf{c}^\top \boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{c}^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{c} \right].$$

# Observações

## Casos particulares importantes:

i) Se  $\mathbf{c} = (1, 0)^\top$ , então

$$\mathbf{c}^\top \hat{\boldsymbol{\beta}} = \hat{\beta}_0 \sim \mathcal{N} \left[ \beta_0, \sigma^2 \left\{ \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}_n^2}{S_{xx}} \right\} \right].$$

ii) Se  $\mathbf{c} = (0, 1)^\top$ , então

$$\mathbf{c}^\top \hat{\boldsymbol{\beta}} = \hat{\beta}_1 \sim \mathcal{N} \left[ \beta_1, \frac{\sigma^2}{S_{xx}} \right].$$

iii) Se  $\mathbf{c} = (1, x_i)^\top = \mathbf{x}_i$ , então

$$\mathbf{c}^\top \hat{\boldsymbol{\beta}} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i = \hat{\mu}_{x_i} \sim \mathcal{N} \left[ \mu_{x_i}, \sigma^2 \mathbf{x}_i^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i \right],$$

$$\text{em que } \mu_{x_i} = \beta_0 + \beta_1 x_i \text{ e } \mathbf{x}_i^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i = \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x}_n)^2}{S_{xx}} \right\}.$$

# Observações

**Obs10.** Lembrando que  $(I_n - H)$  é uma matriz simétrica e idempotente, então podemos reescrever  $SQ_{Res}$  como

$$\begin{aligned}
 SQ_{Res} &= \sum_{i=1}^n \hat{e}_i^2 = \|\hat{\mathbf{e}}\|^2 = \hat{\mathbf{e}}^\top \hat{\mathbf{e}} \\
 &= ((I_n - H)\mathbf{y})^\top (I_n - H)\mathbf{y} = \mathbf{y}^\top (I_n - H)^\top (I_n - H)\mathbf{y} \\
 &= \mathbf{y}^\top (I_n - H)(I_n - H)\mathbf{y} \\
 &= \mathbf{y}^\top (I_n - H)\mathbf{y},
 \end{aligned}$$

que é uma forma quadrática.

Dado que para posto  $(I - H) = \text{tr}(I - H) = n - 2$  que corresponde aos g.l. da respectiva forma quadrática. Logo, um ENV (na verdade o MINQUE) de  $\sigma^2$  é dado por

$$\hat{\sigma}^2 = QM_{Res} := \frac{SQ_{Res}}{n - 2} = \frac{\mathbf{y}^\top (I_n - H)\mathbf{y}}{n - 2}.$$



# Observações

Obs11. Note que

$$\text{SQT} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - n\bar{y}_n^2.$$

Mas, basta relembrar a **Questão 21 da Lista 0**

$$\bar{y}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n^\top \mathbf{y} = \frac{1}{n} \mathbf{y}^\top \mathbf{1}_n,$$

em que  $\mathbf{1}_n$  representa um vetor ( $n \times 1$ ) com todos elementos iguais a 1. Por outro lado, dado que  $\sum_{i=1}^n y_i^2 = \mathbf{y}^\top \mathbf{y}$ , então podemos reescrever SQT como

$$\begin{aligned} \text{SQT} &= \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - n\bar{y}_n\bar{y}_n = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - n \left( \frac{1}{n} \mathbf{y}^\top \mathbf{1}_n \right) \left( \frac{1}{n} \mathbf{1}_n^\top \mathbf{y} \right) \\ &= \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - \mathbf{y}^\top \frac{\mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^\top}{n} \mathbf{y} = \mathbf{y}^\top \left( \mathbf{I}_n - \frac{\mathbf{J}_n}{n} \right) \mathbf{y}, \end{aligned}$$

em que  $\mathbf{J}_n = \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^\top$  representa uma matriz quadrada de dimensão  $n$  com todos os elementos iguais a 1.

# Observações

Portanto, pelas observações 10 e 11, temos que

$$\begin{aligned}\text{SQReg} &= \text{SQT} - \text{SQRes} \\ &= \mathbf{y}^\top \left( \mathbf{I}_n - \frac{\mathbf{J}_n}{n} \right) \mathbf{y} - \mathbf{y}^\top (\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) \mathbf{y} \\ &= \mathbf{y}^\top \left( \mathbf{H} - \frac{\mathbf{J}_n}{n} \right) \mathbf{y}.\end{aligned}$$