

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

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

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 (2×1) 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 (2×1) 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 (2×1) 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 (2×1) 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 (2×1) 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 σ^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 σ^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 σ^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 χ^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 β 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 β 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 β 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 β , como já havíamos provado de forma marginal.

Por outro lado, a matriz de variâncias-covariâncias do EMQ de β 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 β .

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} ($\mathcal{C}(\mathbf{X})$).