

Quando uma variável resposta y é função de duas ou mais variáveis regressoras $(x_1, x_2, \dots, x_k)$ temos uma REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA.

O modelo estatístico é dado por:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \dots + \beta_k X_{ik} + \varepsilon_i$$

com: $i = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, k$.

Considerando cada variável X_{ij} centrada em sua média $\bar{X}_j$, temos: $x_{ij} = X_{ij} - \bar{X}_j \Rightarrow X_{ij} = x_{ij} + \bar{X}_j$

Desta forma,

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1(x_{i1} + \bar{X}_1) + \beta_2(x_{i2} + \bar{X}_2) + \dots + \beta_k(x_{ik} + \bar{X}_k) + \varepsilon_i$$

$$Y_i = \underbrace{(\beta_0 + \beta_1 \bar{X}_1 + \dots + \beta_k \bar{X}_k)}_{\alpha} + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i$$

Matricialmente, o modelo RLM é dado por:

$$\underset{\sim}{Y} = \underset{\sim}{X} \underset{\sim}{\Theta} + \underset{\sim}{\varepsilon}$$

$\underset{\sim}{Y}$ é um vetor $n \times 1$ da variável aleatória Y .

$$\underset{\sim}{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}_1$$

$\underset{\sim}{X}$ é a matriz $n \times p$ de delineamento, $p = k + 1$

$$\underset{\sim}{X} = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1k} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nk} \end{bmatrix}_{p=k+1}$$

$\underline{\theta}$ é o vetor de parâmetros $p \times 1$, $p = k+1$

$$\underline{\theta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}_1$$

$\underline{\varepsilon}$ é o vetor $n \times 1$ de erros

$$\underline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}_1$$

Suposições:

i) A variável y é uma função LINEAR das k variáveis regressoras;

ii) As variáveis x_j são de natureza fixa;

iii) $E(\varepsilon_i) = 0 \Rightarrow E(\underline{\varepsilon}) = \phi = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}_1$

iv) Erros são homocedásticos e independentes

$$\left. \begin{array}{l} \text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_{i'}) = 0 \end{array} \right\} \text{Var}(\underline{\varepsilon}) = \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma^2 \end{bmatrix}_n = I_n \sigma^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}_n \sigma^2$$

v) Erros têm distribuição Normal

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \Rightarrow \underline{\varepsilon} \sim N(\phi, I\sigma^2)$$

$$y_i \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2) \Rightarrow \underline{y} \sim N(X\underline{\theta}, I\sigma^2)$$

ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS - MMQ ($n > p$)

3

Considerando o modelo: $y = x\theta + \varepsilon$, temos:

$$\tilde{\varepsilon} = y - x\theta \Rightarrow \text{minimizar } \sum_{i=1}^n \varepsilon_i = \tilde{\varepsilon}^T \tilde{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n] \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

$$\tilde{\varepsilon}^T \tilde{\varepsilon} = [y - x\theta]^T [y - x\theta]$$

$$z = [y^T - \theta^T x^T] [y - x\theta]$$

$$z = y^T y - \underbrace{y^T x}_{A^T} \theta - \underbrace{\theta^T x^T y}_A + \underbrace{\theta^T x^T x \theta}_B$$

$$\frac{\partial z}{\partial \theta} = 0$$

$$\hookrightarrow -A - A + 2B\theta = 0 \quad \begin{cases} A = x^T y \\ B = x^T x \end{cases}$$

$$-x^T y - x^T y + 2x^T x \hat{\theta} = 0$$

$$-2x^T y + 2x^T x \hat{\theta} = 0$$

$$x^T x \hat{\theta} = x^T y \quad (\text{SEN})$$

$$\underbrace{(x^T x)^{-1}}_I x^T x \hat{\theta} = \underbrace{(x^T x)^{-1}}_I x^T y$$

$$\boxed{\hat{\theta} = (x^T x)^{-1} x^T y}$$

QUEM SÃO AS MATRIZES ?

Considerando n observações e duas variáveis x_1 e x_2 , temos:

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}_n \quad x = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} \end{bmatrix}_{n \times p=3}$$

$$x^T = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_{11} & \dots & x_{n1} \\ x_{12} & \dots & x_{n2} \end{bmatrix}_{p \times n}$$

$$x^T x = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_{11} & \dots & x_{n1} \\ x_{12} & \dots & x_{n2} \end{bmatrix}_{p \times n} \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} \end{bmatrix}_{n \times p} = \begin{bmatrix} n & \sum x_{1i} & \sum x_{12} \\ \sum x_{1i}^2 & \sum x_{1i} x_{2i} \\ \sum x_{12}^2 & \sum x_{12}^2 \end{bmatrix}_p$$

sim
simétrica

$$\underset{p}{X}^T \underset{n}{y} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_{11} & \dots & x_{n1} \\ x_{12} & \dots & x_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{i1} y_i \\ \sum x_{i2} y_i \end{bmatrix}$$

Considerando o estimador $\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T y$, precisamos da inversa da matriz $X^T X$.

Como calcular as inversas?

- Matriz 2×2

$$Q = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad Q^{-1} = \frac{1}{\det(Q)} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \text{ em que } \det(Q) = ad - bc$$

- Matriz 3×3

$$Q = \begin{bmatrix} a & b & c \\ b & e & f \\ c & f & h \end{bmatrix} \quad Q^{-1} = \begin{bmatrix} A & B & C \\ B & E & F \\ C & F & H \end{bmatrix}$$

em que:

$$\begin{aligned} A &= (eh - f^2)/z & E &= (ah - c^2)/z \\ B &= -(bh - cf)/z & F &= -(af - bc)/z \\ C &= (bf - ce)/z & H &= (ae - b^2)/z \end{aligned}$$

$$z = aeh + 2bce - af^2 - b^2h - c^2e \Rightarrow \det(Q)$$

Vamos verificar as matrizes e cálculos com o RLS!

Considerando o RLS

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \quad i=1, \dots, n$$

$$\underset{\sim}{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad \underset{\sim}{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \quad \underset{\sim}{\theta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} \quad \underset{\sim}{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{X}^T \underset{\sim}{X} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_1 & \dots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \quad \underset{\sim}{X}^T \underset{\sim}{Y} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_1 & \dots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

$$(\underset{\sim}{X}^T \underset{\sim}{X})^{-1} = \frac{1}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{\hat{\theta}} = (\underset{\sim}{X}^T \underset{\sim}{X})^{-1} \underset{\sim}{X}^T \underset{\sim}{Y} = \frac{1}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{\hat{\theta}} = \frac{1}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i \\ -\sum x_i \sum y_i + n \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{\hat{\theta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \\ \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \end{bmatrix}$$

↪ equivalente $\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$

↪ equivalente $\hat{\beta}_1 = \frac{SP_{XY}}{SQ_X}$

Propriedades:

i) Os elementos de $\hat{\theta}$ são combinações lineares dos y_i :

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \Rightarrow \hat{\beta}_j = \sum_{i=1}^n c_{ij} y_i$$

$$\hat{\theta} = \underbrace{(X^T X)^{-1} X^T}_{p \times n} Y$$

$p \times n \Rightarrow$ matriz de coeficientes

$$C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{p1} & c_{p2} & \dots & c_{pn} \end{bmatrix}_n$$

$$\hat{\theta} = C \tilde{Y} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{p1} & c_{p2} & \dots & c_{pn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum c_{1i} y_i \\ \sum c_{2i} y_i \\ \vdots \\ \sum c_{pi} y_i \end{bmatrix}$$

ii) $\hat{\theta}$ é um estimador não viesado para θ .

$$E(A \tilde{Y}) = A E(\tilde{Y})$$

$$E(\hat{\theta}) = E \left[\underbrace{(X^T X)^{-1} X^T}_A \tilde{Y} \right] = (X^T X)^{-1} X^T E(\tilde{Y}) = \underbrace{(X^T X)^{-1} X^T X}_I \theta = \theta$$

iii) A matriz de covariâncias de $\hat{\theta}$ é dada por:

$$\text{Var}(A \tilde{Y}) = A \text{Var}(\tilde{Y}) A^T$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\theta}) &= \text{Var} \left[\underbrace{(X^T X)^{-1} X^T}_A \tilde{Y} \right] = (X^T X)^{-1} X^T \text{Var}(\tilde{Y}) X (X^T X)^{-1} \\ &= (X^T X)^{-1} X^T I \sigma^2 X (X^T X)^{-1} \\ &= \underbrace{(X^T X)^{-1} X^T X}_I (X^T X)^{-1} \sigma^2 \\ &= (X^T X)^{-1} \sigma^2 \end{aligned}$$

Para o modelo RLS, temos:

7

$$\text{Var}[\hat{\theta}] = \frac{1}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix} \cdot \sigma^2$$

$$\underbrace{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}_{(X^T X)^{-1}}$$

$$= \frac{1}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix} \sigma^2$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\sum x_i^2}{n \sum x_i^2} & \frac{-\sum x_i}{n \sum x_i^2} \\ \frac{-\sum x_i}{n \sum x_i^2} & \frac{n}{n \sum x_i^2} \end{bmatrix} \sigma^2$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\sum x_i^2 + n\bar{x}}{n \sum x_i^2} & -\frac{\sum x_i/n}{\sum x_i^2} \\ -\frac{\sum x_i/n}{\sum x_i^2} & \frac{1}{\sum x_i^2} \end{bmatrix} \sigma^2$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}}{\sum x_i^2} & -\frac{\bar{x}}{\sum x_i^2} \\ -\frac{\bar{x}}{\sum x_i^2} & \frac{1}{\sum x_i^2} \end{bmatrix} \sigma^2$$

$\text{Var}(\hat{\beta}_0)$ points to $\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}}{\sum x_i^2}$
 $\text{Cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ points to $-\frac{\bar{x}}{\sum x_i^2}$
 $\text{Var}(\hat{\beta}_1)$ points to $\frac{1}{\sum x_i^2}$

$$\begin{aligned}
 (*) \sum x_i^2 &= \sum x_i^2 - \frac{2(\sum x_i)^2}{n} + \frac{2(\sum x_i)^2}{n} \\
 &= \sum x_i^2 - 2\bar{x}(\sum x_i) + 2\bar{x}(\sum x_i) \cdot \frac{n}{n} \\
 &= \sum x_i^2 - 2\bar{x}(\sum x_i) + 2n\bar{x}^2 \\
 &= \underbrace{\sum x_i^2 - 2\bar{x}(\sum x_i) + n\bar{x}}_{\sum (x_i - \bar{x})^2} + n\bar{x} \\
 &= \sum (x_i - \bar{x})^2 + n\bar{x} \\
 &= \sum x_i^2 + n\bar{x}
 \end{aligned}$$

Vimos que:

$$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}}{\sum x_i^2} \right) \sigma^2$$

$$\text{Var}(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{\sum x_i^2}$$

$$\text{Cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = -\frac{\bar{x}\sigma^2}{\sum x_i^2}$$

iv) Como resultado dos itens i, ii e iii e que $\underline{y} \sim N(\underline{x}\underline{\theta}, \underline{I}\sigma^2)$ 8

temos que: $\hat{\underline{\theta}} \sim N(\underline{\theta}, (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \sigma^2)$

v) Dada uma combinação linear dos parâmetros

$$\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}} = [c_0 \ c_1 \ \dots \ c_k] \begin{bmatrix} \theta_0 \\ \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_k \end{bmatrix} = c_0 \theta_0 + c_1 \theta_1 + \dots + c_k \theta_k$$

Um estimador de mínimos quadrados, não viesado e de variância mínima é dado por: $\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}}$

$$E(\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}}) = \underline{c}^T E(\hat{\underline{\theta}}) = \underline{c}^T \underline{\theta}$$

$$\text{Var}(\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}}) = \underline{c}^T \text{Var}(\hat{\underline{\theta}}) \underline{c} = \underline{c}^T \underline{I} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{c} \sigma^2$$

Desta forma, $\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}} \sim N(\underline{c}^T \underline{\theta}, \underline{c}^T (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{c} \sigma^2)$

vi) A aproximação de mínimos quadrados ($\hat{\underline{y}}$) para $\underline{y}$ é dada por:

$$\hat{\underline{y}} = \underline{x} \hat{\underline{\theta}} = \underline{x} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T \underline{y} = \underline{H} \underline{y}$$

Hat matrix (matriz de projeção)

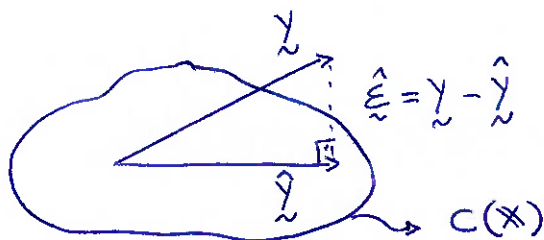
$$E(\hat{\underline{y}}) = E(\underline{H} \underline{y}) = \underline{H} E(\underline{y}) = \underline{H} \underline{x} \underline{\theta} = \underline{x} \underbrace{(\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T \underline{x}}_{\underline{I}} \underline{\theta} = \underline{x} \underline{\theta} = \underline{y}$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\underline{y}}) &= \text{Var}(\underline{H} \underline{y}) = \underline{H} \text{Var}(\underline{y}) \underline{H}^T \\ &= \underline{x} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T \underline{I} \sigma^2 \underline{x} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T \\ &= \underline{x} \underbrace{(\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T \underline{x} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T}_{\underline{I}} \sigma^2 \\ &= \underbrace{\underline{x} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T}_{\underline{H}} \sigma^2 = \underline{H} \sigma^2 \end{aligned}$$

$$\hat{\underline{y}} \sim N(\underline{y}, \underline{H} \sigma^2) \Rightarrow \hat{\underline{y}} \sim N(\underline{x} \underline{\theta}, \underline{x} (\underline{x}^T \underline{x})^{-1} \underline{x}^T \sigma^2)$$

Relembrando!

A matriz $H = X(X^T X)^{-1} X^T$ é o projetor ortogonal de $\underline{y}$ no espaço coluna de $X \Rightarrow C(X)$.



Pelo teorema de Pitágoras, temos:

$$\|\underline{y}\|^2 = \|\hat{\underline{y}}\|^2 + \|\hat{\underline{\epsilon}}\|^2$$

* O vetor de observações $\underline{y}$, pode ser decomposto na soma de dois vetores ortogonais

↳ o vetor $\hat{\underline{y}}$ do espaço de estimação;

↳ o vetor $\hat{\underline{\epsilon}}$ do espaço residual.

Essa decomposição é o fundamento da análise de variância.

Considerando a decomposição,

$$\|\underline{y}\|^2 = \|\hat{\underline{y}}\|^2 + \|\hat{\underline{\epsilon}}\|^2, \text{ temos:}$$

$$\|\underline{y}\|^2 = \underline{y}^T \underline{y}$$

$$\|\hat{\underline{y}}\|^2 = \|\underline{X}\hat{\underline{\theta}}\|^2 = (\underline{X}\hat{\underline{\theta}})^T (\underline{X}\hat{\underline{\theta}})$$

$$\|\hat{\underline{\epsilon}}\|^2 = \|\underline{y} - \underline{X}\hat{\underline{\theta}}\|^2 = (\underline{y} - \underline{X}\hat{\underline{\theta}})^T (\underline{y} - \underline{X}\hat{\underline{\theta}})$$

Desta forma,

$$\begin{aligned} \underline{y}^T \underline{y} &= (\underline{X}\hat{\underline{\theta}})^T (\underline{X}\hat{\underline{\theta}}) + (\underline{y} - \underline{X}\hat{\underline{\theta}})^T (\underline{y} - \underline{X}\hat{\underline{\theta}}) \\ &= (\hat{\underline{\theta}}^T \underline{X}^T) (\underline{X}\hat{\underline{\theta}}) + (\underline{y}^T - \hat{\underline{\theta}}^T \underline{X}^T) (\underline{y} - \underline{X}\hat{\underline{\theta}}) \\ &= \hat{\underline{\theta}}^T \underline{X}^T \underline{X} \hat{\underline{\theta}} + \underline{y}^T \underline{y} - \underline{y}^T \underline{X} \hat{\underline{\theta}} - \hat{\underline{\theta}}^T \underline{X}^T \underline{y} + \hat{\underline{\theta}}^T \underline{X}^T \underline{X} \hat{\underline{\theta}} \end{aligned}$$

Usando o resultado do SEN $\underline{X}^T \underline{X} \hat{\underline{\theta}} = \underline{X}^T \underline{y}$, teremos:

$$\tilde{Y}^T \tilde{Y} = \hat{\theta}^T X^T \tilde{Y} + \tilde{Y}^T \tilde{Y} - \tilde{Y}^T X \hat{\theta} - \cancel{\hat{\theta}^T X^T \tilde{Y}} + \cancel{\hat{\theta}^T X^T \tilde{Y}}$$

$$\tilde{Y}^T \tilde{Y} = \hat{\theta}^T X^T \tilde{Y} + (\tilde{Y}^T \tilde{Y} - \tilde{Y}^T X \hat{\theta})$$

$\downarrow$ $\rightarrow$ SQ Parâmetros $\rightarrow$ SQ Resíduos

SQ Total (não corrigida)

OBS: $SQ_{Total} = \sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{n}$

$\downarrow$ $\rightarrow$ correção

$SQ_{Total}(NCorr)$ $\rightarrow$ está embutida na SQ Parâmetros *

$SQ_{Parâmetros} = SQ_{Regressão} + Correção$ * veja a seguir

ou seja,

$$SQ_{Total}(NC) = SQ_{Parâmetros} + SQ_{Resíduos}$$

ou

$$SQ_{Total} = SQ_{Regressão} + SQ_{Resíduos}$$

* Considerando a RLS com variável X centrada

$$y_i = \alpha + \beta_1 (x_i - \bar{x}) + \epsilon_i$$

$\hookrightarrow x_i$

$$SQ_{Param} = \hat{\theta}^T X^T \tilde{Y} = \begin{bmatrix} \hat{\alpha} & \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

$$\hat{\alpha} = \bar{y}$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}$$

$$\begin{aligned}
 &= \hat{\alpha} \sum y_i + \hat{\beta}_1 \sum x_i y_i \\
 &= \frac{\sum y_i}{n} \sum y_i + \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2} \sum x_i y_i \\
 &= \frac{(\sum y_i)^2}{n} + \frac{(\sum x_i y_i)^2}{\sum x_i^2}
 \end{aligned}$$

$\downarrow$ $\downarrow$
 correção + $SQ_{Regressão}$

$$\begin{aligned}
 SQ_{Total}(NC) &= SQ_{Param} + SQ_{Resíduos} \\
 SQ_{Total}(NC) &= Correção + SQ_{Reg} + SQ_{Resíduos} \\
 SQ_{Total}(NC) - Correção &= SQ_{Reg} + SQ_{Resíduos} \\
 SQ_{Total} &= SQ_{Regressão} + SQ_{Resíduos}
 \end{aligned}$$

NÚMERO DE GRAUS DE LIBERDADE

1) número de graus de liberdade associados à uma SQ é dado pela característica da matriz idempotente de sua forma quadrática.

$SQ \Rightarrow \tilde{Y}^T A \tilde{Y}$ sendo A uma matriz idempotente ($A^2 = A$) então, o traço (A) = gl da SQ.

- O traço de uma matriz corresponde a soma dos elementos de sua diagonal principal.

- propriedades do traço:

$$\text{tr}(A) = \text{tr}(A^T)$$

$$\text{tr}(A+B) = \text{tr}(A) + \text{tr}(B)$$

$$\text{tr}(cA) = c \text{tr}(A)$$

$$\text{tr}(A \cdot B) = \text{tr}(B \cdot A)$$

SQ Total (NC)

$$SQ_{\text{Total}}(NC) = \tilde{Y}^T \tilde{Y} = \tilde{Y}^T I \tilde{Y} \Rightarrow \text{FORMA QUADRÁTICA}$$

↳ É IDEMPOTENTE?

$$I \cdot I = I \quad \text{sim.}$$

Então, $\text{tr}(I) = n$ é o grau de liberdade associado à $SQ_{\text{Total}}(NC)$

Correcção

$$C = \frac{(\sum y_i)^2}{n}$$

$$C = [y_1 \dots y_n] \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{n}$$

$\downarrow$ $\tilde{1}$ $\downarrow$ $\tilde{1}^T$
 $\tilde{1}$

$$C = \underbrace{\tilde{Y}^T \tilde{1} \tilde{1}^T \tilde{Y}}_{\tilde{J}} \cdot \frac{1}{n} = \tilde{Y}^T \tilde{J} \tilde{Y} \cdot \frac{1}{n}$$

$$\tilde{J} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}_n$$

Desta forma,

$$SQ_{Total} = \tilde{y}^T \tilde{y} - \tilde{y}^T \tilde{J} \tilde{y} \frac{1}{n}$$

$$= \tilde{y}^T \tilde{I} \tilde{y} - \tilde{y}^T \tilde{J} \tilde{y} \cdot \frac{1}{n}$$

$$= \tilde{y}^T \left[\tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} \right] \tilde{y} \Rightarrow \text{FORMA QUAD.}$$

É IDEMPOTENTE?

$$\left[\tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} \right] \left[\tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} \right] = \tilde{I} \tilde{I} - \tilde{I} \frac{1}{n} \tilde{J} - \frac{1}{n} \tilde{J} \tilde{I} + \frac{1}{n^2} \tilde{J} \tilde{J}$$

$$= \tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} - \frac{1}{n} \tilde{J} + \frac{\cancel{XJ}}{n^2}$$

$$= \tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} \cancel{2} - \frac{1}{n} \tilde{J} + \frac{\tilde{J}}{n}$$

$$= \tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} \rightarrow \text{idempotente}$$

$$* \tilde{J} \tilde{J} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}_n \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} n & \dots & n \\ \vdots & & \vdots \\ n & \dots & n \end{bmatrix}_n$$

$$= n \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} = n \tilde{J}$$

$$\text{Então } \text{tr} \left(\tilde{I} - \frac{1}{n} \tilde{J} \right) = \text{tr}(\tilde{I}) - \text{tr} \left(\frac{1}{n} \tilde{J} \right)$$

$$= \text{tr}(\tilde{I}) - \frac{1}{n} \text{tr}(\tilde{J})$$

$$= n - \frac{1}{n} \cdot n = n - 1 \text{ gl associado à } \underline{SQ_{Total}}$$

SQ Regressão

$$SQ_{Reg} = SQ_{Param} - C$$

$$= \hat{\theta}^T X^T \tilde{y} - \frac{1}{n} \tilde{y}^T \tilde{J} \tilde{y}$$

$$= [(X^T X)^{-1} X^T \tilde{y}]^T X^T \tilde{y} - \frac{1}{n} \tilde{y}^T \tilde{J} \tilde{y}$$

$$= \tilde{y}^T \underbrace{X^T (X^T X)^{-1} X^T}_H \tilde{y} - \frac{1}{n} \tilde{y}^T \tilde{J} \tilde{y}$$

$$= \tilde{y}^T H \tilde{y} - \frac{1}{n} \tilde{y}^T \tilde{J} \tilde{y}$$

$$= \tilde{y}^T \left[H - \frac{1}{n} \tilde{J} \right] \tilde{y}$$

É IDEMPOTENTE?

$$\left[H - \frac{1}{n} \tilde{J} \right] \left[H - \frac{1}{n} \tilde{J} \right] =$$

$$= HH - H \frac{1}{n} \tilde{J} - \frac{1}{n} \tilde{J} H + \frac{1}{n^2} \tilde{J} \tilde{J}$$

OBS:

$$H \tilde{J} = \tilde{J} H = \tilde{J}$$

$$H^2 = H$$

$$\tilde{J} \tilde{J} = n \tilde{J}$$

$$= H - \frac{1}{n} \tilde{J} - \frac{1}{n} \tilde{J} + \frac{\cancel{XJ}}{n^2}$$

$$= H - \frac{1}{n} \tilde{J} - \frac{1}{n} \tilde{J} + \frac{1}{n} \tilde{J}$$

$$= H - \frac{1}{n} \tilde{J}$$

↳ IDEMPOTENTE!

$$\begin{aligned}
 \text{Então, } \text{tr}\left(H - \frac{1}{n}J\right) &= \text{tr}(H) - \frac{1}{n} \text{tr}(J) \\
 &= \text{tr}\left(\underbrace{X(X^T X)^{-1} X^T}_A - \frac{1}{n} \text{tr}(J)\right) \\
 &\quad \times \text{tr}(AB) = \text{tr}(BA) \text{ ver propriedades} \\
 &= \text{tr}\left(\underbrace{X^T X (X^T X)^{-1}}_{I_P} - \frac{1}{n} \text{tr}(J)\right) \\
 &= \text{tr}(I) - \frac{1}{n} \text{tr}(J) \\
 &= p - \frac{1}{n} n = p - 1 \parallel \text{gl associado à SQ Reg}
 \end{aligned}$$

SQ Resíduo

$$\begin{aligned}
 \text{SQ Resíduo} &= \text{SQ Total} - \text{SQ Reg} \\
 &= \text{SQ Total (NC)} - \text{SQ Param} \\
 &= \tilde{y}^T I \tilde{y} - \tilde{y}^T H \tilde{y} \\
 &= \tilde{y}^T [I - H] \tilde{y}
 \end{aligned}$$

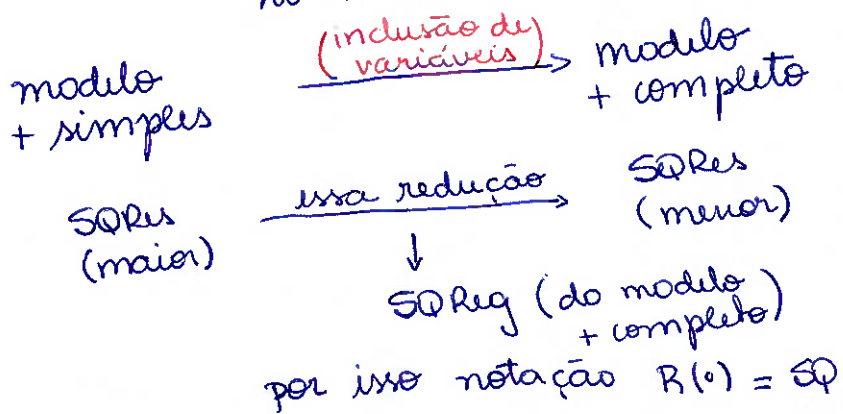
↳ É IDEMPOTENTE?

$$\begin{aligned}
 [I - H][I - H] &= II - IH - HI + HH \\
 &= I - H - H + H \\
 &= I - H \rightarrow \text{IDEMPOTENTE!}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Então, } \text{tr}(I - H) &= \text{tr}(I) - \text{tr}(H) \\
 &= n - p \parallel \text{gl associado à SQ Resíduo}
 \end{aligned}$$

TABELA ANAVA e TESTE F

SQ Regressão $\Rightarrow$ o quanto reduz a SQ Resíduo quando incluímos um parâmetro (ou variável) no modelo.



Vamos considerar 3 modelos

$$M1: Y_i = \beta_0 + \epsilon_i$$

$R(\beta_0)$ = Soma Quadrado de parâmetros do M1

$$M2: Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i$$

$R(\beta_0, \beta_1)$ = SQ Parâmetros do M2

$$M3: Y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \epsilon_i$$

$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2)$ = SQ Parâmetros do M3

Vimos que:

$$SQ_{Total}(NC) = SQ_{Parâmetros} + SQ_{Resíduos}$$

$\sum y_i^2 \rightarrow$ é sempre a mesma

quanto maior o número de parâmetros no modelo
 $\uparrow SQ_{Param}$ e $\downarrow SQ_{Res}$

Logo, a SQ_{Reg} (considerando $M1 \rightarrow M2$) é dada por

$$\begin{aligned} R(\beta_1 | \beta_0) &= R(\beta_0, \beta_1) - R(\beta_0) \\ &= SQ_{Param}(M2) - SQ_{Param}(M1) \\ &= [SQ_{Total}(NC) - SQ_{Res}(M2)] - [SQ_{Total}(NC) - SQ_{Res}(M1)] \\ &= \cancel{SQ_{Total}(NC)} - SQ_{Res}(M2) - \cancel{SQ_{Total}(NC)} + SQ_{Res}(M1) \\ &= SQ_{Res}(M1) - SQ_{Res}(M2) \end{aligned}$$

* A $SQ_{Regressão}$, ao considerar o M2, equivale à redução na $SQ_{Resíduos}$ devido a inclusão do parâmetro β_1 no modelo $Y_i = \beta_0 + \epsilon_i$ (com apenas β_0)

A SQ_{Reg} (considerando $M2 \rightarrow M3$) é dada por:

$$\begin{aligned} R(\beta_2 | \beta_0, \beta_1) &= R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) - R(\beta_0, \beta_1) \\ &= SQ_{Param}(M3) - SQ_{Param}(M2) \\ &= [SQ_{Total}(NC) - SQ_{Res}(M3)] - [SQ_{Total}(NC) - SQ_{Res}(M2)] \\ &= SQ_{Res}(M2) - SQ_{Res}(M3) \end{aligned}$$

* A SQ_{Reg} , ao considerar o M3, equivale à redução na $SQ_{Resíduos}$ devido a inclusão do parâmetro β_2 no modelo $Y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i$

Análise de Variância SEQUENCIAL

15

Nessa análise os parâmetros vão sendo adicionados sequencialmente.

Considerando uma variável resposta Y e duas variáveis regressoras (X_1 e X_2), temos o seguinte esquema de ANAVA.

FV	GL	SQ	QM	Fc
Parâmetros	$p = 3$	$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2)$	QM_{Par}	$F_{par} = \frac{QM_{Par}}{QM_{Res}}$
β_0	1	$R(\beta_0) = C$	—	
$\beta_1 \beta_0$	1	$R(\beta_0, \beta_1) - R(\beta_0)$	QM_1	$F_1 = QM_1 / QM_{Res}$
$\beta_2 \beta_0, \beta_1$	1	$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) - R(\beta_0, \beta_1)$	QM_2	$F_2 = QM_2 / QM_{Res}$
Resíduos	$n - p = n - 3$	per diferença	QM_{Res}	
Total (Nc)	n	$SD_{Total(Nc)} = Y^T Y$		

Em F_{par} , temos:

$$H_0: \beta_0 = \beta_1 = \beta_2 = 0 \quad \text{vs} \quad H_a: \beta_j \neq 0, \text{ para pelo menos } 1 j.$$

Em F_1 , temos

$$H_0: \beta_1 = 0 \quad \text{vs} \quad H_a: \beta_1 \neq 0$$

(ignorando a presença da X_2)

Em F_2 , temos:

$$H_0: \beta_2 = 0 \quad \text{vs} \quad H_a: \beta_2 \neq 0$$

(ajustado para X_1)

Muito importante $\Rightarrow$ depende da ordem da variável no modelo

Considerando as Somas de Quadrados "Corrigidas"

16

FV	GL	SQ	QM	Fc
Regressão ↳ Par - C	$p-1 = 2$	$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) - R(\beta_0)$	QM_{Reg}	F_{Reg}
$\beta_1 \beta_0$	1	$R(\beta_0, \beta_1) - R(\beta_0)$	QM_1	F_1
$\beta_2 \beta_0, \beta_1$	1	$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) - R(\beta_0, \beta_1)$	QM_2	F_2
Resíduos	$n-p = n-3$	por diferença	QM_{Res}	—
Total	$n-1$	$\underline{X^T Y} - C$ ↳ $R(\beta_0)$	—	—

Em F_{Reg} , temos:

$$H_0: \beta_1 = \beta_2 = 0 \quad \text{vs} \quad H_a: \beta_1 \text{ ou } \beta_2 \neq 0$$

Em F_1 e F_2 não há alterações (Tabela anterior)

Análise de Variância PARCIAL

Nessa análise verifica-se a contribuição de cada variável, dado que todas as outras já estão no modelo.

$$R(\beta_k | \beta_0, \dots, \beta_{k-1}, \beta_{k+1}, \dots, \beta_m) = \frac{\hat{\beta}_{kk}^2}{(X_{kk}^T X)^{-1}}$$

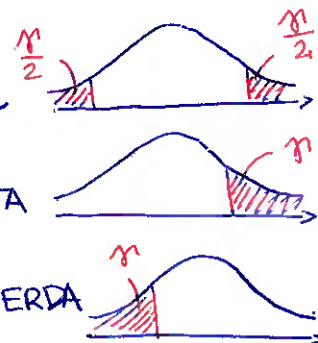
TESTE DE HIPÓTESES

Seja, $c^T \theta$ uma combinação linear dos parâmetros e seu estimador $\hat{c^T \theta}$. Então,

$$\hat{c^T \theta} \sim N(c^T \theta; c^T (X^T X)^{-1} c \sigma^2)$$

Hipóteses como:

$$H_0: c^T \theta = c^T \theta_0 \quad \text{vs} \quad \begin{cases} H_a: c^T \theta \neq c^T \theta_0 \rightarrow \text{BILATERAL} \\ \text{ou} \\ H_a: c^T \theta > c^T \theta_0 \rightarrow \text{UNI. DIREITA} \\ \text{ou} \\ H_a: c^T \theta < c^T \theta_0 \rightarrow \text{UNI. ESQUERDA} \end{cases}$$



Podem ser testadas com a estatística:

$$t_c = \frac{\hat{c^T \theta} - c^T \theta_0}{\sqrt{\hat{\text{var}}(\hat{c^T \theta})}} = \frac{\hat{c^T \theta} - c^T \theta_0}{\sqrt{c^T (X^T X)^{-1} c \cdot QM_{Res}}} \sim t_{n-p}$$

$\underbrace{\quad}_{\text{gl resíduos}}$

Agora, considere o teste da seguinte hipótese

$$H_0: \beta_{m+1} = \beta_{m+2} = \dots = \beta_K = 0$$

Sob H_0 , o modelo reduzido é dado por:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 W_{i1} + \dots + \beta_m W_{im} + \varepsilon_i$$

$$\text{Matricialmente, } \underset{\substack{\downarrow \\ n \times 1}}{\tilde{Y}} = \underset{\substack{\downarrow \\ n \times q}}{W_n} \underset{\substack{\downarrow \\ q \times 1}}{\tilde{\theta}_n} + \underset{\substack{\downarrow \\ n \times 1}}{\varepsilon_n}$$

$q = m+1$ parâmetros

$$\boxed{q < p}$$

Pelo método dos mínimos quadrados, temos:

$$\hat{\tilde{\theta}}_n = (W_n^T W_n)^{-1} W_n^T \tilde{Y}$$

$$SQ_{Total}(NC) = \tilde{Y}^T \tilde{Y} \quad (n \text{ gl})$$

$$\hat{\tilde{Y}}_n = W_n \hat{\tilde{\theta}}_n$$

$$SQ_{Par_n} = \hat{\tilde{\theta}}_n^T W_n^T \tilde{Y} \quad (q \text{ gl} \Rightarrow q = m+1)$$

$$SQ_{Res_n} = SQ_{Total}(NC) - SQ_{Par_n} \quad (n-q)$$

Logo, quando passamos do modelo reduzido (q parâmetros) para o modelo completo (p parâmetros) há uma redução na Soma de Quadrados de Resíduos, dada por:

$$\begin{aligned} R(\beta_{m+1}, \beta_{m+2}, \dots, \beta_K | \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m) &= R(\beta_0, \dots, \beta_K) - R(\beta_0, \dots, \beta_m) \\ &= SQ_{Par_c} - SQ_{Par_n} \\ &= SQ_{Res_n} - SQ_{Res_c} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} R(\beta_{m+1}, \beta_{m+2}, \dots, \beta_K | \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m) &= R(\beta_0, \dots, \beta_K) - R(\beta_0, \dots, \beta_m) \\ &= SQ_{Par_c} - SQ_{Par_n} \\ &= SQ_{Res_n} - SQ_{Res_c} \end{aligned}} \right\} (p-q \text{ gl})$$

Temos ainda que:

$$F = \frac{\frac{SQ_{Res_n} - SQ_{Res_c}}{p-q}}{QM_{Res_c}} \sim F_{p-q, n-p; p} \text{ e rejeita-se a hipótese } H_0 \text{ com um nível } 100\pi\% \text{ de significância se } F > F_{p-q, n-p; p}$$

VER OS DEMAIS EXEMPLOS NA APOSTILA.