

# Introdução aos modelos de regressão múltipla e análise de dados: parte 1

Prof. Caio Azevedo

# Notação matricial para o MNL

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\xi}$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}, \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}$$

- Suposição:  $\boldsymbol{\xi} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$  (vetor de erros).
- O índice  $n$  da variável resposta é geral e pode representar combinações de índices.
- Se a primeira coluna da matriz  $\mathbf{X}$  (matriz de planejamento) for um vetor de 1's temos um modelo com intercepto.

# Continuação

- $\mathbf{X}$  é a matriz de plajenamento (ou delineamento) que define a parte sistemática do modelo (conhecida e não aleatória).
- $\mathbf{Y}$  é o vetor associado à variável resposta. Assim, temos que  $\mathbf{Y} \sim N_n(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}_n)$  (vamos denotar  $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$  e  $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2\mathbf{I}_n$ ).
- Depois dos dados coletados teremos um conjunto  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$  de observações.

# Exemplo 1

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_{124} \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{124} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_{124} \end{bmatrix}$$

## Exemplo 2

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_{11} \\ \vdots \\ Y_{1(26)} \\ Y_{21} \\ \vdots \\ Y_{2(26)} \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & (x_{11} - \bar{x}) & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & (x_{1(26)} - \bar{x}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & (x_{21} - \bar{x}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & (x_{2(26)} - \bar{x}) \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_{01} \\ \beta_{11} \\ \beta_{02} \\ \beta_{12} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_{11} \\ \vdots \\ \xi_{1(26)} \\ \xi_{21} \\ \vdots \\ \xi_{2(26)} \end{bmatrix}$$

## Exemplo 3

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_{20} \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{20} & x_{20}^2 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_{20} \end{bmatrix}$$

# Estimação dos parâmetros

- Estimador usual para  $\beta$ : mínimos quadrados ordinários (MQO).
- Objetivo: obter  $\beta$  que minimiza  $Q(\beta) = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta)'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta)$ . Em geral,  $\beta \in \mathcal{R}^p$ . Assim, para efetuar a minimização, podemos resolver o sistema de equações definido por  $\frac{\partial Q(\beta)}{\partial \beta}$  (chamada de equações normais).
- Logo, temos que resolver o seguinte sistema:

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

- Por outro lado, temos que:

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} (\mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}'\mathbf{X}\beta + \beta'\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta) = -2\mathbf{X}'\mathbf{Y} + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta \\ \rightarrow \left. \frac{\partial Q(\beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=\hat{\beta}} &= \mathbf{0} \rightarrow -2\mathbf{X}'\mathbf{Y} + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\beta} = \mathbf{0} \quad (1) \\ \rightarrow \hat{\beta} &= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{Y}\end{aligned}$$

desde que  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$  seja inversível. Como  $n \gg \gg p$ , tal inversibilidade ocorrerá se, e somente se, a matriz  $\mathbf{X}$  tiver posto coluna completo.

- Isto, por sua vez, ocorre quando o modelo está identificado (não está superparametrizado) e/ou quando não há covariáveis que sejam combinações lineares de outras.



- O sistema de equações definido por (1) é consistente, ou seja, apresenta pelo menos uma solução.
- A justificativa não formal para isso é relativamente simples:
  - Se  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$  for inversível ( $\text{rank}(\mathbf{X}) = p$ ), a solução única.
  - Se  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$  for não inversível ( $\text{rank}(\mathbf{X}) < p$ ), podemos considerar alguma inversa generalizada de  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ . Neste caso, o sistema pode apresentar infinitas soluções e as funções estimáveis passam a ter uma importância maior do que os parâmetros isoladamente.
  - No último caso, uma solução é dada por  $\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-} \mathbf{X}'\mathbf{Y}$ .
- Em geral, vamos trabalhar com modelos em que a solução é única.

# Propriedades do Estimador de MQO (exercício)

- Uma vez que  $\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{Y}$ ,  $\mathbf{Y} \sim N_n(\mathbf{X}\beta, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$  e pelas propriedades associados à vetores aleatórios e a distribuição normal multivariada, temos que:
  - $\mathcal{E}(\hat{\beta}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathcal{E}(\mathbf{Y}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{X}\beta = \beta$ . (não viciado).
  - $Cov(\hat{\beta}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'Cov(\mathbf{Y})\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ .
  - $\hat{\beta} \sim N_p(\beta, \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1})$  (normalidade).
  - $\hat{\beta}_j \sim N_p(\beta_j, \sigma^2 \psi_j)$ ,  $\psi_j$  é o j-ésimo elemento da diagonal principal da matriz  $\mathbf{X}'\mathbf{X}^{-1}$ .
- Observação: sob a suposição de normalidade, o estimador de MQO coincide com o estimador de MV (máxima verossimilhança).

# Distribuição de formas quadráticas normais

- Seja  $\mathbf{Z} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ . Dizemos, então, que  $Y = \mathbf{Z}'\mathbf{A}\mathbf{Z}$  é uma forma quadrática (escalar) normal. Em geral,  $\mathbf{A}$  é uma matriz não aleatória, simétrica e real. Em todos os resultados apresentados no curso, consideraremos que a matriz  $\mathbf{A}$  é não aleatória e real (eventualmente a suposição de simetria pode ser relaxada).
- Pode-se provar, por exemplo, que:

$$Y = (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}) \sim \chi_{(p)}^2 \quad (2)$$

- Vamos demonstrar a validade do resultado dado pela equação (2).
- Por simplicidade, admita que  $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ .

- Assim, temos que :

$$\begin{aligned}
 M_Y(t) &= \mathcal{E}(e^{Yt}) = \int_{\mathcal{R}^p} e^{ty} f_Z(z) dz \\
 &= \int_{\mathcal{R}} \int_{\mathcal{R}} \dots \int_{\mathcal{R}} e^{tz' \Sigma^{-1} z} |\Sigma|^{-1/2} (2\pi)^{-p/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} z' \Sigma^{-1} z \right\} dz \\
 &= \int_{\mathcal{R}} \int_{\mathcal{R}} \dots \int_{\mathcal{R}} |\Sigma|^{-1/2} (2\pi)^{-p/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} z' \Sigma^{-1} z (1 - 2t) \right\} dz
 \end{aligned}$$

- Considerando a mesma transformação anteriormente utilizada ( $\Psi^{-1} \mathbf{w} = \mathbf{z}$ ), em que  $\Sigma = \Psi \Psi'$ , temos que:

$$\begin{aligned}
 M_Y(t) &= \prod_{i=1}^p \int_{\mathcal{R}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} w_i^2 (1 - 2t) \right\}}_{N(0, (1-2t)^{-1})} dw_i \\
 &= (1 - 2t)^{-p/2}
 \end{aligned}$$

- A qual corresponde à fgm de uma distribuição  $\chi^2(p)$

# Distribuição t de Student não-central

- Defina  $T = \frac{Z+\mu}{\sqrt{V/\nu}}$ , em que  $Z \perp V$ ,  $Z \sim N(0, 1)$  e  $V \sim \chi_\nu^2$ . Dizemos que T tem distribuição t de student não central, com  $\nu$  graus de liberdade e parâmetro de não centralidade  $\mu$ .
- Uma forma de se apresentar a densidade é:

$$f_T(t) = \frac{\nu^\nu/2 e^{-\frac{\nu\mu^2}{2(t^2+\nu)}}}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu/2)2^{\frac{\nu-1}{2}}(t^2 + \nu)^{(\nu+1)/2}} \times \left( \int_0^\infty y^\nu \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left( y - \frac{\mu t}{\sqrt{t^2 + \nu}} \right)^2 \right\} dy \right) \mathbb{1}_{(-\infty, \infty)}(t)$$

# Distribuição qui-quadrado não central

- Sejam  $X_1, X_2, \dots, X_n \stackrel{ind}{\sim} N(\mu_i, \sigma_i^2)$ .
- Defina  $Y = \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i}{\sigma_i}\right)^2$ . Dizemos então que  $Y$  tem distribuição qui-quadrado não central com  $n$  graus de liberdade e parâmetro de não-centralidade  $\delta = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mu_i}{\sigma_i}\right)^2$
- Notação  $Y \sim \chi_{(n,\delta)}^2$ , cuja fdp é dada por

$$f_Y(y) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{-\delta/2} (\delta/2)^i}{i!} f_{W_{n+2i}}(y) \mathbb{1}_{(0,\infty)}(y),$$

em que  $W_{n+2i} \sim \chi_{(n+2i)}^2$

- Se  $\delta = 0$ , então  $Y \sim \chi_{(n)}^2$ .

# Distribuição F não central

- Seja  $V$  uma outra v.a., independente de  $Y$ ,  $V \sim \chi^2_{(m)}$ .
- Defina  $F = \frac{Y/n}{V/m}$ . Então,  $F$  tem distribuição F não central com graus de liberdade,  $n$  e  $m$  e parâmetro de não centralidade  $\delta$ .
- Notação  $F \sim \chi^2_{(n,m,\delta)}$ , cuja fdp é dada por

$$f_F(f) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{-\delta/2}(\delta/2)^i}{\beta(m/2, n/2 + i)i!} \left(\frac{n}{m}\right)^{n/2+i} \left(\frac{m}{m+nf}\right)^{(n+m)/2+i} \\ \times f^{n/2-1+i} \mathbb{1}_{(0,\infty)}(f)$$

em que  $\beta(a, b) = \int_0^1 x^{a-1}(1-x)^{b-1} dx$

# Principais teoremas de formas quadráticas normais

- Seja  $\mathbf{Y} \sim N_p(\mathbf{0}, \mathbf{I})$  e  $\mathbf{A}$  uma matriz simétrica e não-aleatória. Então

$$\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} \sim \chi^2_{[r(\mathbf{A})]}$$

se, e somente se  $\mathbf{A}$  for idempotente, em que  $r(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{A})$ .

- Seja  $\mathbf{Y} \sim N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$  e  $\mathbf{A}$  uma matriz simétrica e não-aleatória. Então

$$\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} \sim \chi^2_{[r(\mathbf{A})]}$$

se, e somente se  $\mathbf{A}\Sigma$  for idempotente.



## Cont.

- Seja  $\mathbf{Y} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{I})$  e  $\mathbf{A}$  uma matriz simétrica e não-aleatória. Então

$$\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} \sim \chi^2_{[r(\mathbf{A}), \delta = \boldsymbol{\mu}'\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}]}$$

se, e somente se  $\mathbf{A}$  for idempotente.

- Seja  $\mathbf{Y} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$  e  $\mathbf{A}$  uma matriz simétrica e não-aleatória. Então

$$\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} \sim \chi^2_{[r(\mathbf{A}), \delta = \boldsymbol{\mu}'\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}]}$$

se, e somente se  $\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}$  for idempotente.

- Naturalmente, se  $\delta = \boldsymbol{\mu}'\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} = 0$ , as distribuições passam a ser qui-quadrados centrais.

## Cont.

- Seja  $\mathbf{Y} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$  e  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  matrizes não-aleatórias. Então  $\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$  e  $\mathbf{B}\mathbf{Y}$  são independentes se, e somente se  $\mathbf{B}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A} = \mathbf{0}$ .
- Seja  $\mathbf{Y} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$  e  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  matrizes não-aleatórias. Então  $\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$  e  $\mathbf{Y}'\mathbf{B}\mathbf{Y}$  são independentes se, e somente se  $\mathbf{B}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A} = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B} = \mathbf{0}$ .
- Demonstrações: pesquisar a respeito.

## Estimador de $\sigma^2$

- Sob normalidade, o estimador de máxima verosimilhança de  $\sigma^2$  é dado por

$$\hat{\sigma}_{MV}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$$

o qual é viciado.

- Na prática considera-se o seguinte estimador:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$$

- O qual é não-viciado. Além disso, pode-se provar que  $\hat{\boldsymbol{\beta}} \perp \hat{\sigma}^2$  e  $\frac{(n-p)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{(n-p)}$ .

# Estimador de $\sigma^2$

- Temos que

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}^2 &= \frac{1}{n-p} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}) \\ &= \frac{1}{n-p} \mathbf{Y}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') \mathbf{Y} \\ &= \frac{1}{n-p} \mathbf{Y}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \\ &\quad + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') \mathbf{Y} \\ &= \frac{1}{n-p} \mathbf{Y}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \\ &\quad + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') \mathbf{Y} \\ &= \frac{1}{n-p} \mathbf{Y}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') \mathbf{Y} = \frac{1}{n-p} \mathbf{Y}' (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{Y}\end{aligned}$$

- Portanto, vem que:

$$\frac{(n-p)\widehat{\sigma}^2}{\sigma^2} = \mathbf{Y}' \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{H})}{\sigma^2} \mathbf{Y} = \mathbf{Y}' \mathbf{A} \mathbf{Y}.$$

- Exercício: provar que a matrizes  $\mathbf{H}$  e  $\mathbf{I} - \mathbf{H}$  são idempontentes. Além disso, temos que  $\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{A} = \sigma^2 \mathbf{I}_n \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{H})}{\sigma^2} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})$ , a qual é idempotente.
- Também temos que

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}' \mathbf{A} \boldsymbol{\mu} &= (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{H})}{\sigma^2} \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = 0 \end{aligned}$$

- Finalmente, temos que  $r(\mathbf{A}) = r(\mathbf{I}_n - \mathbf{H}) = \text{tr}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})$  por  $\mathbf{I} - \mathbf{H}$  ser uma matriz idempotente.

- Assim,

$$\begin{aligned} \text{tr}(\mathbf{I} - \mathbf{H}) &= \text{tr}(\mathbf{I}_n) - \text{tr}(\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') = \text{tr}(\mathbf{I}_n) - \text{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}) \\ &= n - \text{tr}(\mathbf{I}_p) = n - p \end{aligned}$$

- Portanto,  $\frac{(n-p)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{(n-p)}$ .

# Independência entre $\hat{\beta}$ e $\hat{\sigma}^2$

- Temos que  $\hat{\beta} = \mathbf{B}\mathbf{Y}$ ,  $\mathbf{B} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$  e  $\hat{\sigma}^2 = \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$ .
- Mas,

$$\begin{aligned} \mathbf{B}\Sigma\mathbf{A} &= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'(\sigma^2\mathbf{I}_n)(\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}') \\ &= \sigma^2 [(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'] \\ &= \sigma^2 [(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'] = \mathbf{0}_{p \times p} \end{aligned}$$

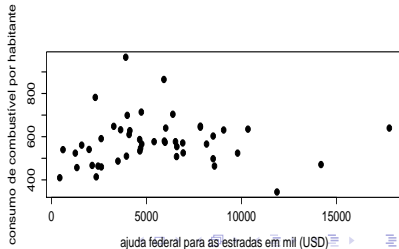
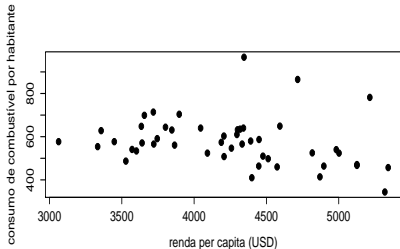
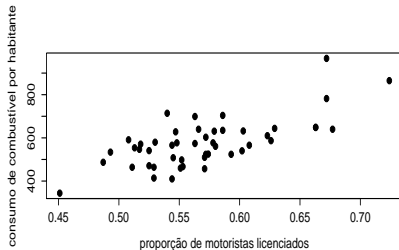
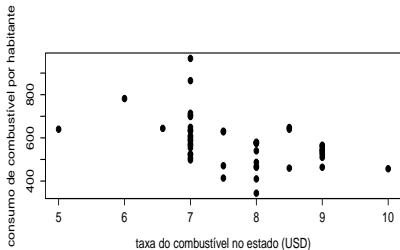
- Logo, temos que (resultados anteriores)  $\hat{\beta} \perp \hat{\sigma}^2$ .

## Exemplo 4: consumo de combustível

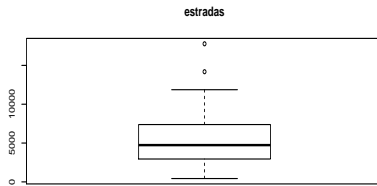
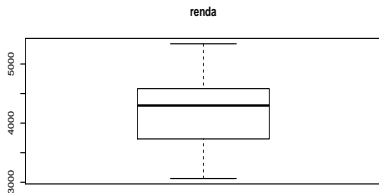
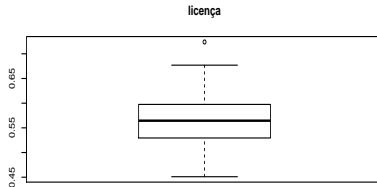
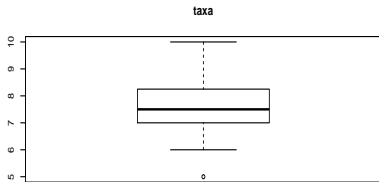
- Dos 48 estados (contíguos) dos Estados Unidos (em um certo ano) mediu-se:
  - Taxa do combustível no estado em USD - taxa.
  - Proporção de motoristas licenciados - licença.
  - Renda per capita em USD - renda.
  - Ajuda federal para as estradas em mil USD - estradas.
  - Consumo de combustível por habitante - consumo.
- Objetivo: tentar explicar o consumo de combustível em função das outras variáveis. Fonte de consulta: Paula (2013). Fonte original (Gray, 1989).



# Diagrama de dispersão entre consumo e as var. explicativas



# Box plot das variáveis explicativas



## Medidas resumo das variáveis

Variável	Média	DP	CV(%)	Min.	Mediana	Max.
consumo	576,77	111,89	19,40	344,00	568,50	968,00
taxa	7,67	0,95	12,40	5,00	7,50	10,00
licença	0,57	0,06	9,73	0,45	0,56	0,72
renda	4241,83	573,62	13,52	3063,00	4298,00	5342,00
estradas	5565,42	3491,51	62,74	431,00	4735,50	17782,00

# Correlações entre as variáveis

	consumo	taxa	licença	renda	estradas
consumo	.	-0,45	0,70	-0,24	0,02
taxa	.	.	-0,29	0,01	-0,52
licença	.	.	.	0,16	-0,06
renda	.	.	.	.	0,05
estradas	.	.	.	.	.

## Exemplo 4: consumo de combustível

### Modelo 1

$$\text{consumo}_i = \beta_0 + \beta_1 \text{taxa}_i + \beta_2 \text{licença}_i + \beta_3 \text{renda}_i + \beta_4 \text{estradas}_i + \xi_i, i = 1, \dots, 48$$

≡

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{3i} + \beta_4 x_{4i} + \xi_i, i = 1, \dots, 48$$

- $\xi_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, \sigma^2)$ .
- $\beta_0$  : consumo esperado para estados com valor zero para todas as covariáveis simultaneamente.
- $\beta_j$  : incremento (positivo ou negativo) no consumo esperado para o aumento em uma unidade da variável  $j, j = 1, 2, 3, 4$ , mantendo-se as outras fixas.

## Exemplo 4: consumo de combustível

### Modelo 2

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1(x_{1i} - \bar{x}_1) + \beta_2(x_{2i} - \bar{x}_2) + \beta_3(x_{3i} - \bar{x}_3) + \beta_4(x_{4i} - \bar{x}_4) + \xi_i, \quad (5)$$

$$i = 1, \dots, 48, \bar{x}_j = \frac{1}{48} \sum_{i=1}^{48} x_{ij}, j = 1, 2, 3, 4$$

- $\xi_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, \sigma^2)$ .
- $\beta_0$  : consumo esperado para estados com valor de cada covariável igual à sua respectiva média.
- $\beta_j$  : incremento (positivo ou negativo) no consumo esperado para o aumento em uma unidade da variável  $j, j = 1, 2, 3, 4$ , mantendo-se as outras fixas.

# Inferência

- Já vimos como ajustar o modelo (estimar os parâmetros), através da metodologia de MQO.
- Veremos agora como construir intervalos de confiança e testar hipóteses.
- De resultados anteriores, temos que

$$\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma^2 \psi_j), \quad \frac{(n-p)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi_{(n-p)}^2 \text{ e } \hat{\beta}_j \perp \frac{(n-p)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2}.$$

- Logo,  $\frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \psi_j}} \sim t_{(n-p)}$ , portanto (considerando-se

$$P(X \leq t_{\frac{1+\gamma}{2}}) = \frac{1+\gamma}{2}, X \sim t_{(n-p)}, \text{ temos que}$$

$$IC(\beta_j, \gamma) = \left[ \hat{\beta}_j - t_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \psi_j}; \hat{\beta}_j + t_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \psi_j} \right]$$

# Testes de hipóteses

- Suponha que queremos testar  $H_0 : \beta_j = \beta_{j0}$  vs  $H_1 : \beta_j \neq \beta_{j0}$ , para algum  $j$ , em que  $\beta_{j0}$  é um valor fixado.
- Estatística do teste  $T_t = \frac{\hat{\beta}_j - \beta_{j0}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \psi_j}}$ , em que  $\hat{\beta}_j$  é o estimador de MQO de  $\beta_j$  e  $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ .



# Testes de hipóteses

- Sob  $H_0$ ,  $T_t \sim t_{(n-p)}$ . Assim, rejeita-se  $H_0$  se  $|t_t| \geq t_c$ , em que  $t_t = \frac{\tilde{\beta}_j - \beta_{j0}}{\sqrt{\tilde{\sigma}^2 \psi_j}}$  e  $P(X \geq t_c | H_0) = \alpha/2$ ,  $X \sim t_{(n-p)}$ ,  $\tilde{\beta}_j$  é o  $j$ -ésimo elemento de  $\tilde{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}\mathbf{y}$  e  $\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta})' (\mathbf{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta})$
- De modo equivalente, rejeita-se  $H_0$  se p-valor  $\leq \alpha$ , em que p-valor =  $2P(X \geq |t_t| | H_0)$ ,  $X \sim t_{(n-p)}$

# ANOVA para modelos de regressão

- Suponha o seguinte modelo:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_{p-1} x_{(p-1)i} + \xi_i, \xi_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

- Logo  $Y_i \stackrel{ind.}{\sim} N(\beta_0 + \sum_{j=1}^{p-1} \beta_j x_{ji}, \sigma^2)$ .
- O modelo acima define uma média (condicional aos valores de  $x_{ji}, j = 1, \dots, p-1; i = 1, \dots, n$ ) para cada observação  $Y_i$ .
- Defina  $\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + \hat{\beta}_2 x_{2i} + \dots + \hat{\beta}_{p-1} x_{(p-1)i}$  (valor predito pelo modelo).
- O resíduo é definido por  $R_i = \hat{\xi}_i = Y_i - \hat{Y}_i$ .
- Desejamos testar  $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_{(p-1)} = 0$  vs  $H_1 : \text{Há pelo menos uma diferença.}$

- Nosso objetivo é considerar um modelo que explique adequadamente a variabilidade dos dados, ou seja, um modelo para o qual os resíduos sejam “pequenos”.
- Pode-se provar que, a soma de quadrados total  $SQT = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2$ , pode ser decomposta como:

$$SQT = \underbrace{\sum_{i=1}^n (\bar{Y} - \hat{Y}_i)^2}_{SQM} + \underbrace{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}_{SQR}$$

- Assim, quanto maior for o valor de SQM em relação à SQR, maior será a contribuição da parte sistemática para explicar a variabilidade dos dados. Portanto, mais “provável” que exista (pelo menos um)  $\beta_j \neq 0, j = 1, \dots, p - 1$ .

- SQM: soma de quadrados do modelo ; SQR: soma de quadrados dos resíduos.
- Portanto, como estatística de teste, podemos comparar, de alguma forma, as somas de quadrados (do modelo e dos resíduos).
- Pergunta: como construir uma estatística de teste adequada ?  
Adequada: que serve para testar as hipóteses de interesse, que possua distribuição conhecida (sob  $H_0$  e sob  $H_1$ ) e que tenha um “razoável” poder (assumindo-se ser possível fixar o nível de significância  $\alpha$ ).

- Lembrando da forma matricial do modelo:  $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\xi}$ , pode-se demonstrar que:
  - $\text{SQT} = \mathbf{Y}'(\mathbf{I} - n^{-1}\mathbf{J})\mathbf{Y}$ , em que  $\mathbf{J} = \mathbf{1}\mathbf{1}'$ .
  - $\text{SQM} = \mathbf{Y}'(\mathbf{H} - n^{-1}\mathbf{J})\mathbf{Y}$ , em que  $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$  (chamada de matriz de projeção ou matriz “hat”).
  - $\text{SQR} = \mathbf{Y}'(\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{Y}$ .
- Pode-se provar que as matrizes  $\mathbf{A} = \mathbf{H} - n^{-1}\mathbf{J}$  e  $\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{H}$  são ortogonais, ou seja,  $\mathbf{AB} = \mathbf{0}$  (provando-se que  $n^{-1}\mathbf{H}\mathbf{J} = n^{-1}\mathbf{J}$ ).
- Dizemos que  $\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} = \mathbf{H}\mathbf{Y}$  e  $\mathbf{R} = \mathbf{Y} - \widehat{\mathbf{Y}} = (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}')\mathbf{Y} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})$  projetam  $\mathbf{Y}$  em dois subespaços ortogonais, pois  $\mathbf{H}(\mathbf{I} - \mathbf{H}) = \mathbf{0}$ .
- Um caminho para a construção de estatísticas do teste é o estudo das propriedades de formas quadráticas aleatórias (normais).

# Voltando ao problema

- Lembremos que:

- $SQM = \mathbf{Y}' (\mathbf{H} - n^{-1}\mathbf{J}) \mathbf{Y}$ , em que  $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ .

- $SQR = \mathbf{Y}' (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{Y}$ .

- $\mathbf{A} = \mathbf{H} - n^{-1}\mathbf{J}$  e  $\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{H}$

- $\mathbf{Y} \sim N_n(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ .

- Defina  $W = SQM/\sigma^2 = \mathbf{Y}' \left( \frac{\mathbf{H} - n^{-1}\mathbf{J}}{\sigma^2} \right) \mathbf{Y}$  e

$$V = SQR/\sigma^2 = \mathbf{Y}' \left( \frac{\mathbf{I} - \mathbf{H}}{\sigma^2} \right) \mathbf{Y}.$$

## Voltando ao problema

- Temos que  $\frac{\mathbf{A}}{\sigma^2}(\sigma^2 \mathbf{I}) \frac{\mathbf{B}}{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{AB} = \mathbf{0}$  (são ortogonais). Então  $W \perp V$ .
- Por outro lado,  $\frac{\mathbf{A}}{\sigma^2}(\sigma^2 \mathbf{I}) = \mathbf{A}$  e  $\frac{\mathbf{B}}{\sigma^2}(\sigma^2 \mathbf{I}) = \mathbf{B}$ . Como  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  são matrizes idempotentes, logo  $\mathbf{AI}$  e  $\mathbf{BI}$ , também o são.
- Pode-se provar ainda que  $\mathcal{E}(V) = n - p$  e que, sob  $H_0$ ,  $\mathcal{E}(W) = p - 1$  (os parâmetros de não centralidade são iguais à 0). Basta usar a fórmula da esperança de formas quadráticas dos slides “A distribuição normal multivariada”.

- Assim,  $W \sim \chi^2_{(p-1)}$  (sob  $H_0$ ) e  $V \sim \chi^2_{(n-p)}$ , em que  $W \perp V$ .
- Logo,  $F_t = \frac{W/(p-1)}{V/(n-p)} \sim F_{[(p-1),(n-p)]}$ , sob  $H_0$ .
- Portanto, ao se optar por usar formas quadráticas para se testar hipóteses, é necessário verificar:
  - A distribuição de  $\mathbf{Y}$ .
  - Algumas propriedades das matrizes núcleo (com a matriz de covariâncias de  $\mathbf{Y}$ ).
  - As esperanças das formas quadráticas (sob  $H_0$  e  $H_1$ ).
- Portanto, rejeita-se  $H_0$  se  $f_t \geq f_c$  ou, analogamente, se  $p$ -valor =  $P(X \geq f_t | H_0) \leq \alpha$ , em que  $f_t$  é o valor calculado da estatística  $F_t$  e  $P(X \geq f_c | H_0) = \alpha, X \sim F_{(p-1, n-p)}$ .



# Tabela de ANOVA (matricial)

- Para testar  $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_{(p-1)} = 0$  vs  $H_1 : \text{Há pelo menos uma diferença.}$

FV	SQ	GL	QM	Estatística F	pvalor
Modelo	$SQM = \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$	p-1	$QMM = \frac{SQM}{p-1}$	$F_t = \frac{QMM}{QMR}$	$P(X \geq f_t   H_0)$
Resíduo	$SQR = \mathbf{Y}'\mathbf{B}\mathbf{Y}$	n-p	$QMR = \frac{SQR}{n-p}$		
Total	SQT	n-1			

FV: fonte de variação, SQ: soma de quadrados, GL: graus de liberdade, QM: quadrado médio.

# Comentários

- Quando não há intercepto no modelo ou quando há mais de um, eventualmente, o procedimento descrito anteriormente pode não ser adequado para se testar as hipóteses de interesse.
- Alternativas: o procedimento pode ser adaptado ou pode-se usar outros tipo de testes como os “do tipo”  $C\beta$  (o qual veremos mais adiante).
- Os testes do tipo  $C\beta$  são úteis (como veremos) para testar outras hipóteses de interesse como, por exemplo, descobrir quais componentes do vetor  $\beta$  são diferentes de 0.

# Ajuste de modelos de regressão linear múltipla normais homocedásticos no R

- Função *lm*.
- Comando geral  $lm(y \sim x_1 + x_2 + \dots + x_{(p-1)})$ ,  $y$ : variável resposta,  $x_1, x_2, \dots, x_{(p-1)}$ : variáveis explicativas.
- Modelo sem intercepto  $lm(y \sim -1 + x_1 + x_2 + \dots + x_{(p-1)})$ ,  $y$ : variável resposta,  $x_1, x_2, \dots, x_{(p-1)}$ : variáveis explicativas.

## Cont.

- Suponha que o objeto “result” contenha a saída da aplicação da função *lm*

Quantidade	Comando
$\tilde{\beta}$ (vetor com as estimativas dos parâmetros de regressão)	result\$coef
$\tilde{\sigma}^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ (estimativa da matriz de variâncias e covariâncias dos estimadores de $\beta$ )	vcov(result)
$\tilde{\sigma}$ (estimativa do desvio-padrão residual)	(summary(result))\$sigma
$\mathbf{X}$ (matriz de planejamento)	model.matrix(result)
$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\tilde{\beta}$ (valor predito modelo)	fitted.values(result)

## Cont.

Quantidade	Comando
tabela com as estimativas, erros-padrão e testes de nulidade individuais	<code>summary(result)\$coeff</code>
$\tilde{\mu} = \mathbf{X}\tilde{\beta}$ (valor predito da média e intervalo de confiança)	<code>predict(result,interval = c("confidence"))</code>
$\tilde{y} = \mathbf{X}\tilde{\beta}$ (valor predito de cada observação e intervalo de previsão* )	<code>predict(result,interval = c("prediction"))</code>

\* Veremos intervalo de previsão mais adiante.

## Exemplo 4: consumo de combustível

- Modelo com as covariáveis centradas, equação (5).
- Tabela ANOVA

FV	GL	SQ	QM	Estatística F	p-valor
Modelo	4	399316,51	99829,13	22,71	<0,0001
Resíduo	43	189049,97	4396,51	-	-

- Pelo menos um dos coeficientes de regressão  $(\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4)'$  é diferente de 0. Também se diz que “existe regressão”.
- Comando “anova(result)”.

## Exemplo 4: ajuste do modelo

Parâmetro	Estimativa	EP	Estat. t	p-valor
$\beta_0$	576,771	9,571	60,266	<0,0001
$\beta_1$ (taxa)	-34,790	12,970	-2,682	0,0103
$\beta_2$ (licença)	1336,450	192,299	6,950	<0,0001
$\beta_3$ (renda)	-0,067	0,017	-3,867	0,0004
$\beta_4$ (estradas)	-0,002	0,0034	-0,716	0,4780

A variável “estradas” não contribui no modelo para explicar a variabilidade do consumo. Vamos ajustar um modelo (reduzido) descartando essa variável.

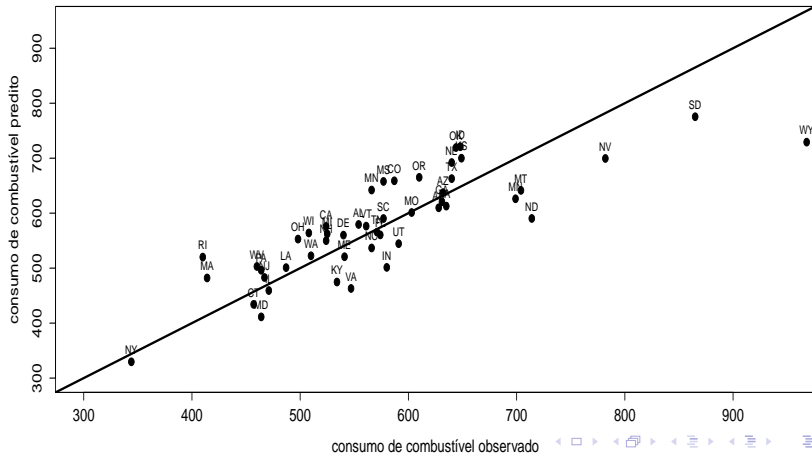
## Exemplo 4: ajuste do modelo reduzido

Par.	Estim.	EP	IC(95%)	Estat. t	p-valor
$\beta_0$	576,771	9,517	[557,590 ; 595,952 ]	60,602	<0,0001
$\beta_1$ (taxa)	-29,484	10,584	[-50,814 ; -8,154 ]	-2,786	0,0079
$\beta_2$ (licença)	1374,768	183,670	[1004,607 ; 1744,930]	7,485	<0,0001
$\beta_3$ (renda)	-0,068	0,017	[-0,102 ; -0,034 ]	-3,999	0,0002

Comentários: todas as variáveis explicativas são significativas, sendo que o impacto da taxa e da renda, no consumo, é negativo enquanto que o impacto da licença, no consumo, é positivo. Para medir qual variável explicativa mais impacta no consumo o ideal é padronizá-las.



# Consumos de combustível observado e predito modelo



## Exemplo 3: efeito do fósforo na produção de milho

- Vamos ajustar dois modelos e compará-los.
- Modelo linear (reta) e modelo quadrático (parábola): ambos fazem parte da família de modelos de regressão linear.

## Exemplo 3: medidas resumo por nível de fósforo

Nível de fósforo	Média	DP	CV(%)	Var.	Mínimo	Máximo
0 kg/ha	4,647	2,052	44,156	4,211	2,380	6,770
25 kg/ha	8,255	1,410	17,076	1,987	6,150	9,100
50 kg/ha	8,300	0,951	11,461	0,905	6,920	9,070
75 kg/ha	9,350	0,700	7,482	0,489	8,660	10,240
100 kg/ha	9,640	0,433	4,492	0,188	9,140	10,170

# Modelo linear 1: reta

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \xi_i, i = 1, 2, \dots, 20$$

- $x_i$  : quantidade de fósforo ministrada a i-ésima parcela.
- $\beta_0$  : valor esperado (média) da produção de milho quando a quantidade de fósforo aplicada é igual à 0.
- $\beta_1$  : incremento no valor esperado da produção de milho quando a quantidade de fósforo aplicada aumenta em uma unidade.
- $\xi_i \stackrel{iid}{\sim} N(0, \sigma^2)$ .

## Modelo linear 2: parábola

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \xi_i, i = 1, 2, \dots, 20$$

- $x_i$  : quantidade de fósforo ministrada a  $i$ -ésima parcela.
- $\beta_0$  : valor esperado (média) da produção de milho quando a quantidade de fósforo aplicada é igual à 0.
- A interpretação isolada dos parâmetros  $\beta_1$  e  $\beta_2$  é complicada mas, podemos dizer que  $\frac{-\beta_1}{2\beta_2}$  é a quantidade de fósforo que leva à produção máxima de milho.
- $\xi_i \stackrel{iid}{\sim} N(0, \sigma^2)$ .

# ANOVA para o modelo quadrático

## ■ Tabela ANOVA

FV	GL	SQ	QM	Estatística F	p-valor
Modelo	2	58,16	29,08	17,18	< 0,0001
Resíduo	17	28,77	1,70		

- Pelo menos um dos coeficientes de regressão  $(\beta_1, \beta_2)'$  é diferente de 0. Também se diz que “existe regressão”.

# Resultados dos ajustes dos modelos

## Modelo linear

Parâmetro	Est.	EP	IC(95%)	Estat. t	p-valor
$\beta_0$	5,8225	0,5615	[4,6429 ; 7,0021]	10,3701	< 0,0001
$\beta_1$	0,0443	0,0092	[0,0251 ; 0,0636 ]	4,8338	0,0001

## Modelo quadrático

Parâmetro	Est.	EP	IC(95%)	Estat. t	p-valor
$\beta_0$	5,0182	0,6122	[3,7266 ; 6,3098]	8,1971	< 0,0001
$\beta_1$	0,1087	0,0290	[0,0475 ; 0,1699 ]	3,7460	0,0016
$\beta_2$	-0,0006	0,0003	[-0,0012 ; -0,0001]	-2,3132	0,0335

# Intervalos de confiança para as médias obtidas a partir do modelo

- Temos que  $\mu_i = \mathcal{E}(Y_i) = \mathbf{X}'_i \boldsymbol{\beta}$  em que  $\mathbf{X}'_i$  é a  $i$ -ésima linha da matriz  $\mathbf{X}$ .
- Em particular  $\mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_i$ , no modelo linear e  $\mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2$ , no modelo quadrático.

■ Estimador pontual:  $\hat{\mu}_i = \mathbf{X}'_i \hat{\boldsymbol{\beta}} \sim N(\mu_i, \sigma^2 \mathbf{X}'_i (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}_i)$ .

■ Pode-se provar que:  $\frac{\hat{\mu}_i - \mu_i}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{X}'_i (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}_i}} \sim t_{(n-p)}$ .

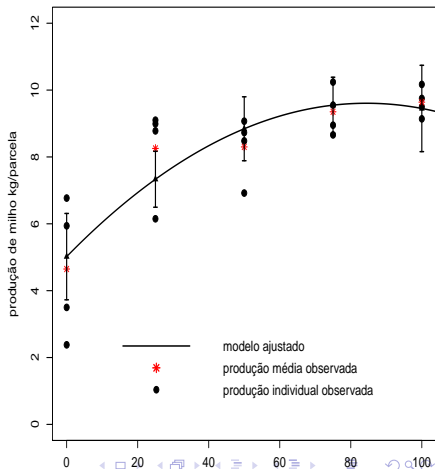
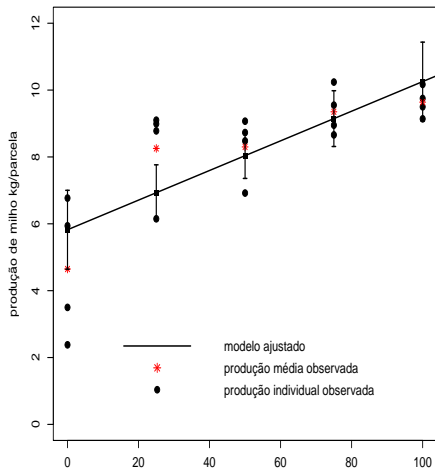
■ Assim,  $IC[\mu_i; \gamma] =$

$$\left[ \hat{\mu}_i - t_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{X}'_i (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}_i}; \hat{\mu}_i + t_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{X}'_i (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}_i} \right], \text{ em}$$

que considerando-se  $P(X \leq t_{\frac{1+\gamma}{2}}) = \frac{1+\gamma}{2}$ ,  $X \sim t_{(n-p)}$ .



# Ajuste dos modelos de regressão



# Estimativa da quantidade de fósforo que retorna a máxima produtividade

- $\theta = -\frac{\beta_1}{2\beta_2}$ .
- Estimador pontual  $\hat{\theta} = -\frac{\hat{\beta}_1}{2\hat{\beta}_2}$ .
- Para fazer inferências sobre  $\theta$  com base em  $\hat{\theta}$  precisamos da distribuição exata ou aproximada deste.
- Sabemos que  $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) \sim N_2((\beta_1, \beta_2), \sigma^2 \mathbf{\Omega})$  em que  $\mathbf{\Omega} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{[2:3,2:3]}^{-1}$  (submatriz obtida excluindo-se a primeira linha e a primeira coluna).
- Uma opção: método delta.

# Método delta univariado

- Seja  $\hat{\theta}$  uma variável aleatória de sorte que, para  $n$  suficientemente grande,

$$\hat{\theta} \approx N(\theta, \sigma^2).$$

- Defina  $\hat{\tau} = g(\hat{\theta})$ . Então, para  $n$  suficientemente grande, sob certas condições de regularidade,

$$\hat{\tau} \approx N(g(\theta), \sigma^2 [\psi(\theta)]^2),$$

em que  $\psi(\theta) = \frac{d}{d\theta} g(\theta)$ .

# Método delta univariado

- Voltando ao exemplo, suponha que  $\tau = \frac{1}{\beta_1}$ . Então

$$\psi(\beta_1) = \frac{d}{d\beta_1} \mathbf{g}(\beta_1) = -\beta_1^{-2}.$$

- Assim, para  $n$  suficientemente grande,  $\hat{\tau} = \frac{1}{\hat{\beta}_1} \approx N(\tau, \omega\beta_1^{-4})$ , em que  $\omega$  é a variância de  $\hat{\beta}_1$ .

# Método delta multivariado

- Seja  $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_p)'$  de sorte que, para  $n$  suficientemente grande

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} \approx N_p(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma}).$$

- Defina  $\hat{\boldsymbol{\tau}} = (g_1(\hat{\boldsymbol{\theta}}), g_2(\hat{\boldsymbol{\theta}}), \dots, g_r(\hat{\boldsymbol{\theta}}))'$ , então, para  $n$  suficientemente grande, sob certas condições de regularidade,

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} \approx N_r(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Psi}'),$$

em que  $\boldsymbol{\tau} = (g_1(\boldsymbol{\theta}), g_2(\boldsymbol{\theta}), \dots, g_r(\boldsymbol{\theta}))'$ .

# Método delta multivariado

■ e

$$\Psi = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta_1} g_1(\boldsymbol{\theta}) & \frac{\partial}{\partial \theta_2} g_1(\boldsymbol{\theta}) & \frac{\partial}{\partial \theta_3} g_1(\boldsymbol{\theta}) & \cdots & \frac{\partial}{\partial \theta_p} g_1(\boldsymbol{\theta}) \\ \frac{\partial}{\partial \theta_1} g_2(\boldsymbol{\theta}) & \frac{\partial}{\partial \theta_2} g_2(\boldsymbol{\theta}) & \frac{\partial}{\partial \theta_3} g_2(\boldsymbol{\theta}) & \cdots & \frac{\partial}{\partial \theta_p} g_2(\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \theta_1} g_r(\boldsymbol{\theta}) & \frac{\partial}{\partial \theta_2} g_r(\boldsymbol{\theta}) & \frac{\partial}{\partial \theta_3} g_r(\boldsymbol{\theta}) & \cdots & \frac{\partial}{\partial \theta_p} g_r(\boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix}.$$

## Voltando à estimativa da quantidade de fósforo que retorna a máxima produtividade

- Método Delta: sob os resultados obtidos e assumindo válidas as condições de regularidade, temos que  $\hat{\theta} \approx N(\theta, \sigma_\theta^2)$ , em que

$$\sigma_\theta^2 = \sigma^2 (\mathbf{\Delta})' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{\Delta})$$

- $\mathbf{\Delta} = \left[ 0 \quad -\frac{1}{2\beta_2} \quad \frac{\beta_1}{2\beta_2^2} \right]'$ .

- Logo  $IC(\theta, \gamma) = \left[ \hat{\theta} - z_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\hat{\sigma}_\theta^2}; \hat{\theta} + z_{\frac{1+\gamma}{2}} \sqrt{\hat{\sigma}_\theta^2} \right]$ , em que

$$P(Z \leq z_{\frac{1+\gamma}{2}}) = \frac{1+\gamma}{2}, Z \approx N(0, 1) \text{ e } \hat{\sigma}_\theta^2 = \hat{\sigma}^2 (\hat{\mathbf{\Delta}})' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} (\hat{\mathbf{\Delta}}) \text{ e}$$

$$\hat{\mathbf{\Delta}} = \left[ 0 \quad -\frac{1}{2\hat{\beta}_2} \quad \frac{\hat{\beta}_1}{2\hat{\beta}_2^2} \right]'$$

- Em nosso exemplo  $\hat{\theta} = 84,45(16,20)$ ,  $IC(\theta, 95\%) = [52,68; 116,20]$ .

# Estimativa da produtividade máxima

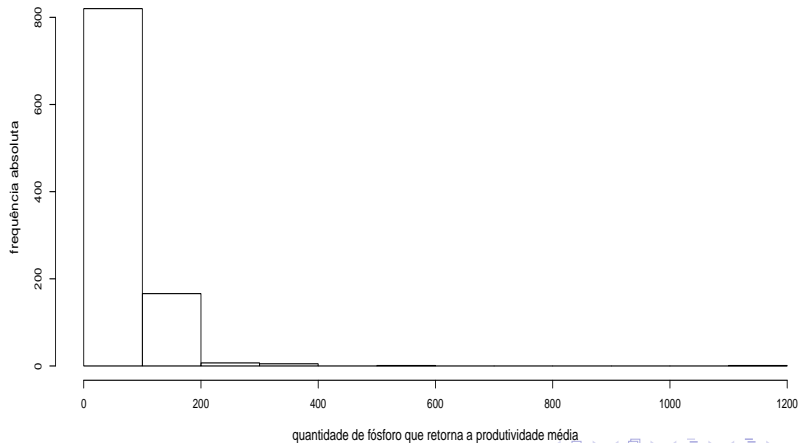
- De posse do valor (estimativa pontual) da quantidade de fósforo que retorna a produtividade máxima, podemos estimar a produtividade (média) máxima.
- Ou seja, queremos estimar:  $\mu_M = \mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2$  para  $x_i = 84, 45$ .
- Utilizando a metodologia apresentada no Slide 56, obtemos  $\tilde{\mu}_M = 9,601(0,407)$  e  $IC(\mu_M; 95\%) = [8,748; 10,463]$ .



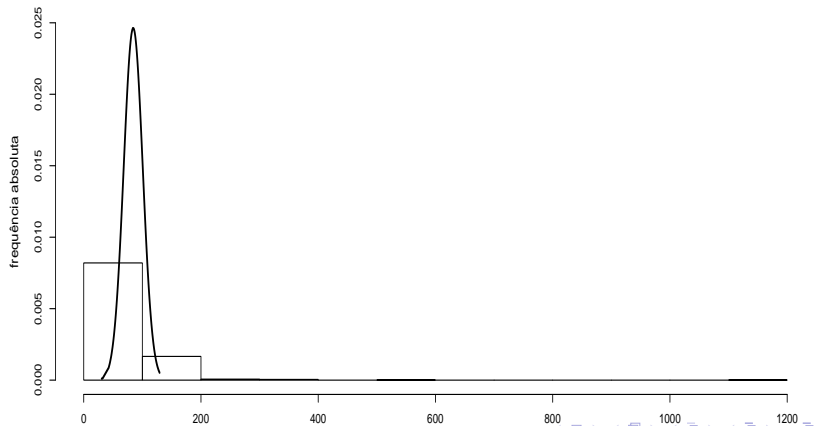
# Estimativa da quantidade de fósforo que retorna a máxima produtividade via bootstrap não-paramétrico

- Para  $b=1, \dots, B$  (número de amostras) execute os seguintes passos
  - 1 Selecione uma amostra aleatória (com reposição) de tamanho  $m$  do conjunto de dados original.
  - 2 Estime os parâmetros  $\beta$  via MQO com base nessa amostra.
  - 3 Obtenha a quantidade de fósforo que retorna a produtividade máxima com as estimativas obtidas no passo 2.
- Ao final ter-se-á uma amostra aleatória de tamanho  $B$  da distribuição do estimador da quantidade de fósforo de interesse.

# Distribuição empírica do estimador $\hat{\theta}$



# Distribuição empírica do estimador $\hat{\theta}$ e curva teórica da distribuição normal obtida pelo método delta



# Comentários

- Resultados método Delta:

$$\tilde{\theta} = 84,45(16,20), IC(\theta, 95\%) = [52,68; 116,20].$$

- Resultados bootstrap:

$$\tilde{\theta} = 92,85(46,28), IC(\theta, 95\%) = [68,05; 163,77].$$

- A aproximação (pelo método Delta) da distribuição de  $\hat{\theta}$  para normal se mostrou inapropriada.