
INSTITUTO SUPERIOR DE AGRONOMIA
ESTATÍSTICA E DELINEAMENTO – 2020-21
Resoluções dos exercícios de Regressão Linear Múltipla

1. Proceda como indicado no enunciado para ter disponível a *data frame* `vinho.RLM`.

- (a) A “matriz de nuvens de pontos” produzida pelo comando `plot(vinho.RLM)` tem as nuvens de pontos associadas a cada possível par de entre as $p = 13$ variáveis do conjunto de dados. Na linha indicada pela designação `V8` encontram-se os gráficos em que essa variável surge no eixo vertical. A modelação de `V8` com base num único preditor parece promissor apenas com o preditor `V7` (o que não deixa de ser natural, visto `V7` ser o índice de fenóis totais, sendo `V8` o teor de flavonóides, ou seja, um dos fenóis medidos pela variável `V7`).
- (b) O ajustamento pedido é:

```
> summary(lm(V8 ~ V2, data=vinho.RLM))
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.75876    1.17370  -1.498  0.13580
V2           0.29137    0.09011   3.234  0.00146 **
---
Residual standard error: 0.9732 on 176 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.05608, Adjusted R-squared:  0.05072
F-statistic: 10.46 on 1 and 176 DF,  p-value: 0.001459
```

Trata-se dum péssimo ajustamento, o que não surpreende, tendo em conta a nuvem de pontos deste par de variáveis, obtida na alínea anterior. O coeficiente de determinação é quase nulo: $R^2 = 0.05608$ e menos de 6% da variabilidade no teor de flavonóides é explicado pela regressão sobre o teor alcoólico.

No entanto, a hipótese nula do teste de ajustamento global ($H_0 : \mathcal{R}^2 = 0$ ou, alternativamente, $H_0 : \beta_1 = 0$) é rejeitada: o seu *p-value* é apenas $p = 0.00146$ (valor que tanto pode ser lido na última linha da listagem produzida pelo comando `summary` como na linha do teste-*t* à hipótese $\beta_1 = 0$). Ou seja, um coeficiente de determinação tão baixo quanto $R^2 = 0.05608$ é considerado significativamente diferente de zero (em boa parte, devido à grande dimensão da amostra). Mas isso não é sinónimo de um bom ajustamento do modelo. Como sempre, a Soma de Quadrados Total é o numerador da variância amostral dos valores observados da variável resposta. Ora,

```
> var(vinho.RLM$V8)
[1] 0.9977187
> dim(vinho.RLM)
[1] 178  13
> 177*var(vinho.RLM$V8)
[1] 176.5962
> 177*var(fitted(lm(V8 ~ V2 , data=vinho.RLM)))
[1] 9.903747
> 177*var(residuals(lm(V8 ~ V2 , data=vinho.RLM)))
[1] 166.6925
```

pelo que $SQT = (n - 1) s_y^2 = 176.5962$; $SQR = (n - 1) s_y^2 = 9.903747$; e $SQRE = (n - 1) s_e^2 = 166.6925$.

NOTA: Há outras maneiras possíveis de determinar estas Somas de Quadrados. Por exemplo, $SQR = R^2 \times SQT = 0.05608 \times 176.5962 = 9.903515$ (com um pequeno erro de arredondamento) e $SQRE = SQT - SQR = 176.5962 - 9.903515 = 166.6927$.

- (c) A matriz de correlações (arredondada a duas casas decimais) entre cada par de variáveis é:

```
> round(cor(vinho.RLM), d=2)
      V2  V3  V4  V5  V6  V7  V8  V9  V10  V11  V12  V13  V14
V2  1.00 0.09 0.21 -0.31 0.27 0.29 0.24 -0.16 0.14 0.55 -0.07 0.07 0.64
V3  0.09 1.00 0.16 0.29 -0.05 -0.34 -0.41 0.29 -0.22 0.25 -0.56 -0.37 -0.19
V4  0.21 0.16 1.00 0.44 0.29 0.13 0.12 0.19 0.01 0.26 -0.07 0.00 0.22
V5 -0.31 0.29 0.44 1.00 -0.08 -0.32 -0.35 0.36 -0.20 0.02 -0.27 -0.28 -0.44
V6  0.27 -0.05 0.29 -0.08 1.00 0.21 0.20 -0.26 0.24 0.20 0.06 0.07 0.39
V7  0.29 -0.34 0.13 -0.32 0.21 1.00 0.86 -0.45 0.61 -0.06 0.43 0.70 0.50
V8  0.24 -0.41 0.12 -0.35 0.20 0.86 1.00 -0.54 0.65 -0.17 0.54 0.79 0.49
V9 -0.16 0.29 0.19 0.36 -0.26 -0.45 -0.54 1.00 -0.37 0.14 -0.26 -0.50 -0.31
V10 0.14 -0.22 0.01 -0.20 0.24 0.61 0.65 -0.37 1.00 -0.03 0.30 0.52 0.33
V11 0.55 0.25 0.26 0.02 0.20 -0.06 -0.17 0.14 -0.03 1.00 -0.52 -0.43 0.32
V12 -0.07 -0.56 -0.07 -0.27 0.06 0.43 0.54 -0.26 0.30 -0.52 1.00 0.57 0.24
V13 0.07 -0.37 0.00 -0.28 0.07 0.70 0.79 -0.50 0.52 -0.43 0.57 1.00 0.31
V14 0.64 -0.19 0.22 -0.44 0.39 0.50 0.49 -0.31 0.33 0.32 0.24 0.31 1.00
```

Analisando a coluna (ou linha) relativa à variável resposta **V8**, observa-se que a variável com a qual esta se encontra mais correlacionada (em módulo) é **V7** ($r_{7,8} = 0.86$), o que confirma a inspecção visual feita na alínea 1a. Assim, o coeficiente de determinação numa regressão de **V8** sobre **V7** é $R^2 = 0.8645635^2 = 0.74747$, ou seja, o conhecimento do índice de fenóis totais permite, através da regressão ajustada, explicar cerca de 75% da variabilidade total do teor de flavonóides. O valor de $SQT = 176.5962$ é igual ao obtido na alínea anterior, uma vez que diz apenas respeito à variabilidade da variável resposta (não dependendo do modelo de regressão ajustado). Já o valor de SQR vem alterado e é agora: $SQR = R^2 \cdot SQT = 132.0004$, sendo $SQRE = SQT - SQR = 176.5962 - 132.0004 = 44.5958$.

- (d) O modelo pedido no enunciado é:

```
> lm(V8 ~ V4 + V5 + V11 + V12 + V13 , data=vinho.RLM)
Coefficients:
(Intercept)          V4          V5          V11          V12          V13
  -2.25196         0.53661        -0.04932         0.09053         0.95720         0.99496

> summary(lm(V8 ~ V4 + V5 + V11 + V12 + V13 , data=vinho.RLM))
(...)
Multiple R-squared: 0.7144
(...)
```

Os cinco preditores referidos permitem obter um coeficiente de determinação quase tão bom, embora ainda inferior, ao obtido utilizando apenas o preditor **V7**. O facto de o valor de R^2 ser agora inferior ao valor de R^2 na regressão linear simples de **V8** sobre **V7** não contradiz o facto de submodelos não poderem ter valores do coeficiente de determinação superiores, uma vez que o preditor **V7** não faz parte do grupo de cinco preditores agora considerado (ou seja, o modelo da alínea anterior *não é um submodelo* do que foi considerado nesta alínea).

- (e) Ajustando a mesma variável resposta **V8** sobre a totalidade das restantes variáveis obtêm-se os seguintes resultados:

```
> lm(V8 ~ . , data=vinho.RLM)

Call:
lm(formula = V8 ~ ., data = vinho.RLM)
```

```

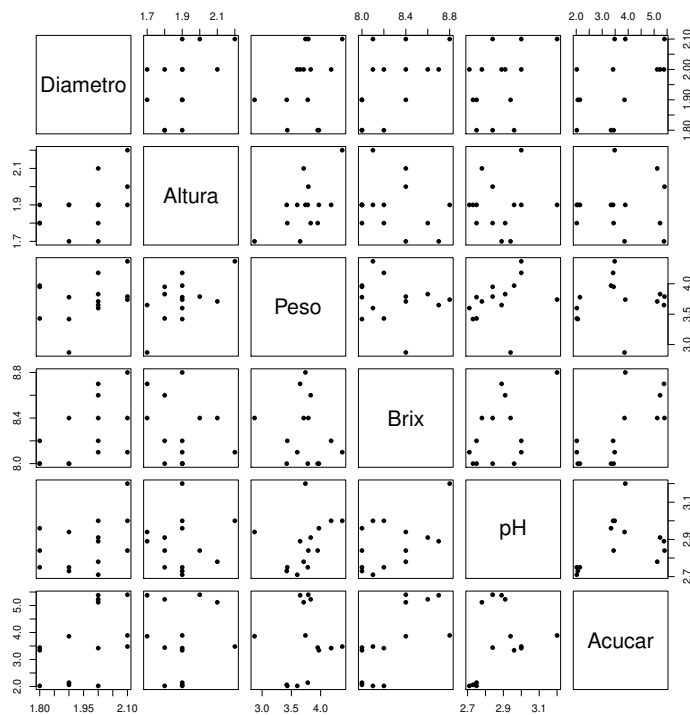
Coefficients:
(Intercept)      V2      V3      V4      V5      V6      V7
-1.333e+00  4.835e-03 -4.215e-02  4.931e-01 -2.325e-02 -3.559e-03  7.058e-01
      V9      V10      V11      V12      V13      V14
-1.000e+00  2.840e-01  1.068e-04  4.387e-01  3.208e-01  9.557e-05

> 177*var(fitted(lm(V8 ~ . , data=vinho.RLM)))
[1] 151.4735
> 177*var(residuals(lm(V8 ~ . , data=vinho.RLM)))
[1] 25.12269

```

- i. De novo, o valor da Soma de Quadrados Total já é conhecido das alíneas anteriores: não depende do modelo ajustado, mas apenas da variância dos valores observados de Y (V8, neste exercício), que não se alteraram. Logo, $SQT = 176.5962$. Como se pode deduzir da listagem acima, $SQR = (n-1) \cdot s_{\hat{y}}^2 = 151.4666$ e $SQRE = (n-1) \cdot s_e^2 = 25.12269$. Tem-se agora $R^2 = \frac{151.4735}{176.5962} = 0.8577$. Refira-se que este valor do coeficiente de determinação *nunca poderia ser inferior ao obtido nas alíneas anteriores*, uma vez que os preditores das alíneas anteriores formam um subconjunto dos preditores utilizados aqui. Repare como a diferentes modelos para a variável resposta V8, correspondem diferentes formas de decompôr a Soma de Quadrados Total comum, $SQT = 176.5962$. Quanto maior a parcela explicada pelo modelo (SQR), menor a parcela associada aos resíduos ($SQRE$), isto é, menor a parcela do que não é explicado pelo modelo.
- ii. Os coeficientes associados a uma mesma variável são diferentes nos diversos modelos ajustados. Assim, *não é possível prever, a partir da equação ajustada num modelo com todos os preditores, qual será a equação ajustada num modelo com menos preditores*.

2. (a) A nuvem de pontos e a matriz de correlações pedidas são:



```
> round(cor(brix),d=3)
      Diametro Altura  Peso  Brix  pH Acucar
Diametro  1.000  0.488  0.302  0.557 0.411  0.492
Altura    0.488  1.000  0.587 -0.247 0.048  0.023
Peso      0.302  0.587  1.000 -0.198 0.308  0.118
Brix      0.557 -0.247 -0.198  1.000 0.509  0.714
pH        0.411  0.048  0.308  0.509 1.000  0.353
Acucar    0.492  0.023  0.118  0.714 0.353  1.000
```

Das nuvens de pontos conclui-se que não há relações lineares particularmente evidentes, facto que é confirmado pela matriz de correlações, onde a maior correlação é 0.714. Outro aspecto evidente nos gráficos é o de haver relativamente poucas observações.

- (b) A equação de base (usando os nomes das variáveis como constam da *data frame*) é:

$$Brix_i = \beta_0 + \beta_1 Diametro_i + \beta_2 Altura_i + \beta_3 Peso_i + \beta_4 pH_i + \beta_5 Acucar_i + \epsilon_i ,$$

havendo nesta equação seis parâmetros (os cinco coeficientes das variáveis predictoras e ainda a constante aditiva β_0).

- (c) Recorrendo ao comando `lm` do R, tem-se:

```
> brix.lm <- lm(Brix ~ . , data=brix)
> brix.lm
Call:
lm(formula = Brix ~ Diametro + Altura + Peso + pH + Acucar, data = brix)
Coefficients:
(Intercept)  Diametro      Altura      Peso      pH      Acucar
  6.08878     1.27093    -0.70967    -0.20453    0.51557    0.08971
```

- (d) A interpretação dum parâmetro β_j ($j > 0$) obtém-se considerando o valor esperado de Y dado um conjunto de valores dos preditores,

$$\mu = E[Y | x_1, x_2, x_3, x_4, x_5] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5$$

e o valor esperado obtido aumentando numa unidade apenas o preditor x_j , por exemplo x_3 :

$$\mu_* = E[Y | x_1, x_2, x_3 + 1, x_4, x_5] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 (x_3 + 1) + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5 .$$

Subtraindo os valores esperados de Y , resulta apenas: $\mu_* - \mu = \beta_3$. Assim, é legítimo falar em β_3 como a *variação no valor esperado de Y , associado a aumentar X_3 em uma unidade (não variando os valores dos restantes preditores)*. No nosso contexto, a estimativa de β_3 é $b_3 = -0.20453$. Corresponde à estimativa da variação esperada no teor brix (variável resposta), associada a aumentar em uma unidade a variável preditora peso, mantendo constantes os valores dos restantes preditores. Ou seja, corresponde a dizer que um aumento de 1g no peso dum fruto (mantendo iguais os valores dos restantes preditores) está associado a uma diminuição média do teor brix do fruto de 0.20453 graus. As unidades de medida de b_3 são graus brix/g. Em geral, as unidades de medida de β_j são as unidades da variável resposta Y a dividir pelas unidades do preditor X_j associado a β_j .

- (e) A interpretação de β_0 é diferente da dos restantes parâmetros, mas igual ao duma ordenada na origem num regressão linear simples: é o *valor esperado de Y associado a todos os preditores terem valor nulo*. No nosso contexto, o valor estimado $b_0 = 6.08878$ não tem grande interesse prático (“frutos” sem peso, nem diâmetro ou altura, com valor pH fora a escala, etc...).

- (f) Num contexto descritivo, a discussão da qualidade deste ajustamento faz-se com base no coeficiente de determinação $R^2 = \frac{SQR}{SQT}$. Pode calcular-se a Soma de Quadrados Total como o numerador da variância dos valores observados y_i de teor brix: $SQT = (n - 1) s_y^2 = 13 \times 0.07565934 = 0.9835714$. A Soma de Quadrados da Regressão é calculada de forma análoga à anterior, mas com base na variância dos valores ajustados \hat{y}_i , obtidos a partir da regressão ajustada: $SQR = (n - 1) s_{\hat{y}}^2 = 13 \times 0.06417822 = 0.8343169$. Logo, $R^2 = \frac{0.8343169}{0.9835714} = 0.848$. Os valores usados aqui são obtidos no R com os comandos:

```
> var(brix$Brix)
[1] 0.07565934
> var(fitted(brix.lm))
[1] 0.06417822
```

Assim, esta regressão linear múltipla explica quase 85% da variabilidade do teor *brix*, bastante acima de qualquer das regressões lineares simples, para as quais o maior valor de coeficiente de determinação seria de apenas $R^2 = 0.714^2 = 0.510$ (o maior quadrado de coeficiente de correlação entre *Brix* e qualquer dos preditores).

- (g) Tem-se:

```
> X <- model.matrix(brix.lm)
> X
  (Intercept) Diametro  Altura  Peso   pH  Acucar
1             1         2.0    2.1 3.71 2.78   5.12
2             1         2.1    2.0 3.79 2.84   5.40
3             1         2.0    1.7 3.65 2.89   5.38
4             1         2.0    1.8 3.83 2.91   5.23
5             1         1.8    1.8 3.95 2.84   3.44
6             1         2.0    1.9 4.18 3.00   3.42
7             1         2.1    2.2 4.37 3.00   3.48
8             1         1.8    1.9 3.97 2.96   3.34
9             1         1.8    1.8 3.43 2.75   2.02
10            1         1.9    1.9 3.78 2.75   2.14
11            1         1.9    1.9 3.42 2.73   2.06
12            1         2.0    1.9 3.60 2.71   2.02
13            1         1.9    1.7 2.87 2.94   3.86
14            1         2.1    1.9 3.74 3.20   3.89
```

A matriz do modelo é a matriz de dimensões $n \times (p+1)$, cuja primeira coluna é uma coluna de n uns e cujas p colunas seguintes são as colunas dadas pelas n observações de cada uma das variáveis predictoras.

O vector $\vec{\mathbf{b}}$ dos $p+1$ parâmetros ajustados é dado pelo produto matricial do enunciado: $\vec{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^t \vec{\mathbf{y}})$. Um produto matricial no R é indicado pelo operador “%*%”, enquanto que uma inversa matricial é calculada pelo comando `solve`. A transposta duma matriz é dada pelo comando `t`. Logo, o vector $\vec{\mathbf{b}}$ obtém-se da seguinte forma:

```
> solve(t(X) %*% X) %*% t(X) %*% brix$Brix
      [,1]
(Intercept) 6.08877506
Diametro    1.27092840
Altura      -0.70967465
Peso        -0.20452522
pH          0.51556821
Acucar      0.08971091
```

Como se pode confirmar, trata-se dos valores já obtidos através do comando `lm`.

3. Começemos por recordar alguns resultados já previamente discutidos:

- Viu-se no Exercício 3b) da Regressão Linear Simples que, para qualquer conjunto de n pares de observações se tem: $(n-1) \text{cov}_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})y_i$. Distribuindo y_i e o somatório pela diferença, tem-se:

$$(n-1) \text{cov}_{xy} = \sum_{i=1}^n x_i y_i - \bar{x} \underbrace{\sum_{i=1}^n y_i}_{=n\bar{y}} = \sum_{i=1}^n x_i y_i - n\bar{x}\bar{y} \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n x_i y_i = (n-1) \text{cov}_{xy} + n\bar{x}\bar{y}. \quad (1)$$

- Tomando $y_i = x_i$, para todo o i , na fórmula anterior, obtém-se:

$$(n-1) s_x^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n x_i^2 = (n-1) s_x^2 + n\bar{x}^2 \quad (2)$$

- O produto de matrizes AB só é possível quando o número de colunas da matriz A for igual ao número de linhas da matriz B (matrizes *compatíveis* para a multiplicação). Se A é de dimensão $p \times q$ e B de dimensão $q \times r$, o produto AB é de dimensão $p \times r$.
- O elemento na linha i , coluna j , dum produto matricial AB , é dado pelo *produto interno*

da linha i de A com a coluna j de B : $(AB)_{ij} = (a_{i1} \ a_{i2} \ \dots \ a_{iq}) \begin{pmatrix} b_{1j} \\ b_{2j} \\ \vdots \\ b_{qj} \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^q a_{ik} b_{kj}$.

- O produto interno de dois vectores n -dimensionais \vec{x} e \vec{y} é dado por $\vec{x}^t \vec{y} = \sum_{i=1}^n x_i y_i$. No caso de um dos vectores ser o vector de n uns, $\vec{\mathbf{1}}_n$, o produto interno resulta na soma dos elementos do outro vector, ou seja, em n vezes a média dos elementos do outro vector:

$$\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{x} = \sum_{i=1}^n x_i = n\bar{x}.$$

- A *matriz inversa* dum matriz $n \times n$ A é definida (caso exista) como a matriz (única) A^{-1} , também de dimensão $n \times n$, tal que $AA^{-1} = \mathbf{I}_n$, onde \mathbf{I}_n é a matriz identidade de dimensão $n \times n$ (recorde-se que uma matriz identidade é uma matriz quadrada com todos os elementos diagonais iguais a 1 e todos os elementos não diagonais iguais a zero).

- No caso de A ser uma matriz 2×2 , de elementos $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$, a matriz inversa é dada (verifique!) por:

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \quad (3)$$

esta matriz inversa existe se e só se o *determinante* $ad - bc \neq 0$.

Com estes resultados prévios, as contas do exercício resultam de forma simples:

- (a) A matriz do modelo \mathbf{X} é de dimensão $n \times (p+1)$, que no caso dum regressão linear simples ($p=1$), significa $n \times 2$. Tem uma primeira coluna de uns (o vector $\vec{\mathbf{1}}_n$) e uma segunda coluna com os n valores observados da variável preditora x , coluna essa que designamos pelo vector

\vec{x} . Logo, a sua transposta \mathbf{X}^t é de dimensão $2 \times n$. Como o vector \vec{y} é de dimensão $n \times 1$, o produto $\mathbf{X}\vec{y}$ é possível e o resultado é um vector de dimensão 2×1 . O primeiro elemento (na posição (1,1)) desse produto é dada pelo produto interno da primeira linha de \mathbf{X}^t com a primeira e única coluna de \vec{y} , ou seja, por $\vec{1}_n^t \vec{y} = \sum_{i=1}^n y_i = n\bar{y}$. O segundo elemento (posição (2,1)) desse vector é dado pelo produto interno da segunda linha de \mathbf{X}^t e a única coluna de \vec{y} , ou seja, por $\vec{x}^t \vec{y} = \sum_{i=1}^n x_i y_i = (n-1) \text{cov}_{xy} + n\bar{x}\bar{y}$, tendo em conta a equação (1).

(b) Tendo em conta que \mathbf{X}^t é de dimensão $2 \times n$ e \mathbf{X} é de dimensão $n \times 2$, o produto $\mathbf{X}^t \mathbf{X}$ é possível e de dimensão 2×2 . O elemento na posição (1,1) é o produto interno da primeira linha de \mathbf{X}^t ($\vec{1}_n$) com a primeira coluna de \mathbf{X} (igualmente $\vec{1}_n$), logo é: $\vec{1}_n^t \vec{1}_n = n$. O elemento na posição (1,2) é o produto interno da primeira linha de \mathbf{X}^t ($\vec{1}_n$) e segunda coluna de \mathbf{X} (\vec{x}), logo é $\vec{1}_n^t \vec{x} = \sum_{i=1}^n x_i = n\bar{x}$. O elemento na posição (2,1) é o produto interno da segunda linha de \mathbf{X}^t (\vec{x}) com a primeira coluna de \mathbf{X} ($\vec{1}_n$), logo é também $n\bar{x}$. Finalmente, o elemento na posição (2,2) é o produto interno da segunda linha de \mathbf{X}^t (\vec{x}) com a segunda coluna de \mathbf{X} (\vec{x}), ou seja, $\vec{x}^t \vec{x} = \sum_{i=1}^n x_i^2 = (n-1) s_x^2 + n\bar{x}^2$. Fica assim provado o resultado do enunciado.

(c) A expressão da inversa dada no enunciado vem directamente de aplicar a fórmula (3) à matriz ($\mathbf{X}^t \mathbf{X}$) obtida na alínea anterior. Apenas há que confirmar a expressão do determinante $ad-bc = n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = n \sum_{i=1}^n x_i^2 - (n\bar{x})^2 = n \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2 \right) = n(n-1) s_x^2$, tendo em conta a fórmula (2).

(d) Multiplicando a matriz $(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}$ pela variância σ^2 dos erros aleatórios obtém-se a matriz

$$\sigma^2 (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma^2 \frac{(n-1)s_x^2 + n\bar{x}^2}{n(n-1)s_x^2} & \frac{-n\bar{x}\sigma^2}{n(n-1)s_x^2} \\ \frac{-n\bar{x}\sigma^2}{n(n-1)s_x^2} & \frac{n\sigma^2}{n(n-1)s_x^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{(n-1)s_x^2} \right] & \frac{-\bar{x}\sigma^2}{(n-1)s_x^2} \\ \frac{-\bar{x}\sigma^2}{(n-1)s_x^2} & \frac{\sigma^2}{(n-1)s_x^2} \end{bmatrix}$$

No canto superior esquerdo tem-se a expressão de $V[\hat{\beta}_0]$. No canto inferior direito a expressão de $V[\hat{\beta}_1]$. O elemento comum às duas posições não diagonais é $\text{Cov}[\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1] = \text{Cov}[\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_0]$.

(e) Usando as expressões finais obtidas nas alíneas (c) e (a), obtém-se

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{y} &= \frac{1}{n(n-1)s_x^2} \begin{bmatrix} (n-1)s_x^2 + n\bar{x}^2 & -n\bar{x} \\ -n\bar{x} & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n\bar{y} \\ (n-1)\text{cov}_{xy} + n\bar{x}\bar{y} \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{n(n-1)s_x^2} \begin{bmatrix} (n-1)s_x^2 n\bar{y} + n^2\bar{x}^2\bar{y} - n\bar{x}(n-1)\text{cov}_{xy} - n^2\bar{x}^2\bar{y} \\ -n^2\bar{x}\bar{y} + n(n-1)\text{cov}_{xy} + n^2\bar{x}\bar{y} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{n(n-1)s_x^2\bar{y}}{n(n-1)s_x^2} - \frac{n(n-1)\text{cov}_{xy}\bar{x}}{n(n-1)s_x^2} \\ \frac{n(n-1)\text{cov}_{xy}}{n(n-1)s_x^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} - b_1\bar{x} \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

4. Sabemos que a matriz de projecção ortogonal referida é dada por $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t$, onde \mathbf{X} é a matriz do modelo, ou seja, a matriz de dimensões $n \times (p+1)$ que tem na primeira coluna, n uns, e em cada uma das p restantes colunas, as n observações de cada variável preditora. Ora,

(a) A idempotência é fácil de verificar, tendo em conta que $(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}$ é a matriz inversa de $\mathbf{X}^t \mathbf{X}$:

$$\mathbf{H}\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \cancel{\mathbf{X}^t \mathbf{X}} \cancel{(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}} \mathbf{X}^t = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t = \mathbf{H}.$$

A simetria resulta de três propriedades conhecidas de matrizes: a transposta de uma matriz transposta é a matriz original ($(\mathbf{A}^t)^t = \mathbf{A}$); a transposta dum produto de matrizes é o produto das correspondentes transpostas, pela ordem inversa ($(\mathbf{AB})^t = \mathbf{B}^t \mathbf{A}^t$); e a transposta de uma matriz inversa é a inversa da transposta ($(\mathbf{A}^{-1})^t = (\mathbf{A}^t)^{-1}$). De facto, tem-se:

$$\mathbf{H}^t = [\mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t]^t = \mathbf{X}[(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}]^t \mathbf{X}^t = \mathbf{X}[(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^t]^{-1} \mathbf{X}^t = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t = \mathbf{H}.$$

- (b) Como foi visto nas aulas teóricas, qualquer vector do subespaço das colunas da matriz \mathbf{X} , ou seja, do subespaço $\mathcal{C}(\mathbf{X}) \subset \mathbb{R}^n$, se pode escrever como $\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}$, onde $\bar{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{p+1}$ é o vector dos $p+1$ coeficientes na combinação linear das colunas de \mathbf{X} . Ora, a projecção ortogonal deste vector sobre o subespaço $\mathcal{C}(\mathbf{X})$ (que já o contém) é dada por

$$\mathbf{H}\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}) = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^t \mathbf{X}) \bar{\mathbf{a}} = \mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}.$$

Assim, o vector $\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}$ fica igual após a projecção.

- (c) Por definição, o vector dos valores ajustados é dado por $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\bar{\mathbf{y}}$. Ora, a média desses valores ajustados, que podemos representar por $\bar{\hat{y}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{y}_i$, pode ser calculado tomando o produto interno do vector $\vec{\mathbf{1}}_n$ de n uns com o vector $\hat{\mathbf{y}}$, uma vez que esse produto interno devolve a soma dos elementos de $\hat{\mathbf{y}}$. Assim, a média dos valores ajustados é $\bar{\hat{y}} = \frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n^t \hat{\mathbf{y}} = \frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n^t \mathbf{H}\bar{\mathbf{y}} = \frac{1}{n} (\mathbf{H}\vec{\mathbf{1}}_n)^t \bar{\mathbf{y}} = \frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n^t \bar{\mathbf{y}}$, uma vez que $\mathbf{H}\vec{\mathbf{1}}_n = \vec{\mathbf{1}}_n$. Esta última afirmação decorre directamente da alínea anterior, uma vez que o vector $\vec{\mathbf{1}}_n$ pertence ao subespaço das colunas de \mathbf{X} , sendo a primeira das colunas dessa matriz (usando a notação da alínea anterior, tem-se $\vec{\mathbf{1}}_n = \mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}$ com $\bar{\mathbf{a}} = (1, 0, 0, \dots, 0)^t$). Mas a expressão final obtida, $\frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n^t \bar{\mathbf{y}}$, é a média \bar{y} dos valores observados de Y (já que $\vec{\mathbf{1}}_n^t \bar{\mathbf{y}}$ devolve a soma dos elementos do vector dessas observações, $\bar{\mathbf{y}}$). Assim, também na regressão linear múltipla, valores observados de Y e correspondentes valores ajustados partilham o mesmo valor médio.

5. (a) A matriz de projecção ortogonal $\mathbf{P} = \vec{\mathbf{1}}_n (\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} \vec{\mathbf{1}}_n^t$ é de dimensão $n \times n$ (confirme!), uma vez que o vector $\vec{\mathbf{1}}_n$ é $n \times 1$. Mas o seu cálculo é facilitado pelo facto de que $\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n$ é, neste caso, um escalar. Concretamente, $\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n = n$, pelo que $(\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} = \frac{1}{n}$. Logo $\mathbf{P} = \frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n \vec{\mathbf{1}}_n^t$. O produto $\vec{\mathbf{1}}_n \vec{\mathbf{1}}_n^t$ resulta numa matriz $n \times n$ com todos os elementos iguais a 1 (não confundir com o produto pela ordem inversa, $\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n$: recorde-se que o produto de matrizes **não** é comutativo). Assim,

$$\mathbf{P} = \frac{1}{n} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

- (b) Tem-se $\mathbf{P}^t = \left[\frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n \vec{\mathbf{1}}_n^t \right]^t = \frac{1}{n} [\vec{\mathbf{1}}_n^t]^t [\vec{\mathbf{1}}_n]^t = \frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n \vec{\mathbf{1}}_n^t = \mathbf{P}$, logo \mathbf{P} é simétrica. Por outro lado, $\mathbf{P}\mathbf{P} = \vec{\mathbf{1}}_n (\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} \vec{\mathbf{1}}_n^t \cdot \vec{\mathbf{1}}_n (\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} \vec{\mathbf{1}}_n^t = \vec{\mathbf{1}}_n (\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} \vec{\mathbf{1}}_n^t = \mathbf{P}$, logo \mathbf{P} é idempotente.
- (c) A projecção ortogonal do vector $\bar{\mathbf{x}} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ (cujos elementos serão por nós encarados como n observações duma variável X) sobre o subespaço gerado pelo vector dos uns $\vec{\mathbf{1}}_n$

é:

$$\mathbf{P}\vec{x} = \frac{1}{n} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{x} \\ \bar{x} \\ \vdots \\ \bar{x} \end{bmatrix} = \bar{x} \cdot \vec{\mathbf{1}}_n$$

onde $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ é a média dos valores do vector \vec{x} . Ou seja, o vector projectado é um múltiplo escalar do vector dos uns (como são todos os vectores que pertencem a $\mathcal{C}(\vec{\mathbf{1}}_n)$, uma vez que as combinações lineares dum qualquer vector são sempre múltiplos escalares desse vector). Mas a constante de multiplicação desse vector projectado tem significado estatístico: é a média dos valores do vector \vec{x} .

- (d) É característico da matriz identidade \mathbf{I} que, para qualquer vector \vec{x} se tem $\mathbf{I}\vec{x} = \vec{x}$. Logo, tendo em conta o resultado da alínea anterior, tem-se:

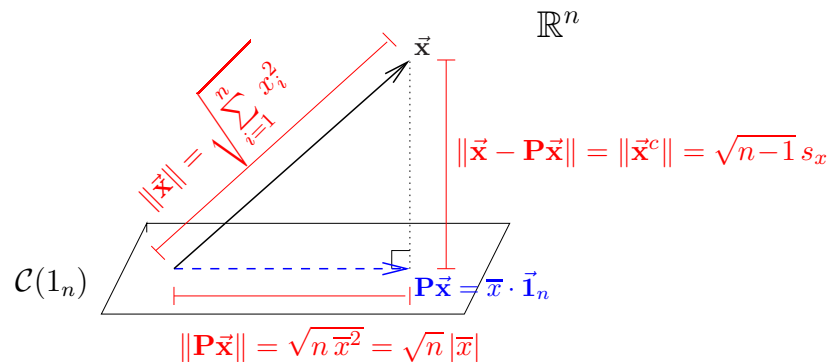
$$(\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{x} = \mathbf{I}\vec{x} - \mathbf{P}\vec{x} = \vec{x} - \mathbf{P}\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{x} \\ \bar{x} \\ \vdots \\ \bar{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 - \bar{x} \\ x_2 - \bar{x} \\ x_3 - \bar{x} \\ \vdots \\ x_n - \bar{x} \end{bmatrix} = \vec{x}^c$$

- (e) A norma do vector \vec{x}^c é, por definição, a raiz quadrada da soma dos quadrados dos seus elementos. Logo, tendo em conta a natureza dos elementos do vector \vec{x}^c (ver a alínea anterior), tem-se:

$$\|\vec{x}^c\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \sqrt{(n-1) s_x^2} = \sqrt{n-1} s_x,$$

ou seja, a norma é proporcional ao desvio padrão s_x dos valores do vector \vec{x} (sendo a constante de proporcionalidade $\sqrt{n-1}$).

- (f) A situação considerada nas alíneas anteriores tem a seguinte representação gráfica:



Nota: O subespaço $\mathcal{C}(\vec{\mathbf{1}}_n)$ é gerado por um único vector, $\vec{\mathbf{1}}_n$, pelo que em termos geométricos é uma linha recta que atravessa a origem (um subespaço de dimensão 1). Esse subespaço foi representado aqui por um plano para manter coerência com as representações gráficas usadas nas Teóricas, salientando que se trata do mesmo conceito de projecções ortogonais.

Aplicando o Teorema de Pitágoras ao triângulo rectângulo indicado, tem-se:

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 = (n-1)s_x^2 + n\bar{x}^2 \Leftrightarrow s_x^2 = \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2 \right),$$

que é a fórmula computacional da variância dada na disciplina de Estatística dos primeiros ciclos do ISA.

6. (a) Note-se que a matriz $\mathbf{P}_{\mathbf{I}_n}$ referida neste exercício (e que será representada apenas por \mathbf{P} no que se segue) é a mesma que foi discutida no Exercício 5. Assim, o vector $\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}}$ é o vector centrado das observações de $\vec{\mathbf{Y}}$:

$$\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} Y_1 - \bar{Y} \\ Y_2 - \bar{Y} \\ Y_3 - \bar{Y} \\ \vdots \\ Y_n - \bar{Y} \end{bmatrix} = \vec{\mathbf{Y}}^c$$

A norma ao quadrado dum qualquer vector $\vec{\mathbf{z}} = (z_1, z_2, \dots, z_n)^t$ pode ser escrita de duas formas equivalentes: por um lado, $\|\vec{\mathbf{z}}\|^2 = \sum_{i=1}^n z_i^2$, e por outro, $\|\vec{\mathbf{z}}\|^2 = \vec{\mathbf{z}}^t \vec{\mathbf{z}}$. Assim, tem-se

$\|\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 = SQT$. Tendo em conta as propriedades relativas a matrizes, incluindo a simetria e idempotência das matrizes \mathbf{I} (de verificação trivial) e \mathbf{P} (ver Exercício 5), tem-se também:

$$\begin{aligned} SQT &= \|\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = [(\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}}]^t (\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t (\mathbf{I} - \mathbf{P})^t (\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t (\mathbf{I}^t - \mathbf{P}^t) (\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t (\mathbf{I} - \mathbf{P}) (\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t (\mathbf{I}^2 - \mathbf{I}\mathbf{P} - \mathbf{P}\mathbf{I} + \mathbf{P}^2)\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t (\mathbf{I} - \mathbf{P} - \mathbf{P} + \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t (\mathbf{I} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \end{aligned}$$

De forma análoga, e como o vector $\vec{\mathbf{Y}}$ dos valores ajustados é dado por $\vec{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\vec{\beta} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\mathbf{Y}} = \mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}}$, temos que o vector $\mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}}$ tem como elementos $\hat{Y}_i - \bar{Y}$:

$$\mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} \hat{Y}_1 - \bar{Y} \\ \hat{Y}_2 - \bar{Y} \\ \hat{Y}_3 - \bar{Y} \\ \vdots \\ \hat{Y}_n - \bar{Y} \end{bmatrix}$$

pelo que o quadrado da sua norma é $SQR = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$.

Uma expressão alternativa para SQR resulta de considerar (como no caso de SQT) a definição duma norma ao quadrado, e usar as propriedades de matrizes, incluindo a simetria e idempotência de \mathbf{P} e da matriz \mathbf{H} (ver Exercício 4), bem como a propriedade $\mathbf{H}\mathbf{P} = \mathbf{P}\mathbf{H} = \mathbf{P}$. Esta última passagem resulta do facto de $\mathbf{P} = \mathbf{I}_n (\mathbf{I}_n^t \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{I}_n^t$, pelo que $\mathbf{H}\mathbf{P} = \mathbf{H}\mathbf{I}_n (\mathbf{I}_n^t \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{I}_n^t$. Mas, como se viu no Exercício 4, a projecção dum vector sobre

um subespaço ao qual esse vector pertence, deixa o vector invariante. Ora \mathbf{H} projecta ortogonalmente sobre o espaço das colunas da matriz \mathbf{X} , $\mathcal{C}(\mathbf{X})$, e o vector $\vec{\mathbf{1}}_n$ pertence a esse subespaço, uma vez que é a primeira coluna da matriz \mathbf{X} . Logo, $\mathbf{H}\vec{\mathbf{1}}_n = \vec{\mathbf{1}}_n$, pelo que $\mathbf{HP} = \mathbf{H}\vec{\mathbf{1}}_n(\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} \vec{\mathbf{1}}_n^t = \vec{\mathbf{1}}_n(\vec{\mathbf{1}}_n^t \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1} \vec{\mathbf{1}}_n^t = \mathbf{P}$. Por outro lado, a simetria de \mathbf{P} (e de \mathbf{H}) implica que $\mathbf{P} = \mathbf{P}^t = (\mathbf{HP})^t = \mathbf{P}^t \mathbf{H}^t = \mathbf{PH}$. Logo,

$$\begin{aligned} SQR &= \|\mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{P}\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = \|(\mathbf{H} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H} - \mathbf{P})^t(\mathbf{H} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H}^t - \mathbf{P}^t)(\mathbf{H} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H} - \mathbf{P})(\mathbf{H} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H}^2 - \mathbf{HP} - \mathbf{PH} + \mathbf{P}^2)\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H} - \mathbf{P} - \mathbf{P} + \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}}. \end{aligned}$$

Finalmente, o vector $\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}} - \vec{\mathbf{Y}}$ é o vector dos resíduos, e a sua norma ao quadrado é $SQRE = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$. Mas, ao mesmo tempo, tem-se:

$$\begin{aligned} SQRE &= \|\vec{\mathbf{Y}} - \mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}}\|^2 = \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I} - \mathbf{H})^t(\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I}^t - \mathbf{H}^t)(\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I} - \mathbf{H})(\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I}^2 - \mathbf{IH} - \mathbf{HI} + \mathbf{H}^2)\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I} - \mathbf{H} - \mathbf{H} + \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}}. \end{aligned}$$

(b) Dadas as expressões obtidas na alínea anterior, tem-se (pondo em evidência $\vec{\mathbf{Y}}^t$ à esquerda e $\vec{\mathbf{Y}}$ à direita),

$$\begin{aligned} SQRE + SQR &= \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{I} - \mathbf{H})\vec{\mathbf{Y}} + \vec{\mathbf{Y}}^t(\mathbf{H} - \mathbf{P})\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{Y}}^t[(\mathbf{I} - \mathbf{H}) + (\mathbf{H} - \mathbf{P})]\vec{\mathbf{Y}} \\ &= \vec{\mathbf{Y}}^t[\mathbf{I} - \mathbf{P}]\vec{\mathbf{Y}} = SQT. \end{aligned}$$

7. Seja $\vec{\mathbf{W}} = (W_1, W_2, \dots, W_k)^t$. Tendo em conta a definição de vector esperado e de matriz de variâncias-covariâncias, bem como as propriedades dos valores esperados, variâncias e covariâncias de variáveis aleatórias (unidimensionais) tem-se:

(a)

$$E[\alpha \vec{\mathbf{W}}] = \begin{bmatrix} E[\alpha W_1] \\ E[\alpha W_2] \\ \vdots \\ E[\alpha W_k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha E[W_1] \\ \alpha E[W_2] \\ \vdots \\ \alpha E[W_k] \end{bmatrix} = \alpha E[\vec{\mathbf{W}}].$$

(b)

$$E[\vec{\mathbf{W}} + \vec{\mathbf{a}}] = \begin{bmatrix} E[W_1 + a_1] \\ E[W_2 + a_2] \\ \vdots \\ E[W_k + a_k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E[W_1] + a_1 \\ E[W_2] + a_2 \\ \vdots \\ E[W_k] + a_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E[W_1] \\ E[W_2] \\ \vdots \\ E[W_k] \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_k \end{bmatrix} = E[\vec{\mathbf{W}}] + \vec{\mathbf{a}}.$$

(c)

$$\begin{aligned} V[\alpha \vec{W}] &= \begin{bmatrix} V[\alpha W_1] & Cov[\alpha W_1, \alpha W_2] & \cdots & Cov[\alpha W_1, \alpha W_k] \\ Cov[\alpha W_2, \alpha W_1] & V[\alpha W_2] & \cdots & Cov[\alpha W_2, \alpha W_k] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Cov[\alpha W_k, \alpha W_1] & Cov[\alpha W_k, \alpha W_2] & \cdots & V[\alpha W_k] \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \alpha^2 V[W_1] & \alpha^2 Cov[W_1, W_2] & \cdots & \alpha^2 Cov[W_1, W_k] \\ \alpha^2 Cov[W_2, W_1] & \alpha^2 V[W_2] & \cdots & \alpha^2 Cov[W_2, W_k] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha^2 Cov[W_k, W_1] & \alpha^2 Cov[W_k, W_2] & \cdots & \alpha^2 V[W_k] \end{bmatrix} = \alpha^2 V[\vec{W}] \end{aligned}$$

(d)

$$\begin{aligned} V[\vec{W} + \vec{a}] &= \begin{bmatrix} V[W_1 + a_1] & Cov[W_1 + a_1, W_2 + a_2] & \cdots & Cov[W_1 + a_1, W_k + a_k] \\ Cov[W_2 + a_2, W_1 + a_1] & V[W_2 + a_2] & \cdots & Cov[W_2 + a_2, W_k + a_k] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Cov[W_k + a_k, W_1 + a_1] & Cov[W_k + a_k, W_2 + a_2] & \cdots & V[W_k + a_k] \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} V[W_1] & Cov[W_1, W_2] & \cdots & Cov[W_1, W_k] \\ Cov[W_2, W_1] & V[W_2] & \cdots & Cov[W_2, W_k] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Cov[W_k, W_1] & Cov[W_k, W_2] & \cdots & V[W_k] \end{bmatrix} = V[\vec{W}] \end{aligned}$$

(e)

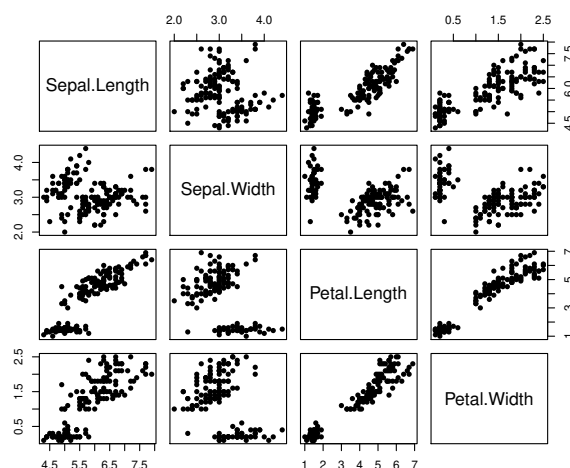
$$E[\vec{W} + \vec{U}] = \begin{bmatrix} E[W_1 + U_1] \\ E[W_2 + U_2] \\ \vdots \\ E[W_k + U_k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E[W_1] + E[U_1] \\ E[W_2] + E[U_2] \\ \vdots \\ E[W_k] + E[U_k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E[W_1] \\ E[W_2] \\ \vdots \\ E[W_k] \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} E[U_1] \\ E[U_2] \\ \vdots \\ E[U_k] \end{bmatrix} = E[\vec{W}] + E[\vec{U}].$$

8. Trata-se dum conjunto de dados utilizado para ilustrar vários acetatos das aulas teóricas. Algumas alíneas desta pergunta encontram-se resolvidas nesses acetatos.

A *data frame iris* tem, na sua quinta e última coluna, o factor com o nome da espécie de lírio a que cada observação diz respeito. Neste exercício essa informação não é utilizada.

(a) O comando a usar no R para produzir as nuvens de pontos pedidas é:

```
> plot(iris[, -5], pch=16)
```



A relação linear da variável resposta `Petal.Width` com o preditor `Petal.Length` é (como sabemos do estudo deste conjunto de dados nos exercícios de regressão linear simples) bastante forte. Não parece existir uma relação linear tão forte da largura da pétala com qualquer das medições relativas às sépalas (embora a relação linear com o comprimento das sépalas não seja de desprezar). Isso não significa, só por si, que a introdução desses dois novos preditores não possa melhorar consideravelmente o ajustamento.

(b) Tem-se:

```
> iris2.lm <- lm(Petal.Width ~ Petal.Length + Sepal.Length + Sepal.Width , data=iris)
> iris2.lm
(...)
Coefficients:
 (Intercept) Petal.Length Sepal.Length Sepal.Width
      -0.2403      0.5241      -0.2073      0.2228

> summary(iris2.lm)
(...)
Multiple R-squared: 0.9379
(...)
```

Assim, o hiperplano ajustado tem equação $y = -0.2403 + 0.5241 x_1 - 0.2073 x_2 + 0.2228 x_3$, onde y indica a largura da pétala, x_1 indica o respectivo comprimento, x_2 indica o comprimento da sépala e x_3 a respectiva largura.

Já sabíamos (Exercícios 8 e 14 da RLS) que o coeficiente de determinação da regressão linear simples da largura das pétalas sobre o seu comprimento era $R^2 = 0.9271$. O novo valor $R^2 = 0.9379$ é superior, como teria de obrigatoriamente ser num modelo em que se acrescentaram preditores, mas não muito superior. Trata-se, de qualquer forma, dum valor muito elevado, sugerindo que se trata dum bom modelo linear.

(c) Qualquer coeficiente ajustado b_j , associado a uma variável preditora X_j , pode ser interpretado como a variação média na variável resposta Y , correspondente a aumentar X_j em uma unidade e mantendo os restantes preditores constantes. Assim, e tendo em conta os valores de b_1 , b_2 e b_3 obtidos na alínea anterior, a variação média na largura da pétala dum lírio, mantendo as restantes variáveis constantes, será:

- um acréscimo de 0.5241 cm por cada 1 cm a mais no comprimento da pétala;

- um decréscimo de 0.2073 cm por cada 1 cm a mais no comprimento da sépala;
- um acréscimo de 0.2228 cm por cada 1 cm a mais na largura da sépala.

Em relação à constante aditiva $b_0 = -0.2403$, trata-se dum valor que neste exercício tem pouco interesse prático. Interpreta-se da seguinte forma: num lírio com comprimento de pétala nulo, e largura e comprimento de sépala igualmente nulos, a largura média da pétala seria -0.2403 cm. A impossibilidade física deste valor sublinha que não faria sentido tentar aplicar este modelo a esse conjunto de valores nulos dos preditores, não apenas porque se trata de valores fora da gama de valores observados no ajustamento do modelo, mas sobretudo porque não faria sentido tentar utilizar este modelo para essa situação biologicamente impossível. Neste caso, deve pensar-se no valor de b_0 apenas como um auxiliar para obter um melhor ajustamento do modelo na região de valores que foram efectivamente observados.

- (d) Olhando novamente para a nuvem de pontos de `Petal.Width` contra `Sepal.Length`, verificamos a existência duma relação linear crescente (embora não muito forte). Como tal, a recta de regressão ajustada de largura da pétala sobre comprimento da sépala terá de ter um declive positivo. No entanto, o coeficiente associado ao preditor `Sepal.Length` na regressão linear múltipla agora ajustada é negativo: $b_2 = -0.2073$. Não se trata duma contradição. O modelo de regressão linear múltipla contém, além do preditor comprimento da sépala, outros dois preditores (largura da sépala e comprimento da pétala), que contribuem para a formação do valor ajustado de y . Na presença desses dois preditores, a contribuição do comprimento da sépala deve ter um sinal negativo. Esta aparente contradição sublinha uma ideia importante: *a introdução (ou retirada) de preditores numa regressão linear têm efeitos sobre todos os parâmetros, não sendo possível prever qual será a equação ajustada sem refazer as contas do ajustamento*. Em particular, repare-se que, embora a equação ajustada com os três preditores seja $PW = -0.2403 + 0.5241 PL - 0.2073 SL + 0.2228 SW$ (sendo as variáveis indicadas pelas iniciais dos seus nomes na *data frame iris*), *não é verdade* que a recta de regressão, apenas com o preditor comprimento da sépala, tenha equação $PW = -0.2403 - 0.2073 SL$ (nem tal faria sentido, pois desta forma todas as larguras de pétala ajustadas seriam negativas!). Ajustando directamente a regressão linear simples de largura da pétala sobre comprimento da sépala verifica-se que essa equação é bastante diferente: $PW = -3.2002 + 0.7529SL$.
- (e) Sabemos que a expressão genérica para os IC a $(1 - \alpha) \times 100\%$ para qualquer parâmetro β_j ($j = 0, 1, 2, \dots, p$) é:

$$\left[b_j - t_{\alpha/2[n-(p+1)]} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j} \quad , \quad b_j + t_{\alpha/2[n-(p+1)]} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j} \quad \right] .$$

Os valores estimados b_j e os erros padrões associados, $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j}$, obtêm-se a partir das primeira e segunda colunas da tabela do ajustamento produzida pelo R:

```
> summary(iris2.lm)
(...)
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -0.24031    0.17837  -1.347    0.18
Petal.Length  0.52408    0.02449  21.399 < 2e-16 ***
Sepal.Length -0.20727    0.04751  -4.363 2.41e-05 ***
Sepal.Width   0.22283    0.04894   4.553 1.10e-05 ***
---
Residual standard error: 0.192 on 146 degrees of freedom
```

Multiple R-squared: 0.9379, Adjusted R-squared: 0.9366
F-statistic: 734.4 on 3 and 146 DF, p-value: < 2.2e-16

Para intervalos de confiança a 95% precisamos do valor $t_{0.025(146)} = 1.976346$. Assim, o intervalo de confiança para β_1 é dado por:

$$] 0.52408 - 1.976346 \times 0.02449, 0.52408 + 1.976346 \times 0.02449 [=] 0.4756793, 0.5724807 [.$$

Analogamente, o intervalo a 95% de confiança para β_2 é dado por:

$$] -0.20727 - 1.976346 \times 0.04751, -0.20727 + 1.976346 \times 0.04751 [=] -0.3011662, -0.1133738 [.$$

Finalmente, o intervalo a 95% de confiança para β_3 é dado por:

$$] 0.22283 - 1.976346 \times 0.04894, 0.22283 + 1.976346 \times 0.04894 [=] 0.1261076, 0.3195524 [.$$

Com o auxílio do comando `confint` do R, podemos obter estes intervalos de confiança numa só assentada (as pequenas diferenças devem-se aos arredondamentos usados acima):

```
> confint(iris2.lm)
              2.5 %      97.5 %
(Intercept) -0.5928277  0.1122129
Petal.Length  0.4756798  0.5724865
Sepal.Length -0.3011547 -0.1133775
Sepal.Width   0.1261101  0.3195470
```

Trata-se, no geral, de intervalos razoavelmente precisos (de pequena amplitude), para 95% de confiança. A interpretação do primeiro destes intervalos faz-se da seguinte forma: temos 95% de confiança em como o verdadeiro valor de β_1 está compreendido entre 0.4757 e 0.5725. Os outros dois intervalos interpretam-se de forma análoga.

- (f) A frase do enunciado traduz-se por: “teste se é admissível considerar que $\beta_2 < 0$ ”. Trata-se dum teste de hipóteses do tipo unilateral. Coloca-se a questão de saber se damos, ou não, o benefício da dúvida a esta hipótese. Se optarmos por exigir o ónus da prova a esta hipótese, teremos o seguinte teste:

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 \geq 0$ vs. $H_1 : \beta_2 < 0$

Estatística do Teste: $T = \frac{\hat{\beta}_2 - 0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} \cap t_{(n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica: (Unilateral esquerda) Rejeitar H_0 se $T_{\text{calc}} < -t_{0.05(146)} \approx -1.6554$.

Conclusões: Tem-se $T_{\text{calc}} = \frac{b_2 - 0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} = \frac{-0.20727 - 0}{0.04751} = -4.363 < -1.6554$. Assim, rejeita-se a hipótese nula (apesar de ter o benefício da dúvida) em favor de H_1 , ao nível de significância de 0.05, isto é, existe evidência experimental para considerar que a largura média das pétalas diminui, quando se aumenta o comprimento das sépalas, mantendo o comprimento das pétalas e largura das sépalas constantes.

Duas notas sobre o teste acabado de efectuar:

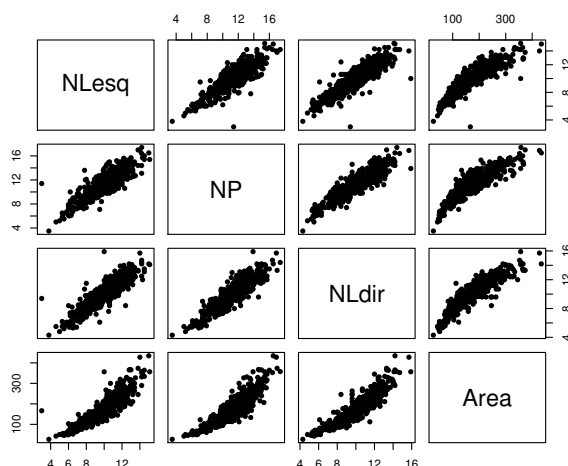
- Como o valor estimado de β_2 é negativo ($b_2 = -0.20727$) caso se tivesse dado o benefício da dúvida à hipótese $\beta_2 < 0$, nunca se poderia rejeitar essa hipótese;
- o valor da estatística é o indicado na terceira coluna da tabela produzida pelo R, mas o respectivo valor de prova não o é, uma vez que o *p-value* indicado na tabela corresponde a um teste bilateral. Para um teste unilateral esquerdo como o nosso, o valor de prova correspondente é dado por $p = P[t_{146} < -4.363] \approx 1.206 \times 10^{-5}$. Este valor é metade do *p-value* indicado na tabela.

9. Na *data frame* `videiras`, a primeira coluna indica a casta, pelo que não será de utilidade neste exercício.

(a) O comando para construir as nuvens de pontos pedidas é:

```
> plot(videiras[,-1], pch=16)
```

produzindo os seguintes gráficos:



Como se pode verificar, existem fortes relações lineares entre qualquer par de variáveis, o que deixa antever que uma regressão linear múltipla de área foliar sobre vários preditores venha a ter um coeficiente de determinação elevado. No entanto, nos gráficos que envolvem a variável área, existe alguma evidência de uma ligeira curvatura nas relações com cada comprimento de nervura individual.

(b) Tem-se:

```
> cor(videiras[,-1])
           NLesq      NP      NLdir      Area
NLesq  1.0000000  0.8788588  0.8870132  0.8902402
NP      0.8788588  1.0000000  0.8993985  0.8945700
NLdir  0.8870132  0.8993985  1.0000000  0.8993676
Area   0.8902402  0.8945700  0.8993676  1.0000000
```

Os valores das correlações entre pares de variáveis são todos positivos e bastante elevados, o que confirma as fortes relações lineares evidenciadas nos gráficos.

(c) Existem n observações $\{(x_{1(i)}, x_{2(i)}, x_{3(i)}, Y_i)\}_{i=1}^n$ nas quatro variáveis: a variável resposta área foliar (`Area`, variável aleatória Y) e as três variáveis predictoras, associadas aos comprimentos de três nervuras da folha - a principal (variável `NP`, X_1), a lateral esquerda (variável `NLesq`, X_2) e a lateral direita (variável `NLdir`, X_3). Para essas n observações admite-se que:

- A relação de fundo entre Y e os três preditores é linear, com variabilidade adicional dada por uma parcela aditiva ϵ_i chamada erro aleatório:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1(i)} + \beta_2 x_{2(i)} + \beta_3 x_{3(i)} + \epsilon_i$$
, para qualquer $i = 1, 2, \dots, n$;
- os erros aleatórios têm distribuição Normal, de média zero e variância constante:

$$\epsilon_i \cap \mathcal{N}(0, \sigma^2), \forall i$$
;
- Os erros aleatórios $\{\epsilon_i\}_{i=1}^n$ são variáveis aleatórias independentes.

(d) O comando do R que efectua o ajustamento pedido é o seguinte:

```
> videiras.lm <- lm(Area ~ NP + NLesq + MLdir, data=videiras)
> summary(videiras.lm)
(...)
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -168.111      5.619  -29.919 < 2e-16 ***
NP              9.987       1.192   8.380 3.8e-16 ***
NLesq          11.078       1.256   8.817 < 2e-16 ***
MLdir          11.895       1.370   8.683 < 2e-16 ***
---
Residual standard error: 24.76 on 596 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8649, Adjusted R-squared: 0.8642
F-statistic: 1272 on 3 and 596 DF, p-value: < 2.2e-16
```

A equação do hiperplano ajustado é assim

$$\text{Area} = -168.111 + 9.987 NP + 11.078 NLesq + 11.895 MLdir$$

O valor do coeficiente de determinação é bastante elevado: cerca de 86,49% da variabilidade total nas áreas foliares é explicada por esta regressão linear sobre os comprimentos das três nervuras. Nenhum dos preditores é dispensável sem perda significativa da qualidade do modelo, uma vez que o valor de prova (*p-value*) associado aos três testes de hipóteses $H_0 : \beta_j = 0$ vs. $H_1 : \beta_j \neq 0$ ($j = 1, 2, 3$) são todos muito pequenos.

O teste de ajustamento global do modelo pode ser formulado assim:

Hipóteses: $H_0 : \mathcal{R}^2 = 0$ vs. $H_1 : \mathcal{R}^2 > 0$.

Estatística do teste: $F = \frac{QMR}{QMRE} = \frac{n-(p+1)}{p} \frac{R^2}{1-R^2} \cap F_{(p,n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Unilateral direita): Rej. H_0 se $F_{calc} > f_{\alpha(p,n-(p+1))} = f_{0.05(3,596)} \approx 2.62$.

Conclusões: O valor calculado da estatística é dado na listagem produzida pelo R ($F_{calc} = 1272$). Logo, rejeita-se (de forma muito clara) a hipótese nula, que corresponde à hipótese dum modelo inútil. Esta conclusão também resulta directamente da análise do valor de prova (*p-value*) associado à estatística de teste calculada: $p < 2.2 \times 10^{-16}$ corresponde a uma rejeição para qualquer nível de significância usual. Esta conclusão é coerente com o valor bastante elevado de R^2 .

(e) São pedidos testes envolvendo a hipótese $\beta_1 = 7$ (não sendo especificada a outra hipótese, deduz-se que seja o complementar $\beta_1 \neq 7$). A hipótese $\beta_1 = 7$ é uma hipótese simples (um único valor do parâmetro β_1), que terá de ser colocada na hipótese nula e à qual corresponderá um teste bilateral.

Hipóteses: $H_0 : \beta_1 = 7$ vs. $H_1 : \beta_1 \neq 7$

Estatística do Teste: $T = \frac{\hat{\beta}_1 - 7}{\hat{\sigma}_{\beta_1}} \cap t_{(n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.01$.

Região Crítica: (Bilateral) Rejeitar H_0 se $|T_{calc}| > t_{0.005(596)} \approx 2.584$.

Conclusões: Tem-se $T_{calc} = \frac{b_1 - 0}{\hat{\sigma}_{\beta_1}} = \frac{9.987 - 7}{1.192} = 2.506 < 2.584$. Assim, não se rejeita a hipótese nula (que tem o benefício da dúvida), ao nível de significância de 0.01.

Se repetirmos o teste, mas agora utilizando um nível de significância $\alpha = 0.05$, apenas a fronteira da região crítica virá diferente. Agora, a regra de rejeição será: rejeitar H_0 se $|T_{calc}| > t_{0.025(596)} \approx 1.9640$. O valor da estatística de teste não se altera

($T_{\text{calc}} = 2.506$), mas este valor pertence agora à região crítica, pelo que ao nível de significância $\alpha = 0.05$ rejeitamos a hipótese formulada, optando antes por $H_1 : \beta_1 \neq 7$. Este exercício ilustra a importância de especificar sempre o nível de significância associado às conclusões do teste.

- (f) É pedido um teste à igualdade de dois coeficientes do modelo, concretamente $\beta_2 = \beta_3 \Leftrightarrow \beta_2 - \beta_3 = 0$. Trata-se dum teste à diferença de dois parâmetros, que como foi visto nas aulas teóricas, é um caso particular dum teste a uma combinação linear dos parâmetros do modelo. Mais em pormenor, tem-se:

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 - \beta_3 = 0$ vs. $H_1 : \beta_2 - \beta_3 \neq 0$

Estatística do Teste: $T = \frac{(\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3) - 0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3}} \cap t_{(n-(p+1))}$, sob H_0

Nível de significância: $\alpha = 0.05$

Região Crítica: (Bilateral) Rejeitar H_0 se $|T_{\text{calc}}| > t_{\alpha/2 (n-(p+1))}$

Conclusões: Conhecem-se as estimativas $b_2 = 11.078$ e $b_3 = 11.895$, mas precisamos ainda de conhecer o valor do erro padrão associado à estimação de $\beta_2 - \beta_3$ que, como foi visto

nas aulas teóricas, é dado por $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3} = \sqrt{\hat{V}[\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3]} = \sqrt{\hat{V}[\hat{\beta}_2] + \hat{V}[\hat{\beta}_3] - 2\widehat{Cov}[\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3]}$.

Assim, precisamos de conhecer as variâncias estimadas de $\hat{\beta}_2$ e $\hat{\beta}_3$, bem como a covariância estimada $\widehat{cov}[\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3]$, valores estes que surgem na matriz de (co)variâncias do estimador $\hat{\beta}$, que é estimada por $\hat{V}[\hat{\beta}] = QMRE(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}$. Esta matriz pode ser calculada no R da seguinte forma:

```
> vcov(videiras.lm)
              (Intercept)      NP      NLesq      NLdir
(Intercept) 31.5707574 -1.0141321 -1.0164689 -0.9051648
NP           -1.0141321  1.4200928 -0.6014279 -0.8880395
NLesq       -1.0164689 -0.6014279  1.5784886 -0.7969373
NLdir       -0.9051648 -0.8880395 -0.7969373  1.8764582
```

Assim,

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3} &= \sqrt{\hat{V}[\hat{\beta}_2] + \hat{V}[\hat{\beta}_3] - 2\widehat{Cov}[\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3]} \\ &= \sqrt{1.5784886 + 1.8764582 - 2 \times (-0.7969373)} = \sqrt{5.048821} = 2.246958,\end{aligned}$$

pelo que $T_{\text{calc}} = \frac{11.078 - 11.895}{2.246958} = -0.3636027$. Como $|T_{\text{calc}}| < t_{0.025(596)} \approx 1.9640$, não se rejeita H_0 ao nível de significância de 0.05, isto é, admite-se que $\beta_2 = \beta_3$. No contexto do problema, não se rejeitou a hipótese que a variação média provocada na área foliar seja igual, quer se aumente a nervura lateral esquerda ou a nervura lateral direita em 1cm (mantendo as restantes nervuras de igual comprimento).

- (g) i. Substituindo na equação do hiperplano ajustado, obtido na alínea 9d, obtêm-se os seguintes valores estimados:

- *Folha 1:* $\widehat{Area} = -168.111 + 9.987 \times 12.1 + 11.078 \times 11.6 + 11.895 \times 11.9 = 222.787 \text{ cm}^2$;
- *Folha 2:* $\widehat{Area} = -168.111 + 9.987 \times 10.6 + 11.078 \times 10.1 + 11.895 \times 9.9 = 167.3995 \text{ cm}^2$;
- *Folha 3:* $\widehat{Area} = -168.111 + 9.987 \times 15.1 + 11.078 \times 14.9 + 11.895 \times 14.0 = 314.2849 \text{ cm}^2$;

Com recurso ao comando `predict` do R, estas três áreas ajustadas obtêm-se da seguinte forma:

```
> predict(videiras.lm, new=data.frame(NP=c(12.1,10.6,15.1), NLesq=c(11.6,10.1,14.9),
+                                     NLdir=c(11.9, 9.9, 14.0)))
      1      2      3
222.7762 167.3903 314.2715
```

Novamente, algumas pequenas discrepâncias nas casas decimais finais resultam de erros de arredondamento.

- ii. Estes intervalos de confiança para $\mu_{Y|X} = E[Y|X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3]$ (com os valores de x_1 , x_2 e x_3 indicados no enunciado, para cada uma das três folhas) obtêm-se subtraindo e somando aos valores ajustados obtidos na sublinha anterior a semi-amplitude do IC, dada por $t_{\alpha/2(n-(p+1))} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\mu}_{Y|X}}$, sendo $\hat{\sigma}_{\hat{\mu}_{Y|X}} = \sqrt{QMRE \cdot \vec{\mathbf{a}}^t (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \vec{\mathbf{a}}}$ onde os vectores $\vec{\mathbf{a}}$ são os vectores da forma $\vec{\mathbf{a}} = (1, x_1, x_2, x_3)$. Estas contas, algo trabalhosas, resultam fáceis recorrendo de novo ao comando `predict` do R, mas desta vez com o argumento `int="conf"`, como indicado de seguida:

```
> predict(videiras.lm, new=data.frame(NP=c(12.1,10.6,15.1),NLesq=c(11.6,10.1,14.9),
+                                     NLdir=c(11.9, 9.9, 14.0)), int="conf")
      fit      lwr      upr
1 222.7762 219.1776 226.3747
2 167.3903 164.9215 169.8590
3 314.2715 308.4607 320.0823
```

Assim, tem-se para cada folha, os seguintes intervalos a 95% de confiança para $\mu_{Y|X}$:

- *Folha 1:*] 219.1776 , 226.3747 [;
- *Folha 2:*] 164.9215 , 169.8590 [;
- *Folha 3:*] 308.4607 , 320.0823 [.

Repare-se como a amplitude de cada intervalo é diferente, uma vez que depende de informação específica para cada folha (dada pelo vector $\vec{\mathbf{a}}$ dos valores dos preditores).

- iii. Sabemos que os intervalos de predição têm uma forma análoga aos intervalos de confiança para $E[Y|X]$, mas com uma maior amplitude, associada à variabilidade adicional de observações individuais, a que corresponde $\hat{\sigma}_{indiv} = \sqrt{QMRE \cdot [1 + \vec{\mathbf{a}}^t (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \vec{\mathbf{a}}]}$. De novo, recorreremos ao comando `predict`, desta vez com o argumento `int="pred"`:

```
> predict(videiras.lm, new=data.frame(NP=c(12.1,10.6,15.1),NLesq=c(11.6,10.1,14.9),
+                                     NLdir=c(11.9, 9.9, 14.0)), int="pred")
      fit      lwr      upr
1 222.7762 174.0206 271.5318
2 167.3903 118.7050 216.0755
3 314.2715 265.3029 363.2401
```

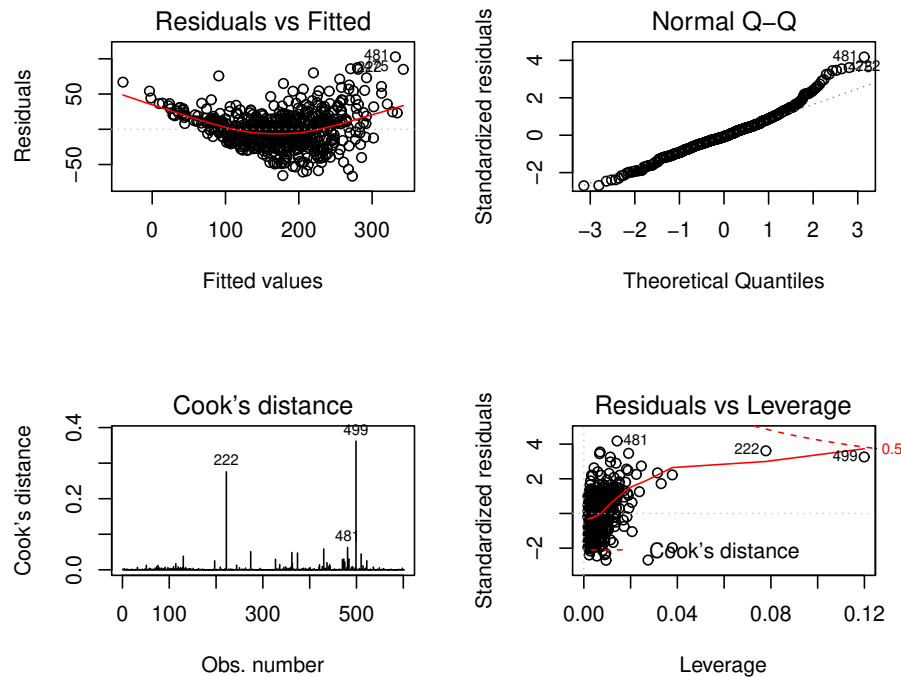
Assim, têm-se os seguintes intervalos de predição a 95% para os três valores de Y :

- *Folha 1:*] 174.0206 , 271.5318 [;
- *Folha 2:*] 118.7050 , 216.0755 [;
- *Folha 3:*] 265.3029 , 363.2401 [.

A amplitude bastante maior destes intervalos reflecte um valor elevado do Quadrado Médio Residual, que estima a variabilidade das observações individuais de Y em torno do hiperplano.

- (h) Recorreremos de novo ao R para construir os gráficos de resíduos. O primeiro dos dois comandos seguintes destina-se a dividir a janela gráfica numa espécie de matriz 2×2 :

```
> par(mfrow=c(2,2))
> plot(videiras.lm, which=c(1,2,4,5))
```



O gráfico do canto superior esquerdo é o gráfico dos resíduos usuais (e_i) vs. valores ajustados (\hat{y}_i). Neste gráfico são visíveis dois problemas: uma tendência para a curvatura (já detectado nos gráficos da variável resposta contra cada preditor individual), que indica que o modelo linear pode não ser a melhor forma de relacionar área foliar com os comprimentos das nervuras; e uma forma em funil que sugere que a hipótese de homogeneidade das variâncias dos erros aleatórios pode não ser a mais adequada. Este gráfico foi usado no acetato 179 das aulas teóricas. O gráfico no canto superior direito é um *qq-plot*, de quantis empíricos vs. quantis teóricos duma Normal reduzida. A ser verdade a hipótese de Normalidade dos erros aleatórios, seria de esperar uma disposição linear dos pontos neste gráfico. É visível, sobretudo na parte direita do gráfico, um afastamento relativamente forte de muitas observações a esta linearidade, sugerindo problemas com a hipótese de Normalidade. O gráfico do canto inferior esquerdo é um diagrama de barras com as distâncias de Cook de cada observação. Embora nenhuma observação ultrapasse o limiar de guarda $D_i > 0.5$, duas observações têm um valor considerável da distância de Cook: a observação 499, com D_{499} próximo de 0.4 e a observação 222, com distância de Cook próxima de 0.3. Estas duas observações merecem especial atenção para procurar identificar as causas de tão forte influência no ajustamento. Finalmente, o gráfico do canto inferior direito relaciona resíduos (internamente) estandardizados (eixo vertical) com valor do efeito alavanca (eixo horizontal) e também com as distâncias de Cook (sendo traçadas automaticamente pelo R linhas de igual distância de Cook, para alguns valores particularmente elevados, como 0.5 ou 1). Este gráfico ilustra que as duas observações com maior distância de Cook (499 e 222) têm valores relativamente elevados, quer dos resíduos estandardizados, quer do efeito alavanca. Saliente-se que o efeito alavanca médio, neste ajustamento de $n = 600$ observações a um modelo com $p + 1 = 4$ parâmetros é $\bar{h} = \frac{4}{600} = 0.006667$ e as duas observações referidas têm os maiores efeitos alavanca das $n = 600$ observações com valores, respectivamente,

próximos de 0.12 e 0.08. Já a observação 481, igualmente identificada no gráfico, tem o maior resíduo estandardizado de qualquer observação, mas ao ter um valor relativamente discreto do efeito alavanca, acaba por não ser uma observação influente (como se pode confirmar no gráfico anterior). Este exemplo confirma que os conceitos de observação de resíduo elevado, observação influente e observação de elevado valor do efeito alavanca (*leverage*), são conceitos diferentes. Uma observação mais atenta dos valores observados nas folhas 222 e 499 revela que o seu traço mais saliente é o desequilíbrio nos comprimentos das nervuras laterais, sendo em ambos os casos a nervura lateral direita muito mais comprida do que a esquerda. Além disso, ambas as folhas têm uma das nervuras laterais de comprimento extremo: no caso da folha 222 tem-se a maior nervura lateral direita de qualquer das 600 folhas, enquanto que a folha 499 tem a mais pequena de todas as nervuras laterais esquerdas. Assim, trata-se de folhas com formas irregulares, diferentes da generalidade das folhas analisadas.

Este exercício visa chamar a atenção que *um modelo de regressão com um ajustamento bastante forte pode revelar, no estudo dos resíduos, problemas* que levantam dúvidas sobre a validade das conclusões inferenciais (testes de hipóteses, intervalos de confiança e predição) obtidas nas alíneas anteriores.

- (i) O pedido de logaritmizar previamente as variáveis envolvidas no estudo faz sentido, tendo em conta a curvilinearidade sugerida pelo gráfico de resíduos da alínea anterior (9h). Eis o resultado do ajustamento pedido:

```
> videiraslog.lm <- lm(log(Area) ~ log(NP) + log(NLesq) + log(NLdir), data=videiras)
> summary(videiraslog.lm)
```

```
Call: lm(formula = log(Area) ~ log(NP) + log(NLesq) + log(NLdir), data = videiras)
[...]
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	0.40983	0.06136	6.679	5.52e-11	***
log(NP)	0.72660	0.06574	11.052	< 2e-16	***
log(NLesq)	0.57049	0.05649	10.100	< 2e-16	***
log(NLdir)	0.71077	0.06780	10.484	< 2e-16	***

Residual standard error: 0.1259 on 596 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.9081, Adjusted R-squared: 0.9076

F-statistic: 1963 on 3 and 596 DF, p-value: < 2.2e-16

Não é legítimo procurar comparar directamente o coeficiente de determinação deste modelo, $R^2=0.9081$, e o coeficiente de determinação do modelo análogo sem a logaritmização (alínea 9d), $R^2=0.8649$), uma vez que a escala onde são medidos os resíduos são diferentes, nos dois casos. Apenas podemos afirmar que o modelo agora ajustado explica mais de 90% da variância dos valores observados *das log-áreas* foliares. A equação do hiperplano ajustado é da forma $\ln(y) = b_0 + b_1 \ln(x_1) + b_2 \ln(x_2) + b_3 \ln(x_3)$, sendo y a *Area*, x_1 a variável *NP*, x_2 a variável *NLesq*, e x_3 a variável *NLdir*, e tendo $b_0=0.40983$, $b_1=0.72660$, $b_2=0.57049$ e $b_3=0.71077$. Em termos das variáveis originais esta relação corresponde a:

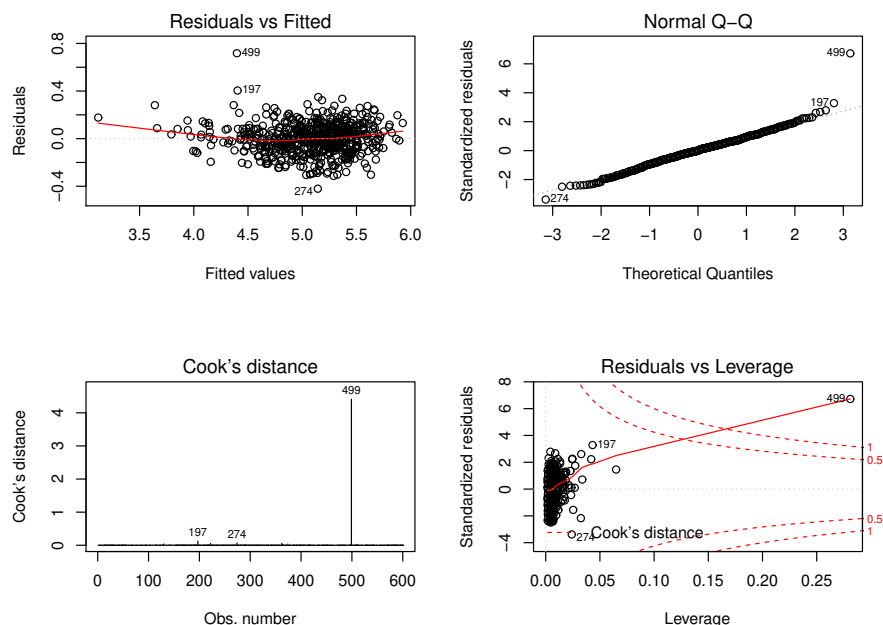
$$\begin{aligned} \ln(y) = b_0 + b_1 \ln(x_1) + b_2 \ln(x_2) + b_3 \ln(x_3) &\Leftrightarrow y = \exp^{b_0 + b_1 \ln(x_1) + b_2 \ln(x_2) + b_3 \ln(x_3)} \\ &\Leftrightarrow y = e^{b_0} e^{b_1 \ln(x_1)} e^{b_2 \ln(x_2)} e^{b_3 \ln(x_3)} \\ &\Leftrightarrow y = e^{b_0} e^{\ln(x_1^{b_1})} e^{\ln(x_2^{b_2})} e^{\ln(x_3^{b_3})} \\ &\Leftrightarrow y = e^{b_0} x_1^{b_1} x_2^{b_2} x_3^{b_3} \end{aligned}$$

Logo o modelo ajustado tem a seguinte equação:

$$Area = 1.506562 NP^{0.72660} NLesq^{0.57049} NLdir^{0.71077} .$$

(j) Proceda-se como na alínea 9h) e obtém-se:

```
> par(mfrow=c(2,2))
> plot(videiraslog.lm, which=c(1,2,4,5))
```



Repare-se como todos os problemas identificados na alínea 9h) foram em boa medida corrigidos. O gráfico de resíduos usuais e_i contra valores ajustados \hat{y}_i mostra agora uma dispersão dos pontos numa banda horizontal em torno do valor médio zero, tendo praticamente desaparecido, quer a curvatura, quer a forma em funil. Assim, a linearidade da relação entre as variáveis logaritmizadas, bem como a homogeneidade das variâncias dos respectivos erros aleatórios parecem pressupostos admissíveis. Da mesma forma, o *qq-plot* do canto superior direito mostra que (à exceção da observação 499) tem-se uma boa linearidade, sustentando o pressuposto de Normalidade dos erros aleatórios. No canto inferior esquerdo, a observação 499 surge de novo destacada, com uma enormíssima distância de Cook, superior a 4, e portanto muito superior ao limiar de guarda 0.5. Assim, esta observação tem uma enorme influência na regressão ajustada, e a sua exclusão provocaria alterações importantes, quer nos coeficientes ajustados b_j , quer nos valores resultantes de \hat{y}_i . Essa mesma indicação é dada no quarto e último gráfico, onde (graças ao elevadíssimo valor de D_{499}) são visíveis dois pares de isolinhas de Cook, correspondentes aos limiares 0.5 e 1. Registe-se ainda, nos dois gráficos da direita, como a observação 499 tem um enorme resíduo (internamente) estandarizado, com $R_{499} > 6$, bem como um efeito alavanca razoavelmente elevado (que nenhuma outra observação acompanha). Assim, a logaritmização das quatro variáveis revelou ser uma opção adequada, e por várias razões em simultâneo.

A discordante observação 499 (que é, simultaneamente uma observação atípica, influente e de valor razoavelmente elevado do efeito alavanca) já foi discutida anteriormente. Tratando-se

de uma folha com uma muito evidente assimetria (possivelmente correspondente a um erro de medição/registo, ou então danificada por alguma razão), haverá espaço para discutir a sua eventual exclusão do modelo, podendo argumentar-se que o modelo destina-se a ser usado com folhas de videira não danificadas ou excessivamente irregulares. A título de curiosidade, registe-se o resultado de reajustar o modelo, apenas com as 599 folhas restantes:

```
> summary(lm(log(Area) ~ log(NP) + log(NLesq) + log(NLdir), data=videiras[-499,]))

Call: lm(formula = log(Area) ~ log(NP) + log(NLesq) + log(NLdir), data = videiras[-499, ])
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.38758     0.05912   6.555 1.2e-10 ***
log(NP)      0.60695     0.06553   9.262 < 2e-16 ***
log(NLesq)   0.80654     0.06399  12.604 < 2e-16 ***
log(NLdir)   0.60978     0.06681   9.127 < 2e-16 ***
---
Residual standard error: 0.1211 on 595 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9151, Adjusted R-squared:  0.9146
F-statistic: 2137 on 3 and 595 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Repare-se na alteração substancial dos valores estimados dos quatro parâmetros, e em especial dos coeficientes dos log-comprimentos das nervuras, uma alteração que confirma que a observação 499 era muito influente.

10. (a) Os valores em falta são:

- $g.l.(QMRE) = n - (p + 1) = 39 - (3 + 1) = 35$
- $R_{\text{mod}}^2 = 1 - \frac{QMRE}{QMT} = 1 - \frac{\hat{\sigma}^2}{s_y^2} = 1 - \frac{13.62291^2}{502.7085} = 0.630824$
- $F_{\text{calc}} = \frac{n - (p + 1)}{p} \cdot \frac{R^2}{1 - R^2} = \frac{35}{3} \times \frac{0.66}{1 - 0.66} = 22.64706$
com $p = 3$ e $n - (p + 1) = 35$ graus de liberdade.

(b) O coeficiente de determinação deste modelo de regressão linear múltipla ($R^2 = 0.66$) não é muito bom: só 66% da variabilidade total do comprimento do élitro (variável resposta) é explicada por esta regressão.

Formalizando o teste de ajustamento global, relativo a parâmetros da equação de base do modelo, $Elytra_i = \beta_0 + \beta_1 TG_i + \beta_2 \text{Second.Antenna}_i + \beta_3 \text{Third.Antenna}_i + \epsilon_i$, vem:

Hipóteses: $H_0 : \beta_j = 0, \forall j \in \{1, 2, 3\}$ vs. $H_1 : \exists j \in \{1, 2, 3\}$, tal que $\beta_j \neq 0$.
[Modelo inútil] [Modelo não inútil]

Estatística do Teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p} \cdot \frac{R^2}{1-R^2} \cap F_{(p,n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica: (Unilateral direita) Rejeitar H_0 se $F_{\text{calc}} > f_{\alpha(p,n-(p+1))}$.

Conclusões: Como $F_{\text{calc}} = 22.64706 > f_{0.05(3,35)} \approx 2.88$, rejeita-se H_0 , isto é, rejeita-se a hipótese do modelo ser inútil, ao nível de significância de 0.05. Em alternativa, podia ter-se obtido esta mesma conclusão pela análise do valor de prova deste teste, presente no enunciado: como o $p - \text{value} = 2.513 \times 10^{-08} < 0.05 = \alpha$, rejeita-se H_0 .

A validade deste teste depende da validade dos pressupostos adicionais admitidos no modelo de regressão linear múltipla, e que dizem respeito aos erros aleatórios. Concretamente, admite-se que esses erros aleatórios ϵ_i são Normais, de média zero, variância constante σ^2 e independentes.

(c) No contexto do problema em estudo e tendo em conta as unidades das várias variáveis, a estimativa do coeficiente associado à variável TG , $b_1 = 0.4874$, significa que se estima que o comprimento médio do élitro aumente $4.874 \mu m$ (0.4874 centésimas de milímetro) quando a distância do sulco transversal à borda posterior do pró-torax aumenta $1 \mu m$, mantendo-se os restantes preditores fixos.

(d) Considerando que $10 \mu m = 1$ centésima de milímetro, o que se pretende testar é se é admissível considerar que $\beta_2 < 1$. Dando o ónus da prova a esta hipótese, temos que:

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 \geq 1$ vs. $H_1 : \beta_2 < 1$

Estatística do Teste: $T = \frac{\hat{\beta}_2 - 1}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} \cap t_{(n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica: (Unilateral esquerda) Rejeitar H_0 se $T_{\text{calc}} < -t_{\alpha(n-(p+1))}$.

Conclusões: Como $T_{\text{calc}} = \frac{b_2 - 1}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} = \frac{0.9703 - 1}{0.1879} = -0.15806 > -t_{0.05(35)} \approx -1.6906$, não se rejeita H_0 ao nível de significância de 0.05, isto é, não há evidência experimental para considerar que, para cada micrómetro adicional no segundo segmento de antena, o comprimento do élitro aumenta, em média, menos de $10 \mu m$.

(e) É pedido um teste para averiguar a variação no valor médio da variável resposta **Elytra**, $\Delta E[Y]$, associada a aumentar simultaneamente cada uma das variáveis predictoras **Second.Antenna** (X_2) e **Third.Antenna** (X_3) numa unidade ($1 \mu m$). Ora,

$$E[Y | X_1 = x_1, X_2 = x_2 + 1, X_3 = x_3 + 1] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2(x_2 + 1) + \beta_3(x_3 + 1)$$

$$- E[Y | X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

$$\Delta E[Y | \Delta X_1 = 0, \Delta X_2 = 1, \Delta X_3 = 1] = \beta_2 + \beta_3$$

Assim, o que se pretende testar é se $\beta_2 + \beta_3 = 1$. Formalizando, temos:

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 + \beta_3 = 1$ vs. $H_1 : \beta_2 + \beta_3 \neq 1$

Estatística do Teste: $T = \frac{(\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3) - 1}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3}} \cap t_{(n-(p+1))}$, sob H_0

Nível de significância: $\alpha = 0.05$

Região Crítica: (Bilateral) Rejeitar H_0 se $|T_{\text{calc}}| > t_{\alpha/2 (n-(p+1))}$

Conclusões: De acordo com os dados do enunciado,

$$\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3} = \sqrt{\hat{V}[\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3]} = \sqrt{\hat{V}[\hat{\beta}_2] + \hat{V}[\hat{\beta}_3] + 2\widehat{Cov}[\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3]}$$

$$= \sqrt{0.035306802 + 0.0218088275 + 2 \times (-0.0162119398)} = 0.1571361,$$

pelo que $T_{\text{calc}} = \frac{b_2 + b_3 - 1}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3}} = \frac{0.9703 + 0.2923 - 1}{0.1571361} = 1.671163$. Como $|T_{\text{calc}}| < t_{0.025(35)} \approx 2.03$, não se rejeita H_0 ao nível de significância de 0.05, isto é, podemos admitir que o aumento simultâneo de $1 \mu m$ em cada um dos dois segmentos de antena, provoca um aumento de $10 \mu m$ no comprimento médio do élitro.

(f) Pede-se um teste F parcial para comparar o

Modelo completo (C) $Y = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3$
 com o Submodelo (S) $Y = \beta_0 + \beta_2x_2$.

Hipóteses: $H_0 : \beta_1 = \beta_3 = 0$ vs. $H_1 : \beta_1 \neq 0 \vee \beta_3 \neq 0$
 [Submodelo OK] [Submodelo pior]

ou, de forma equivalente,

$$H_0 : \mathcal{R}_c^2 = \mathcal{R}_s^2 \text{ vs. } H_1 : \mathcal{R}_c^2 > \mathcal{R}_s^2$$

Estatística do Teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \cdot \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} \cap F_{(p-k, n-(p+1))}$, sob H_0

Nível de significância: $\alpha = 0.05$

Região Crítica: (Unilateral direita) Rejeitar H_0 se $F_{\text{calc}} > f_{\alpha(p-k, n-(p+1))}$

Conclusões: Temos $n = 39$, $p = 3$, $k = 1$, $R_c^2 = 0.66$ e $R_s^2 = 0.7265072^2 = 0.5278127$ pois o submodelo considerado é a regressão linear simples de *Elytra* (Y) sobre *Second. Antenna* (X_2) pelo que o coeficiente de determinação do submodelo é igual ao quadrado do coeficiente de correlação entre estas duas variáveis, $R_s^2 = (r_{x_2y})^2$.

Logo, $F_{\text{calc}} = \frac{35}{3-1} \times \frac{0.66-0.5278127}{1-0.66} = 6.803758 > f_{0.05(2,35)} \approx 3.27$. Assim, rejeita-se H_0 , ou seja, modelo e submodelo diferem significativamente ao nível 0.05, pelo que é preferível trabalhar com o modelo com 3 preditores.

11. (a) Eis a regressão linear múltipla de rendimento sobre todos os preditores:

```
> summary(lm(y ~ . , data=milho))
[...]
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	51.03036	85.73770	0.595	0.557527
x1	0.87691	0.18746	4.678	0.000104 ***
x2	0.78678	0.43036	1.828	0.080522 .
x3	-0.46017	0.42906	-1.073	0.294617
x4	-0.77605	1.05512	-0.736	0.469464
x5	0.48279	0.57352	0.842	0.408563
x6	2.56395	1.38032	1.858	0.076089 .
x7	0.05967	0.71881	0.083	0.934556
x8	0.40590	1.03322	0.393	0.698045
x9	-0.65951	0.67034	-0.984	0.335426

 Residual standard error: 7.815 on 23 degrees of freedom
 Multiple R-squared: 0.7476, Adjusted R-squared: 0.6488
 F-statistic: 7.569 on 9 and 23 DF, p-value: 4.349e-05

Não sendo um ajustamento que se possa considerar excelente, apesar de tudo as variáveis preditoras conseguem explicar quase 75% da variabilidade nos rendimentos. Um teste de ajustamento global rejeita a hipótese nula (inutilidade do modelo) com um valor de prova de $p=0.00004349$.

- (b) O coeficiente de determinação modificado tem valor dado no final da penúltima linha da listagem produzida pelo R: $R_{mod}^2 = 0.6488$. Este coeficiente modificado é definido como $R_{mod}^2 = 1 - \frac{QMRE}{QMT} = 1 - \frac{SQRE}{SQT} \cdot \frac{n-1}{n-(p+1)} = 1 - (1 - R^2) \cdot \frac{n-1}{n-(p+1)}$. O facto de, neste exercício o valor do R^2 usual e do R^2 modificado serem bastante diferentes resulta do facto de se tratar dum modelo com um valor de R^2 (usual) não muito elevado, e que é ajustado com um número de observações ($n=33$) não muito grande, quando comparado com o número de parâmetros do modelo ($p+1=10$). Efectivamente, e considerando a última das expressões acima para R_{mod}^2 ,

vemos que o factor multiplicativo $\frac{n-1}{n-(p+1)} = \frac{32}{23} = 1.3913$. Assim, a distância do R^2 usual em relação ao seu máximo ($1 - R^2 = 0.2524$) é aumentado em cerca de 40% antes de ser subtraído de novo ao valor máximo 1, pelo que $R_{mod}^2 = 1 - 0.2524 \times 1.3913 = 1 - 0.3512 = 0.6488$. Em geral, o R_{mod}^2 penaliza modelos ajustados com relativamente poucas observações (em relação ao número de parâmetros do modelo), em especial quando o valor de R^2 não é muito elevado. Por outras palavras, R_{mod}^2 penaliza modelos com ajustamentos modestos, baseados em relativamente pouca informação, face à complexidade do modelo.

(c) Eis o resultado do ajustamento pedido, sem o preditor x_1 :

```
> summary(lm(y ~ . - x1 , data=milho))
[...]
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	192.387333	109.724668	1.753	0.0923 .
x2	0.305508	0.571461	0.535	0.5978
x3	-0.469256	0.586748	-0.800	0.4317
x4	-1.526474	1.426129	-1.070	0.2951
x5	-0.133203	0.763345	-0.174	0.8629
x6	3.312695	1.874882	1.767	0.0900 .
x7	-1.580293	0.858146	-1.842	0.0779 .
x8	1.239484	1.391780	0.891	0.3820
x9	-0.008387	0.896726	-0.009	0.9926

Residual standard error: 10.69 on 24 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.5074, Adjusted R-squared: 0.3432
F-statistic: 3.091 on 8 and 24 DF, p-value: 0.01524

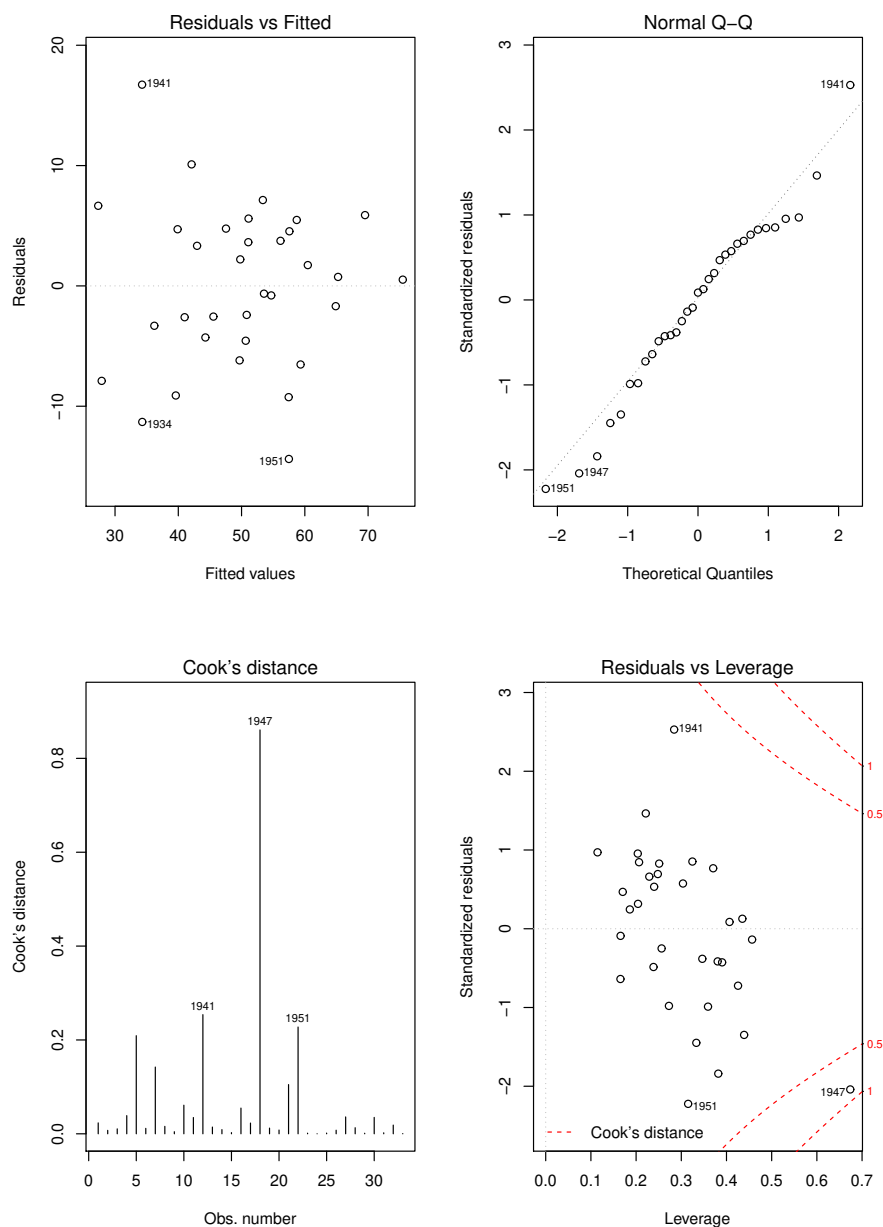
O facto mais saliente resultante da exclusão do preditor x_1 é a queda acentuada no valor do coeficiente de determinação, que é agora apenas $R^2 = 0.5074$ (repare-se como o $R_{mod}^2 = 0.3432$ ainda se distancia mais do R^2 usual, reflectindo também esse ajustamento mais pobre). Assim, este modelo sem a variável preditiva x_1 apenas explica cerca de metade da variabilidade nos rendimentos. Outro facto saliente é a grande perturbação nos valores ajustados dos parâmetros (quando comparados com o modelo com todos os preditores).

Este enorme impacto da exclusão do preditor x_1 é digno de nota, tanto mais quanto essa variável preditora é apenas um contador dos anos que passam. Há dois aspectos a salientar:

- o preditor x_1 funciona aqui como uma variável substituta (*proxy variable*, em inglês) para um grande número de outras variáveis, muitas das quais de difícil medição, tais como desenvolvimentos técnicos ou tecnológicos associados à cultura do milho nos anos em questão. A sua importância resulta de ser um indicador simples para levar em conta os aspectos não meteorológicos que, nos anos em questão, tiveram grande impacto na produção (variável resposta do modelo), mas que não eram contemplados pelos restantes preditores.
- este exemplo ilustra bem o facto de os modelos estudarem *associações estatísticas*, o que não é sinónimo de *relações de causa e efeito*. No ajustamento do modelo com todos os preditores, a estimativa do coeficiente da variável x_1 é $b_1 = 0.87691$. Tendo em conta a natureza e unidades de medida das variáveis, podemos afirmar que, a cada ano que passa (e para iguais condições meteorológicas, ou seja, mantendo constantes as restantes variáveis) o valor da produção aumenta, em média, 0.87691 *bushels/acre*. Mas não faz evidentemente sentido dizer que cada ano que passa *provoca* esse aumento na produção. Não é a mera passagem do tempo que *causa* a produção. Pode existir uma relação de causa e efeito entre alguns preditores e a variável resposta, mas pode

apenas existir uma *associação*, como neste caso. A existência, ou não, de uma relação de causa e efeito nunca poderá ser afirmada pela via estatística, mas apenas com base nos conhecimentos teóricos associados aos fenómenos sob estudo.

Quanto ao estudo dos resíduos, eis os gráficos produzidos com as opções 1, 2, 4 e 5 do comando `plot` do R:



O gráfico de resíduos usuais *vs.* valores ajustados \hat{y}_i (no canto superior esquerdo) não apresenta qualquer padrão digno de registo, dispersando-se os resíduos numa banda horizontal. Assim, nada sugere que não se verifiquem os pressupostos de linearidade e de homogeneidade de variâncias, admitidos no modelo RLM. Analogamente, no *qq-plot* comparando quantis teóricos duma Normal reduzida e quantis empíricos (canto superior direito), existe linea-

ridade aproximada dos pontos, pelo que a hipótese de Normalidade dos erros aleatórios também parece admissível. Já no diagrama de barras das distâncias de Cook (canto inferior esquerdo) há um facto digno de registo: a observação correspondente ao ano 1947 tem um valor elevadíssimo da distância de Cook (superior a 0.8), pelo que se trata dum ano muito influente no ajustamento do modelo. Dado o elevado número de variáveis preditoras, não é possível visualizar a nuvem de pontos associada aos dados, mas uma análise mais atenta da tabela de valores observados (disponível no enunciado) sugere possíveis causas para este facto. O ano de 1947 teve uma precipitação pré-Junho particularmente intensa, a que se seguiu um mês de Agosto anormalmente quente e seco (nas três variáveis registam-se observações extremas, para os anos observados). O valor muito elevado da distância de Cook indica que a exclusão deste ano do conjunto de dados provocaria alterações importantes no modelo ajustado. Finalmente, o gráfico de resíduos internamente estandardizados (R_i) vs. valores do efeito alavanca (h_{ii}) confirmam a elevada distância de Cook da observação correspondente a 1947, e mostram que ela resulta dum resíduo internamente estandardizado relativamente grande, em valor absoluto (embora não extraordinariamente grande), mas sobretudo dum valor muito elevado (cerca de 0.7) do efeito alavanca. Este último valor sugere que esta observação está a “atrair” o hiperplano ajustado, facto que ajuda a esconder a natureza atípica desta observação. Este exemplo é ainda digno de nota por outra razão: muitas observações têm valores relativamente elevados dos efeitos alavanca. Trata-se duma consequência de se ajustar um modelo complexo ($p+1$ parâmetros) com relativamente poucas observações ($n = 33$). O valor médio dos efeitos alavanca, que numa RLM é dada por $\frac{p+1}{n}$, é cerca de 0.3, existindo várias observações com valores bastante superiores do efeito alavanca.

A discussão dos resíduos para o modelo sem o preditor x_1 é muito semelhante. A distância de Cook da observação relativa a 1947 baixa um pouco, mas permanece muito elevada (cerca de 0.6), mantendo-se os restantes aspectos já referidos acima.

- (d) Efectuar um teste t às hipóteses $H_0 : \beta_1 = 0$ vs. $H_1 : \beta_1 \neq 0$ no modelo com todos os preditores (x_1 a x_9) corresponde a testar se é possível considerar equivalentes os dois modelos das alíneas anteriores, uma vez que esses modelos apenas diferem no preditor x_1 . A descrição pormenorizada dum tal teste já foi feita em resoluções de exercícios anteriores (por exemplo, no exercício 9e). Resumidamente, e observando o valor de prova que é dado na listagem referente a este teste, no modelo completo ($p = 0.000104$, associado ao valor calculado da estatística $t_{calc} = 4.678$), conclui-se pela rejeição de $H_0 : \beta_1 = 0$, para os níveis de significância usuais. Assim (e de forma nada surpreendente) conclui-se que modelo (com x_1) e submodelo (sem x_1) têm ajustamentos significativamente diferentes.
- (e) O mesmo problema de comparar modelo e submodelo pode ser abordado pela via dum teste F parcial. Neste contexto, temos:

Hipóteses: $H_0 : \beta_1 = 0$ vs. $H_1 : \beta_1 \neq 0$
 [modelos equivalentes] [modelos diferentes]

ou, de forma equivalente,

$H_0 : \mathcal{R}_c^2 = \mathcal{R}_s^2$ vs. $H_1 : \mathcal{R}_c^2 > \mathcal{R}_s^2$

Estatística do Teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \cdot \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} \cap F_{(p-k, n-(p+1))}$, sob H_0

Nível de significância: $\alpha = 0.05$

Região Crítica: (Unilateral direita) Rejeitar H_0 se $F_{calc} > f_{\alpha(p-k, n-(p+1))}$

Conclusões: Temos $n = 33$, $p = 9$, $k = 8$, $R_c^2 = 0.7476$ e $R_s^2 = 0.5074$.

Logo, $F_{\text{calc}} = \frac{23}{1} \times \frac{0.7476 - 0.5074}{1 - 0.7476} = 21.8827 > f_{0.05(1,23)} = 4.28$. Assim, rejeita-se H_0 , ou seja, modelo e submodelo diferem significativamente ao nível 0.05, pelo que é preferível trabalhar com o modelo com todos os preditores.

Este teste F parcial pode ser obtido no R através do comando `anova`, com o modelo completo ajustado guardado no objecto `milho.lm` e o submodelo sem x_1 no objecto `milhosx1.lm`:

```
> anova(milhosx1.lm, milho.lm)
Analysis of Variance Table
Model 1: y ~ x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9
Model 2: y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9
  Res.Df  RSS Df Sum of Sq    F    Pr(>F)
1      24 2741.2
2      23 1404.7  1    1336.5 21.883 0.0001039 ***
```

Além de se confirmar o valor calculado da estatística $F_{\text{calc}} = 21.883$, obtemos o valor de prova que lhe está associado: $p = 0.0001039$. Trata-se do mesmo p -value obtido no teste t considerado antes. Este facto não é uma coincidência. Quando modelo e submodelo diferem numa única variável, a estatística do teste F parcial é o quadrado da estatística t no teste a que $\beta_j = 0$ (tendo-se, no nosso caso, $t_{\text{calc}}^2 = (4.678)^2 = 21.88368 = F_{\text{calc}}$, aparte os erros de arredondamento). Os respectivos p -values têm de ser iguais pois (resultado estudado na disciplina de Estatística dos primeiros ciclos do ISA) se $T \sim t_\nu$, então $T^2 \sim F_{(1,\nu)}$. Trata-se de duas estatísticas de teste essencialmente equivalentes.

- (f) Com base na listagem de resultados obtidos na alínea 11a), pode identificar-se o preditor x_7 como aquele cuja exclusão do modelo menos prejudicaria a qualidade do modelo. De facto, as colunas relativas aos testes às hipóteses $\beta_j = 0$ mostram que é para essa variável preditora que a não rejeição de H_0 (ou seja, a admissibilidade da hipótese $\beta_7 = 0$) é mais clara, uma vez que o respectivo valor de prova (p -value) é o mais elevado de todos, e quase 1: $p = 0.934556$. Este p -value corresponde a um valor calculado da estatística T quase nulo: $T_{\text{calc}} = 0.083$. Mas, como se viu na alínea anterior, o quadrado deste valor T_{calc} é o valor calculado da estatística do teste F parcial comparando o modelo completo com o submodelo resultante da exclusão do preditor x_7 . E tendo em conta a expressão dessa estatística do teste F parcial, onde aparecem os coeficientes de determinação do modelo completo (conhecido: $R_c^2 = 0.7476$) e do submodelo (R_s , desconhecido), é possível escrever uma equação em que apenas R_s seja uma incógnita, assim permitindo calcular o seu valor. Logo, tem-se:

$$\begin{aligned} T_{\text{calc}}^2 = 0.083^2 = 0.006889 &= F_{\text{calc}} = \frac{n - (p + 1)}{p - k} \cdot \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} = \frac{23}{1} \cdot \frac{0.7476 - R_s^2}{1 - 0.7476} \\ \Leftrightarrow \frac{0.006889 \times 0.2524}{23} &= 0.7476 - R_s^2 \\ R_s^2 &= 0.7476 - 0.0000756 = 0.7475 \end{aligned}$$

Um ajustamento do submodelo sem o preditor x_7 permite confirmar este valor de R_s^2 (arredondado a quatro casas decimais).

- (g) O submodelo pedido aqui é o submodelo com os preditores de x_1 a x_5 . Eis o seu ajustamento:

```
> summary(milhoJun.lm)
[...]
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  12.6476    50.4835   0.251  0.8041
x1            1.0381     0.1655   6.272 1.04e-06 ***
x2            0.8606     0.4198   2.050  0.0502 .
x3           -0.5710     0.4558  -1.253  0.2210
```

```

x1          0.8693      0.1602      5.425 1.42e-05 ***
x2          0.7751      0.3983      1.946  0.0634 .
x3         -0.4590      0.4199     -1.093  0.2852
x4         -0.7982      0.9995     -0.799  0.4324
x5          0.4814      0.5613      0.858  0.3996
x6          2.5245      1.2687      1.990  0.0581 .
x8          0.4137      1.0074      0.411  0.6849
x9         -0.6426      0.6252     -1.028  0.3143

```

```
---
```

```

Residual standard error: 7.652 on 24 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7475, Adjusted R-squared:  0.6633
F-statistic: 8.882 on 8 and 24 DF,  p-value: 1.38e-05

```

Assinale-se que o valor do coeficiente de determinação quase não se alterou com a exclusão de x_7 . Continuam a existir várias variáveis com valor de prova superiores ao limiar estabelecido, e de entre estas é a variável x_8 que tem o maior p -value: $p = 0.6849$. Exclui-se essa variável e ajusta-se novamente o modelo.

```
> summary(lm(y ~ . - x7 - x8, data=milho))
```

```
[...]
```

```
Coefficients:
```

```

              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  58.4750    68.9575   0.848  0.4045
x1             0.8790    0.1558   5.641 7.17e-06 ***
x2             0.8300    0.3689   2.250  0.0335 *
x3            -0.4592    0.4128  -1.112  0.2765
x4            -0.8354    0.9787  -0.854  0.4015
x5             0.5287    0.5401   0.979  0.3370
x6             2.4392    1.2306   1.982  0.0586 .
x9            -0.7254    0.5819  -1.247  0.2240

```

```
---
```

```

Residual standard error: 7.523 on 25 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7457, Adjusted R-squared:  0.6745
F-statistic: 10.47 on 7 and 25 DF,  p-value: 4.333e-06

```

O valor de R^2 mantém-se próximo do original e continuam a existir variáveis candidatas a sair do modelo. De entre estas, é o preditor x_4 que tem o maior p -value ($p = 0.4015$), pelo que será o próximo preditor a excluir. O re-ajustamento do modelo sem os três preditores já excluídos (x_7 , x_8 e x_4) produz os seguintes resultados:

```
> summary(lm(y ~ . - x7 - x8 - x4, data=milho))
```

```
[...]
```

```
Coefficients:
```

```

              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  37.9486    64.2899   0.590  0.5601
x1             0.8854    0.1548   5.718 5.11e-06 ***
x2             0.7685    0.3599   2.135  0.0423 *
x3            -0.3603    0.3941  -0.914  0.3690
x5             0.6338    0.5231   1.212  0.2366
x6             2.7275    1.1772   2.317  0.0286 *
x9            -0.6829    0.5767  -1.184  0.2471

```

```
---
```

```

Residual standard error: 7.484 on 26 degrees of freedom

```

Multiple R-squared: 0.7383, Adjusted R-squared: 0.6779
F-statistic: 12.23 on 6 and 26 DF, p-value: 1.624e-06

Após a exclusão de três preditores, o coeficiente de determinação continua próximo do valor original: $R^2 = 0.7383$. Esta quebra pequena reflecte os valores elevados dos p -values associados aos preditores excluídos. Mas há mais preditores candidatos à exclusão, sendo x_3 a próxima variável a excluir do lote de preditores ($p=0.3690 > 0.10$).

```
> summary(lm(y ~ . - x7 - x8 - x4 - x3, data=milho))  
[...]
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	39.3646	64.0755	0.614	0.5441	
x1	0.8870	0.1544	5.747	4.13e-06	***
x2	0.7562	0.3586	2.109	0.0444	*
x5	0.4725	0.4910	0.962	0.3444	
x6	2.4893	1.1445	2.175	0.0386	*
x9	-0.8320	0.5515	-1.509	0.1430	

Residual standard error: 7.461 on 27 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7299, Adjusted R-squared: 0.6799
F-statistic: 14.59 on 5 and 27 DF, p-value: 5.835e-07

Há ainda candidatos à exclusão, sendo x_5 a exclusão seguinte.

```
> summary(lm(y ~ . - x7 - x8 - x4 - x3 - x5, data=milho))  
[...]
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	87.1589	40.4371	2.155	0.0399	*
x1	0.8519	0.1498	5.688	4.25e-06	***
x2	0.5989	0.3187	1.879	0.0707	.
x6	2.3613	1.1353	2.080	0.0468	*
x9	-0.9755	0.5302	-1.840	0.0764	.

Residual standard error: 7.451 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7206, Adjusted R-squared: 0.6807
F-statistic: 18.06 on 4 and 28 DF, p-value: 1.954e-07

Tendo em conta que fixámos o limiar de exclusão no nível de significância $\alpha = 0.10$, não há mais variáveis candidatas à exclusão, pelo que o algoritmo termina aqui. O modelo final escolhido pelo algoritmo tem quatro preditores (x_1 , x_2 , x_6 e x_9), e um coeficiente de determinação $R^2 = 0.7206$. Ou seja, com menos de metade dos preditores iniciais, apenas se perdeu 0.027 no valor de R^2 .

O valor relativamente alto ($\alpha = 0.10$) do nível de significância usado é aconselhável, na aplicação deste algoritmo, uma vez que variáveis cujo p -value cai abaixo deste limiar podem, se excluídas, gerar quebras mais pronunciadas no valor de R^2 . Tal facto é ilustrado pela exclusão de x_9 (a exclusão seguinte, caso se tivesse optado por um limiar $\alpha = 0.05$):

```
> summary(lm(y ~ . - x7 - x8 - x4 - x3 - x5 - x9, data=milho))  
[...]
```

Residual standard error: 7.752 on 29 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.6869, Adjusted R-squared: 0.6545

F-statistic: 21.2 on 3 and 29 DF, p-value: 1.806e-07

Dado o número de exclusões efectuadas, pode desejar-se fazer um teste F parcial, comparando o submodelo final produzido pelo algoritmo e o modelo original com todos os preditores:

```
> anova(milhoAlgExc.lm, milho.lm)
Analysis of Variance Table

Model 1: y ~ x1 + x2 + x6 + x9
Model 2: y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9
  Res.Df  RSS Df Sum of Sq    F Pr(>F)
1      28 1554.6
2      23 1404.7  5    149.9 0.4909 0.7796
```

O p -value muito elevado ($p = 0.7796$) indica que não se rejeita a hipótese de modelo e submodelo serem equivalentes.

Como foi indicado nas aulas teóricas, existe uma função do R, a função `step`, que automatiza um algoritmo de exclusão sequencial, mas utilizando o valor do Critério de Informação de Akaike (AIC) como critério de exclusão dum preditor em cada passo do algoritmo. Em relação ao algoritmo baseado nos testes t aos parâmetros β_j , acima ilustrado, apenas pode diferir no momento da paragem do algoritmo: enquanto houver exclusão de variáveis, as variáveis excluídas coincidem nas duas abordagens. Neste exemplo, as duas variantes do algoritmo de exclusão sequencial produzem o mesmo submodelo final, como se pode constatar na parte final desta listagem:

```
> step(milho.lm)          <--- Comando do R
Start:  AIC=143.79       <--- AIC do modelo completo
y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9

[0 R ordena o modelo inicial, bem como os possíveis submodelos resultantes de
excluir uma das variáveis predictoras, por ordem crescente de AIC. Nas listagens
produzidas pelo R, "RSS" indica a Soma de Quadrados Residual (SQRE) do modelo
correspondente e "Sum of Sq" indica a diferença nessa Soma de Quadrados associada
a cada possível exclusão de um preditor:]

  Df Sum of Sq  RSS  AIC
- x7  1    0.42 1405.1 141.79 <--- exclusão de x7 produz o menor (melhor) AIC
- x8  1    9.43 1414.1 142.01 <--- exclusão de x8 (sem excluir x7) é a 2a. melhor opção
- x4  1   33.04 1437.7 142.55
- x5  1   43.28 1448.0 142.79
- x9  1   59.12 1463.8 143.15
- x3  1   70.25 1475.0 143.40
<none>          1404.7 143.78 <--- o modelo inicial
- x2  1   204.13 1608.8 146.26 <--- excluir x2 produz um submodelo com pior (maior) AIC
- x6  1   210.73 1615.4 146.40
- x1  1  1336.47 2741.2 163.85 <--- exclusão de x1: o pior AIC

[Excluída a variável x7, inicia-se novo passo, onde se ensaia a
exclusão de cada uma das variáveis predictoras ainda presentes:]

Step:  AIC=141.8          <--- AIC do modelo escolhido no passo acima
y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x8 + x9 <--- modelo do passo anterior (sem x7)

  Df Sum of Sq  RSS  AIC
```

```

- x8 1 9.88 1415.0 140.03 <--- excluir x8 melhora o AIC
- x4 1 37.34 1442.5 140.66 <--- excluir x4 também, mas menos
- x5 1 43.07 1448.2 140.79
- x9 1 61.84 1467.0 141.22
- x3 1 69.96 1475.1 141.40
<none> 1405.1 141.79 <--- o submodelo inicial deste passo
- x2 1 221.75 1626.9 144.63 <--- excluir x2 sobe (piora) AIC
- x6 1 231.80 1636.9 144.83
- x1 1 1723.38 3128.5 166.21

```

[Ajusta-se o novo modelo resultante da excluir (também) a variável x8; inicia-se novo passo para estudar o efeito de excluir um dos dois preditores sobrantes:]

```

Step: AIC=140.03
y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x9

```

```

      Df Sum of Sq  RSS  AIC
- x4  1  41.23 1456.2 138.97 <--- exclusão de x4 melhora AIC
- x5  1  54.23 1469.2 139.27 <--- excluir x5 também, mas menos
- x3  1  70.04 1485.0 139.62
- x9  1  87.98 1503.0 140.02
<none> 1415.0 140.03 <--- submodelo inicial deste passo
- x6  1  222.36 1637.4 142.84 <--- excluir x6 piora AIC
- x2  1  286.50 1701.5 144.11
- x1  1 1800.93 3215.9 165.12

```

```

Step: AIC=138.97 <--- AIC do submodelo escolhido
y ~ x1 + x2 + x3 + x5 + x6 + x9 <--- submodelo excluindo (também) x4

```

```

      Df Sum of Sq  RSS  AIC
- x3  1  46.81 1503.0 138.02 <--- excluir x3 melhor AIC
- x9  1  78.53 1534.8 138.71
- x5  1  82.22 1538.5 138.79
<none> 1456.2 138.97 <--- submodelo inicial do passo
- x2  1  255.37 1711.6 142.31
- x6  1  300.66 1756.9 143.17
- x1  1 1831.49 3287.7 163.85

```

```

Step: AIC=138.02 <--- AIC do submodelo escolhido acima
y ~ x1 + x2 + x5 + x6 + x9 <--- submodelo sem x4

```

```

      Df Sum of Sq  RSS  AIC
- x5  1  51.56 1554.6 137.13 <--- ainda há exclusões a fazer: x5
<none> 1503.0 138.02 <--- modelo inicial do passo
- x9  1 126.71 1629.8 138.69
- x2  1 247.57 1750.6 141.05
- x6  1 263.35 1766.4 141.35
- x1  1 1838.51 3341.6 162.38

```

```

Step: AIC=137.13 <--- AIC do modelo sem x5
y ~ x1 + x2 + x6 + x9 <--- submodelo excluindo x5

```

```

      Df Sum of Sq  RSS  AIC
<none> 1554.6 137.13 <--- <none> na 1a. linha indica que não há
- x9  1 187.95 1742.6 138.90 <--- melhorias de AIC com mais exclusões
- x2  1 196.01 1750.6 139.05
- x6  1 240.20 1794.8 139.87
- x1  1 1796.22 3350.8 160.47

```

```
Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2 + x6 + x9, data = milho) <--- submodelo final
```

```
Coefficients:
(Intercept)          x1          x2          x6          x9
      87.1589      0.8519      0.5989      2.3613     -0.9755 <--- coef ajustados
```

Refira-se que as variáveis meteorológicas mais associadas à previsão da produção são a precipitação pré-Junho (x_2), a precipitação em Julho (x_6) e a temperatura em Agosto (x_9). Finalmente, refira-se que, caso esteja disponível *software* adequado, pode recorrer-se a uma pesquisa completa de todos os subconjuntos, a fim de escolher os melhores, para cada número k de preditores. Como referido nas aulas teóricas, o módulo `leaps` do R disponibiliza um comando de igual nome para fazer essas escolhas. Eis os comandos e a listagem produzida, para o conjunto de dados deste Exercício.

```
> library(leaps)
> leaps(y=milho$y , x=milho[,-10], method="r2", nbest=1)
$which
  1  2  3  4  5  6  7  8  9
1 TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
2 TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE FALSE
3 TRUE  TRUE FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE FALSE
4 TRUE  TRUE FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE  TRUE
5 TRUE  TRUE FALSE FALSE  TRUE  TRUE FALSE FALSE  TRUE
6 TRUE  TRUE  TRUE FALSE  TRUE  TRUE FALSE FALSE  TRUE
7 TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE FALSE FALSE  TRUE
8 TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE FALSE  TRUE  TRUE
9 TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE  TRUE
[...]
$size
[1]  2  3  4  5  6  7  8  9 10
$r2
[1] 0.5633857 0.6566246 0.6868757 0.7206491 0.7299145 0.7383258 0.7457353
[8] 0.7475100 0.7475856
```

Também é possível utilizar outros indicadores como critério de escolha de submodelos. A utilização do valor do R^2 modificado, R_{mod}^2 , como critério de selecção tem de produzir a mesma escolha de subconjuntos óptimos para cada cardinalidade (uma vez que existe uma relação monótona entre as duas variantes de R^2 , para iguais conjuntos de dados e subconjuntos de preditores). Essa situação é ilustrada neste exemplo, e de novo recorrendo ao comando `leaps`, com o argumento `method="adjr2"`. Como se pode verificar em baixo, os valores de R_{mod}^2 (ao contrário dos valores do coeficiente de determinação usual) não são sempre monótonos para conjuntos encaixados de preditores: assim, na passagem de $k=5$ para $k=6$ preditores, as soluções óptimas apenas diferem na nova variável x_4 , mas o conjunto de preditores maior tem um valor menor de R_{mod}^2 . Este indicador pode assim ser um auxiliar na selecção de quantos preditores usar num submodelo RLM.

```
> leaps(y=milho$y, x=milho[,-10], method="adjr2", nbest=1)
$which
 1  2  3  4  5  6  7  8  9
1 TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
```

```

2 TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE TRUE FALSE FALSE FALSE
3 TRUE TRUE FALSE FALSE FALSE TRUE FALSE FALSE FALSE
4 TRUE TRUE FALSE FALSE FALSE TRUE FALSE FALSE TRUE
5 TRUE TRUE FALSE FALSE TRUE TRUE FALSE FALSE TRUE
6 TRUE TRUE TRUE FALSE TRUE TRUE FALSE FALSE TRUE
7 TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE FALSE FALSE TRUE
8 TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE FALSE TRUE TRUE
9 TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
[...]
$size
[1] 2 3 4 5 6 7 8 9 10
$adjr2
[1] 0.5493014 0.6337329 0.6544835 0.6807418 0.6798986 0.6779395 0.6745412
[8] 0.6633467 0.6488148

```

Na matriz de valores lógicos, cada linha corresponde a uma cardinalidade (número de variáveis) do subconjunto preditor, e cada coluna corresponde a uma das variáveis predictoras. As colunas que tenham o valor lógico `TRUE`, na linha correspondente a k preditores, correspondem a variáveis que pertencem ao melhor subconjunto de k preditores. Repare-se como o melhor subconjunto de quatro preditores é o subconjunto `x1`, `x2`, `x6` e `x9`, escolhido pelo algoritmo de exclusão sequencial (nas suas duas versões). Aliás, em todos os passos intermédios do algoritmo, o subconjunto de k preditores escolhido acaba por revelar-se o subconjunto óptimo, ou seja, o subconjunto de preditores que está associado aos maiores valores do Coeficiente de Determinação.

- (i) O ajustamento pedido nesta alínea produziu os seguintes resultados:

```

> summary(lm(I(y*0.06277) ~ x1 + I(x2*25.4) + I(x6*25.4) + I(5/9*(x9-32)), data=milho))
[...]
Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)    3.5114712  1.5019053   2.338  0.0268 *
x1              0.0534744  0.0094015   5.688 4.25e-06 ***
I(x2 * 25.4)    0.0014800  0.0007877   1.879  0.0707 .
I(x6 * 25.4)    0.0058354  0.0028055   2.080  0.0468 *
I(5/9 * (x9 - 32)) -0.1102213  0.0599066  -1.840  0.0764 .
---
Residual standard error: 0.4677 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7206, Adjusted R-squared:  0.6807
F-statistic: 18.06 on 4 and 28 DF,  p-value: 1.954e-07

```

Comparando esta listagem com os resultados do modelo final produzido pelo algoritmo de exclusão sequencial, nas unidades de medida originais (ver alínea 11h), constata-se que as quantidades associadas à qualidade do ajustamento global (R^2 , valor da estatística F no teste de ajustamento global) mantêm-se inalteradas. Trata-se duma consequência do facto de que as transformações de variáveis foram todas transformações lineares (afins). No entanto, e tal como sucedia na RLS, os valores das estimativas b_j são diferentes. O facto de que a informação relativa aos testes a $\beta_j = 0$ se manter igual, para os coeficientes β_j que multiplicam as variáveis predictoras (isto é, quando $j > 0$), sugere que se trata de alterações que apenas visam adaptar as estimativas às novas unidades de medida, não alterando globalmente o ajustamento.

12. (a) Eis o ajustamento pedido, duma regressão linear múltipla da variável `trigo` sobre as restantes $p=12$ variáveis predictoras:

```
> summary(lm(trigo ~ . , data=trigoAlentejo))

Call: lm(formula = trigo ~ . , data = trigoAlentejo)
[...]
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  2.941e+07  2.291e+07  1.284  0.328
ano          -1.616e+04  1.152e+04 -1.403  0.296
Radiacao    -8.511e+03  9.540e+03 -0.892  0.466
T.Jan       -3.127e+04  6.950e+04 -0.450  0.697
T.Fev        2.249e+05  1.508e+05  1.491  0.274
T.Jun        8.094e+04  7.322e+04  1.105  0.384
T.Jul        9.445e+04  5.125e+04  1.843  0.207
T.Ago       -5.584e+04  1.024e+05 -0.545  0.640
P.Out        7.499e+02  2.120e+03  0.354  0.757
P.Nov       -1.734e+03  1.274e+03 -1.361  0.307
P.Dez        2.935e+03  2.027e+03  1.448  0.285
P.JJA       -9.161e+03  5.393e+03 -1.699  0.231
superficie  1.043e+00  1.348e+00  0.773  0.520
```

```
Residual standard error: 67700 on 2 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9252, Adjusted R-squared: 0.4766
F-statistic: 2.062 on 12 and 2 DF, p-value: 0.3727
```

Tem-se um elevadíssimo coeficiente de determinação: $R^2 = 0.9252$. No entanto, o valor do R^2 modificado ($R_{mod}^2 = 0.4766$) é quase metade do valor de R^2 . Esta enorme discrepância resulta do facto de se ajustar um modelo de $p+1 = 13$ parâmetros, com base em apenas $n = 15$ observações. O valor de R^2 é artificialmente elevado pelo facto de a informação disponível ser muito escassa, tendo em conta a complexidade do modelo. É uma situação análoga à que resultaria de, por exemplo, ajustar uma recta de regressão com apenas $n = 2$ observações: o valor de $R^2 = 1$ que necessariamente resultaria (uma vez que por quaisquer dois pontos passa sempre uma recta) não é indicador de um modelo muito bom, mas apenas de falta de informação para um estudo robusto. Usando a fórmula das aulas teóricas, tem-se (com um pequeno erro de arredondamento) $R_{mod}^2 = 1 - (1 - R^2) \times \frac{n-1}{n-(p+1)} = 1 - (0.0748) \times 7 = 1 - 0.5236 = 0.4764$. Outro aspecto assinalável deste exemplo reside no teste F de ajustamento global: apesar do elevadíssimo valor $R^2 = 0.9252$, não é possível rejeitar a hipótese nula do modelo populacional ser o Modelo Nulo (logo inútil), tendo em conta o elevado valor de prova (p -value): $p = 0.3727$. A escassíssima informação disponível face a um modelo demasiado 'pesado' não permite considerar que o coeficiente de determinação amostral $R^2 = 0.9252$ seja significativamente diferente de zero.

Nota: Os valores muito elevados dos coeficientes estimados b_j não constituem, em si mesmos, qualquer problema, reflectindo apenas a muito grande dimensão dos valores de Y observados. Uma mudança de unidades de medida para, por exemplo, kilo-toneladas, reduziria estas estimativas (e correspondentes erros padrão), sem afectar a discussão anterior.

- (b) Nos primeiros seis passos do algoritmo de exclusão sequencial, seriam excluídas, por ordem, as variáveis: P.Out, T.Jan, T.Ago, Radiacao, T.Jun e ano. O modelo ajustado será então:

```
> summary(lm(trigo ~ . -P.Out-T.Jan-T.Ago-Radiacao-T.Jun-ano , data=trigoAlentejo))
[...]
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -2.102e+06  9.265e+05 -2.269  0.0530 .
T.Fev        1.008e+05  3.999e+04  2.519  0.0358 *
T.Jul        5.253e+04  2.732e+04  1.923  0.0907 .
```



```

> summary(lm(trigo ~ . - P.Out - T.Jan - T.Ago - Radiacao - T.Jun - ano
+           - P.JJA - P.Nov - T.Jul , data=trigoAlentejo))
[...]
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -6.744e+05  4.269e+05  -1.580 0.142469
T.Fev       4.706e+04  3.698e+04   1.273 0.229365
P.Dez       6.497e+02  6.843e+02   0.949 0.362812 <---
superficie  2.495e+00  5.143e-01   4.852 0.000509 ***
---
Residual standard error: 58840 on 11 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6894, Adjusted R-squared:  0.6046
F-statistic: 8.137 on 3 and 11 DF, p-value: 0.003904

> summary(lm(trigo ~ . - P.Out - T.Jan - T.Ago - Radiacao - T.Jun - ano
+           - P.JJA - P.Nov - T.Jul - P.Dez , data=trigoAlentejo))
[...]
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -4.707e+05  3.675e+05  -1.281 0.224516
T.Fev       3.450e+04  3.439e+04   1.003 0.335542 <---
superficie  2.356e+00  4.910e-01   4.799 0.000434 ***
---
Residual standard error: 58600 on 12 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6639, Adjusted R-squared:  0.6079
F-statistic: 11.85 on 2 and 12 DF, p-value: 0.001441

> summary(lm(trigo ~ . - P.Out - T.Jan - T.Ago - Radiacao - T.Jun - ano
+           - P.JJA - P.Nov - T.Jul - P.Dez - T.Fev , data=trigoAlentejo))
[...]
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.140e+05  9.314e+04  -1.224 0.242733
superficie  2.175e+00  4.567e-01   4.763 0.000371 ***
---
Residual standard error: 58610 on 13 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6357, Adjusted R-squared:  0.6077
F-statistic: 22.69 on 1 and 13 DF, p-value: 0.0003706

```

Repare-se como o submodelo final, de regressão linear simples, tem (inevitavelmente) um valor ainda mais baixo de R^2 , já bastante próximo de R_{mod}^2 , mas que é ainda mais significativamente diferente de zero do que era o caso no submodelo intermédio acima discutido (o p -value no teste F de ajustamento global é de apenas $p=0.0003706$).

Para além das conclusões relativas ao problema em concreto, há algumas ilações gerais a extrair deste exemplo: (i) a importância de evitar ajustamentos de modelos com um pequeno número de observações; (ii) a instabilidade que pode estar associada a algoritmos de exclusão sequencial, em particular para conjuntos de dados com poucos indivíduos observados; (iii) a necessidade de evitar retirar conclusões precipitadas sobre a qualidade de modelos, apenas com base no valor do respectivo coeficiente de determinação; (iv) a necessidade de usar sempre o bom senso na avaliação dos resultados estatísticos.

Refira-se ainda um aspecto relativo ao conjunto de dados deste Exercício: resultados inferenciais como os que aqui foram discutidos podem ser questionados, uma vez que os dados não constituem uma amostra aleatória, mas são um registo censitário do que se foi passando na sequência de anos observada. Apenas faria sentido considerar a realização dos testes utili-

zados caso se considerasse que o que se passou em cada ano foi uma espécie de concretização duma experiência aleatória. Mesmo nesse caso, seria preciso admitir a existência de independência entre os resultados de sucessivos anos, algo que pode ser igualmente questionado nos dados em causa, onde surgem séries cronológicas de variáveis meteorológicas.

13. (a) Utilizamos o R para ajustar o modelo de regressão da variável V8 sobre todas as restantes variáveis. Podemos utilizar um atalho na fórmula do R que consiste em substituir por um ponto a listagem de todas as restantes variáveis na *data frame* como preditores. Para executar o algoritmo de exclusão sequencial, vamos optar por um nível de significância $\alpha = 0.10$. A análise da tabela de resultados associada ao ajustamento do modelo completo sugere que há várias variáveis que podem ser excluídas do modelo sem afectar de forma significativa a qualidade do ajustamento, com destaque para a variável V11, cujo *p-value*, no teste bilateral a $H_0: \beta_{11} = 0$, é enorme ($p = 0.99614$):

```
> summary(lm(V8 ~ . , data=vinho.RLM))
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.333e+00  7.558e-01 -1.764  0.07956 .
V2           4.835e-03  5.667e-02  0.085  0.93211
V3          -4.215e-02  3.363e-02 -1.253  0.21191
V4           4.931e-01  1.533e-01  3.216  0.00156 **
V5          -2.325e-02  1.302e-02 -1.786  0.07591 .
V6          -3.559e-03  2.429e-03 -1.465  0.14487
V7           7.058e-01  8.062e-02  8.755 2.33e-15 ***
V9          -1.000e+00  3.061e-01 -3.267  0.00132 **
V10          2.840e-01  6.855e-02  4.143 5.47e-05 ***
V11          1.068e-04  2.201e-02  0.005  0.99614
V12          4.387e-01  2.021e-01  2.171  0.03137 *
V13          3.208e-01  7.639e-02  4.199 4.37e-05 ***
V14          9.557e-05  1.563e-04  0.611  0.54182
---
Residual standard error: 0.3902 on 165 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8577, Adjusted R-squared:  0.8474
F-statistic: 82.9 on 12 and 165 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Procedemos agora a ajustar o submodelo resultante da exclusão do preditor V11. O comando do R pode ainda aproveitar o atalho na fórmula, indicando (precedida de um sinal negativo) o nome da variável que queremos excluir:

```
> summary(lm(V8 ~ . - V11 , data=vinho.RLM))
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.334e+00  7.427e-01 -1.796  0.07428 .
V2           4.951e-03  5.128e-02  0.097  0.92320
V3          -4.217e-02  3.315e-02 -1.272  0.20507
V4           4.931e-01  1.519e-01  3.246  0.00141 **
V5          -2.325e-02  1.297e-02 -1.792  0.07492 .
V6          -3.559e-03  2.422e-03 -1.469  0.14363
V7           7.059e-01  7.951e-02  8.878 1.06e-15 ***
V9          -1.000e+00  3.050e-01 -3.279  0.00127 **
V10          2.840e-01  6.735e-02  4.217 4.05e-05 ***
V12          4.383e-01  1.790e-01  2.449  0.01538 *
V13          3.206e-01  6.843e-02  4.686 5.78e-06 ***
V14          9.571e-05  1.531e-04  0.625  0.53264
---
```

```

Residual standard error: 0.389 on 166 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8577, Adjusted R-squared: 0.8483
F-statistic: 90.99 on 11 and 166 DF, p-value: < 2.2e-16

```

Como se pode verificar, a exclusão do preditor V11 não afectou o coeficiente de determinação $R^2 = 0.8577$ (até à quarta casa decimal). Este facto reflecte o enorme valor de prova ($p = 0.99614$) da variável excluída. Este facto traduz-se também num *aumento* do coeficiente R^2 modificado ($R^2_{adjusted}$), algo que nunca pode acontecer ao coeficiente de determinação usual quando se passa dum modelo para um seu submodelo. Continuam a existir vários preditores candidatos à exclusão, com destaque para V2, cujo p -value no teste bilateral a $H_0 : \beta_2 = 0$ é também muito grande: $p = 0.9232$. Ajustando o modelo com menos esse preditor, obtemos:

```

> summary(lm(V8 ~ . - V11 - V2 , data=vinho.RLM))
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.2732556  0.3929674  -3.240  0.00144 **
V3           -0.0416084  0.0325333  -1.279  0.20269
V4            0.4947522  0.1505264   3.287  0.00124 **
V5           -0.0234559  0.0127473  -1.840  0.06753 .
V6           -0.0035598  0.0024149  -1.474  0.14233
V7            0.7067612  0.0787511   8.975 5.69e-16 ***
V9           -1.0009149  0.3039571  -3.293  0.00121 **
V10          0.2836573  0.0670345   4.232 3.82e-05 ***
V12          0.4354675  0.1760931   2.473  0.01440 *
V13          0.3201306  0.0680210   4.706 5.27e-06 ***
V14          0.0001031  0.0001320   0.781  0.43566
---
Residual standard error: 0.3879 on 167 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8577, Adjusted R-squared: 0.8492
F-statistic: 100.7 on 10 and 167 DF, p-value: < 2.2e-16

```

Mais uma vez, o valor de R^2 não se altera, confirmando a dispensabilidade da variável agora excluída. Os valores de prova das variáveis presentes no modelo, embora já não tão elevados como em casos anteriores, sugerem que há ainda variáveis dispensáveis, com destaque para V14. Ajustando o novo submodelo resultante de excluir essa variável, obtem-se:

```

> summary(lm(V8 ~ . - V11 - V2 - V14, data=vinho.RLM))
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.266062   0.392404  -3.226 0.001507 **
V3           -0.041829   0.032494  -1.287 0.199767
V4            0.540169   0.138693   3.895 0.000142 ***
V5           -0.028327   0.011107  -2.550 0.011652 *
V6           -0.003183   0.002363  -1.347 0.179889
V7            0.718705   0.077164   9.314 < 2e-16 ***
V9           -1.018104   0.302809  -3.362 0.000957 ***
V10          0.286785   0.066837   4.291 3.00e-05 ***
V12          0.439005   0.175831   2.497 0.013497 *
V13          0.316561   0.067789   4.670 6.14e-06 ***
---
Residual standard error: 0.3874 on 168 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8572, Adjusted R-squared: 0.8496
F-statistic: 112.1 on 9 and 168 DF, p-value: < 2.2e-16

```

O coeficiente de determinação baixou, mas de forma muitíssimo ligeira, confirmando a dispensabilidade do preditor V14. Repare-se como o R^2 modificado continua a aumentar (embora de forma ligeira). O leque de preditores dispensáveis neste submodelo está reduzido a dois: V3 e V6. Exluímos a primeira, cujo valor de prova é superior, obtendo novo ajustamento:

```
> summary(lm(V8 ~ . - V11 -V2 - V14 - V3, data=vinho.RLM))
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	-1.403877	0.378251	-3.711	0.000279 ***
V4	0.522565	0.138285	3.779	0.000218 ***
V5	-0.029014	0.011115	-2.610	0.009860 **
V6	-0.003151	0.002368	-1.331	0.185019
V7	0.727268	0.077026	9.442	< 2e-16 ***
V9	-1.056654	0.301909	-3.500	0.000595 ***
V10	0.285137	0.066955	4.259	3.41e-05 ***
V12	0.540246	0.157567	3.429	0.000762 ***
V13	0.313494	0.067878	4.618	7.63e-06 ***

Residual standard error: 0.3882 on 169 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.8558, Adjusted R-squared: 0.849

F-statistic: 125.4 on 8 and 169 DF, p-value: < 2.2e-16

De novo, há uma muito ligeira alteração no valor de R^2 . No submodelo agora ajustado há uma única variável candidata a sair: a variável V6. O modelo resultante de excluir esse preditor é:

```
> summary(lm(V8 ~ . - V11 -V2 - V14 - V3 - V6, data=vinho.RLM))
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	-1.65205	0.32984	-5.009	1.36e-06 ***
V4	0.45247	0.12815	3.531	0.000533 ***
V5	-0.02662	0.01099	-2.422	0.016503 *
V7	0.72642	0.07720	9.410	< 2e-16 ***
V9	-0.93935	0.28941	-3.246	0.001411 **
V10	0.26873	0.06596	4.074	7.07e-05 ***
V12	0.52973	0.15772	3.359	0.000967 ***
V13	0.33218	0.06656	4.991	1.48e-06 ***

Residual standard error: 0.3891 on 170 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.8543, Adjusted R-squared: 0.8483

F-statistic: 142.4 on 7 and 170 DF, p-value: < 2.2e-16

Este novo submodelo já não tem variáveis candidatas a sair e é, portanto, o *submodelo final*, escolhido pelo algoritmo de exclusão sequencial (ao nível $\alpha = 0.10$, mas os resultados seriam neste exemplo idênticos se tivesse sido escolhido um nível de significância $\alpha = 0.05$). Trata-se dum modelo com sete variáveis preditoras. Repare-se como foi possível excluir quase metade dos preditores iniciais, baixando o valor original de R^2 (0.8577) para um valor apenas ligeiramente inferior: $R^2 = 0.8543$. O submodelo final é bem mais parcimonioso, sem perda substancial de qualidade.

O comando `step` do R escolhe o mesmo submodelo final com sete variáveis preditoras, como se pode confirmar executando o comando

```
> step(lm(V8 ~ . , data=vinho.RLM), direction="backward")
```

- (b) Embora os resultados da alínea anterior deixem antever o resultado do teste pedido nesta alínea, executaremos o *teste F parcial* para comparar o modelo completo original (com todas as variáveis preditoras) e o submodelo final. Nesta resolução, escrevemos os parâmetros do modelo completo com uma numeração não sequencial, de forma a que cada β_j tenha o mesmo índice que a variável V_j ($j = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14$) que esse coeficiente multiplica:

$$V8 = \beta_0 + \beta_2 V2 + \beta_3 V3 + \beta_4 V4 + \beta_5 V5 + \beta_6 V6 + \beta_7 V7 + \beta_9 V9 + \beta_{10} V10 \\ + \beta_{11} V11 + \beta_{12} V12 + \beta_{13} V13 + \beta_{14} V14 + \epsilon$$

O submodelo resulta de excluir as variáveis preditoras V2, V3, V6, V11 e V14:

$$V8 = \beta_0 + \beta_4 V4 + \beta_5 V5 + \beta_7 V7 + \beta_9 V9 + \beta_{10} V10 + \beta_{12} V12 + \beta_{13} V13 + \epsilon$$

Os dois modelos serão idênticos caso os coeficientes das variáveis excluídas do submodelo sejam todos nulos: $\beta_2 = \beta_3 = \beta_6 = \beta_{11} = \beta_{14} = 0$. Essa é a hipótese nula do teste.

Hipóteses: $H_0 : \beta_j = 0, \forall j \in \{2, 3, 6, 11, 14\}$ vs. $H_1 : \exists j \in \{2, 3, 6, 11, 14\}$ tal que $\beta_j \neq 0$.

Estatística do teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} \cap F_{(p-k, n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Unilateral direita): Rejeitar H_0 se $F_{calc} > f_{\alpha(p-k, n-(p+1))} = f_{0.05(5, 165)} \approx 2.27$ (entre 2.21 e 2.29, nas tabelas).

Conclusões: No nosso caso, o valor calculado da estatística é $F_{calc} = \frac{165}{5} \frac{0.8577 - 0.8543}{1 - 0.8577} \approx 0.788$. Assim, *não se rejeita* H_0 , que é a hipótese de igualdade entre modelo e submodelo. Esta conclusão está de acordo com as expectativas discutidas na sequência da alínea anterior.

É possível efectuar este teste F parcial a modelos encaixados, recorrendo ao comando `anova` do R, indicando como argumentos os referidos modelos ajustados. No nosso caso:

```
> vinho.lm.cmp <- lm(V8 ~ . , data=vinho.RLM)
> vinho.lm.sub <- lm(V8 ~ V4 + V5 + V7 + V9 + V10 + V12 + V13 , data=vinho.RLM)
> anova(vinho.lm.sub, vinho.lm.cmp)
Analysis of Variance Table
```

Model 1: V8 ~ V4 + V5 + V7 + V9 + V10 + V12 + V13

Model 2: V8 ~ V2 + V3 + V4 + V5 + V6 + V7 + V9 + V10 + V11 + V12 + V13 + V14

	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
1	170	25.732				
2	165	25.123	5	0.60889	0.7998	0.5513

O valor da estatística calculada (sem os arredondamentos introduzidos pelos nosso cálculos) é $F_{calc} = 0.7998$ e o respectivo valor de prova é $p = 0.5513$, indicando uma não rejeição de H_0 . Na listagem de resultados são ainda indicados os valores das Somas de Quadrados Residuais de modelo completo ($SQRE_c$) e submodelo ($SQRE_s$), na coluna *RSS*, o que serve para calcular a estatística através da sua expressão alternativa: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \frac{SQRE_s - SQRE_c}{SQRE_c}$. Um comentário final: o algoritmo de exclusão sequencial permite assegurar que dois submodelos obtidos em passos *consecutivos* do algoritmo não diferem significativamente. No entanto, após uma sequência de várias exclusões, poderia dar-se o caso de o submodelo final já diferir de forma significativa do modelo inicial. Assim, e embora não seja o caso neste

exercício, seria possível que o resultado dum teste análogo a este, noutro conjunto de dados, fosse diferente.

14. Pede-se para considerar o modelo de regressão linear múltipla de equação

$$v = \beta_0 + \beta_1 \text{cl} + \beta_2 \text{dl} + \beta_3 \text{r} + \beta_4 \text{b} + \epsilon .$$

- (a) Em geral, coeficientes de determinação tomam valores no intervalo $[0, 1]$. No entanto, a matriz de correlações entre cada par de variáveis é disponibilizada no enunciado. Assim, sabemos qual o coeficiente de determinação associado a todas as possíveis regressões lineares *simples* que tenham a variável v como variável resposta. O maior desses coeficientes de determinação corresponde à escolha do preditor \mathbf{b} , e seria $R_b^2 = (0.9555627)^2 = 0.9131001$. Uma vez que, acrescentando novos preditores, o coeficiente de determinação R^2 apenas pode crescer, sabemos que para a regressão múltipla indicada o coeficiente de determinação tem de estar no intervalo $]0.9131, 1]$. Trata-se duma informação que faz antever um modelo útil.
- (b) A qualidade do ajustamento do modelo é indicada de duas formas complementares: (i) um teste F de ajustamento global do modelo; e (ii) a análise do valor do coeficiente de determinação. Pelos resultados disponíveis no enunciado, este último é muito elevado: $R^2 = 0.9256$, sugerindo um bom modelo, que explica 92.56% da variabilidade total da variável resposta v . Este facto é confirmado pela claríssima rejeição da hipótese nula num teste de ajustamento global (veja-se a resolução do Exercício 9 para os pormenores dum teste deste tipo). De facto, o valor de prova associado à hipótese nula $H_0 : \mathcal{R}^2 = 0$ é inferior à precisão numérica do computador ($< 2.2 \times 10^{-16}$), ou seja, indistinguível de zero, pelo que não há dúvidas em rejeitar a hipótese nula (hipótese que indicaria um modelo inútil).
- (c) É pedido um intervalo a 95% de confiança para o coeficiente β_2 que, no modelo, multiplica a variável “distância ao solo dum cacho” (variável dl), a fim de avaliar a hipótese que esse coeficiente tenha o valor 0.005. Tem-se:

$$\left] b_2 - t_{\frac{\alpha}{2}(n-(p+1))} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2} , b_2 + t_{\frac{\alpha}{2}(n-(p+1))} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2} \right[$$

com $b_2 = 0.004121$, $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2} = 0.002218$ e $t_{\frac{\alpha}{2}(n-(p+1))} = t_{0.025(59)} = 2.00$. Logo, o IC pedido é $] - 0.000315, 0.008557[$. O valor sugerido no enunciado (0.005) pertence a este intervalo, logo é um valor admissível, a 95% de confiança.

- (d) i. O modelo completo tem quatro preditores. O pedido é para indicar qual destes quatro preditores pode ser excluído do modelo com a menor perda (não significativa) de qualidade de ajustamento. Tendo em conta a listagem de resultados do ajustamento do modelo completo, verifica-se que a variável para a qual um teste bilateral a $H_0 : \beta_j = 0$ daria não rejeição, de forma mais clara, é a variável cl , cujo p -value nesse teste é o mais elevado de todos os preditores: $p = 0.9870$. A escolha deve recair sobre o modelo com preditores dl , b e r .
- ii. Sabemos que a estatística do teste F parcial, quando se compara um modelo e submodelo que diferem numa única variável $\bar{\mathbf{x}}_j$, é o quadrado da estatística T que no modelo completo testa a hipótese $H_0 : \beta_j = 0$ (note que se trata do coeficiente da variável que foi excluída do modelo). Assim, a estatística do teste F parcial relevante será $F_{\text{calc}} = 0.016^2 = 0.000256$. Mas por outro lado, sabemos que esta estatística pode ser escrita como $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \cdot \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2}$. Nesta expressão conhecemos todos os valores menos

R_s^2 , que poderá assim ser calculado:

$$0.000256 = \frac{59}{1} \cdot \frac{0.9256 - R_s^2}{1 - 0.9256} \Leftrightarrow 3.228 \times 10^{-7} = 0.9256 - R_s^2 \Leftrightarrow R_s^2 \approx 0.9256 .$$

Assim, a quatro casas decimais não há alteração no valor de R^2 , resultante da exclusão de **c1**. A Soma de Quadrados Residual do submodelo pode ser obtida utilizando a expressão alternativa da estatística do teste F parcial: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \cdot \frac{SQRE_s - SQRE_c}{SQRE_c}$. Para poder efectuar o mesmo raciocínio, é necessário determinar o valor de $SQRE_c$. Uma vez que o enunciado fornece o valor de $\sqrt{QMRE_c} = 2.087$, temos que $QMRE_c = \frac{SQRE_c}{n-(p+1)} = 2.087^2 = 4.3556$. Logo, $SQRE_c = 4.3556 * 59 = 256.979$. Assim,

$$\begin{aligned} 0.000256 &= \frac{59}{1} \times \frac{SQRE_s - 256.979}{256.979} \Leftrightarrow 0.001115 = SQRE_s - 256.979 \\ &\Leftrightarrow SQRE_s = 256.9801 . \end{aligned}$$

- iii. Prosseguimos no algoritmo de exclusão sequencial, a partir do submodelo com os três preditores **d1**, **b** e **r**. Como a única informação disponível para os submodelos de dois preditores é o valor do coeficiente de determinação, vamos utilizar os testes F parciais, em vez dos testes t na justificação dos submodelos a escolher. Sabemos que, em modelos que diferem numa única variável, estes dois testes são equivalentes.

Nenhum submodelo de dois preditores, entre os quais esteja a variável **c1** já excluída no passo anterior, pode resultar do passo seguinte do algoritmo de exclusão sequencial. Assim, a questão reside em saber se algum dos três submodelos correspondentes à segunda linha da tabela do enunciado merece ser escolhido. Duas questões se colocam: (i) qual o melhor dos submodelos de dois preditores admissíveis; e (ii) se esse melhor submodelo difere, ou não, significativamente do submodelo actual. A resposta à primeira pergunta é fácil: o melhor dos submodelos candidatos é aquele que tem o maior coeficiente de determinação, não apenas pelo valor em si, mas também porque a esse maior valor de R_s^2 corresponderá o menor valor da estatística do teste F parcial que compara o modelo de três preditores com cada um dos possíveis submodelos de dois preditores. Este facto tornar-se-á claro ao efectuar o teste, o que teremos de fazer para dar resposta à segunda questão acima referida (no caso de todos os submodelos com dois preditores serem significativamente piores que o modelo de três preditores, este último seria o modelo final). O melhor submodelo com dois preditores é o submodelo com as variáveis **d1** e **b**, cujo coeficiente de determinação associado é $R_s^2 = 0.9229$. O valor muito próximo do valor do coeficiente de determinação do modelo com três preditores (que agora funciona como o modelo completo neste teste F parcial, e para o qual $R_c^2 = 0.9256$ e $p = 3$) sugere que a diferença não seja significativa. Mas façamos o teste F parcial, tendo em conta que a variável a excluir do modelo é a variável **r**, cujo coeficiente é β_3 :

Hipóteses: $H_0 : \beta_3 = 0$ vs. $H_1 : \beta_3 \neq 0$.

Estatística do teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} \cap F_{(p-k, n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Unilateral direita): Rejeitar H_0 se $F_{calc} > f_{\alpha(p-k, n-(p+1))} = f_{0.05(1,60)} = 4.00$.

Conclusões: O valor calculado da estatística é $F_{calc} = \frac{60}{1} \times \frac{0.9256 - 0.9229}{1 - 0.9256} \approx 2.177$.

Assim, *não se rejeita* H_0 , que é a hipótese de igualdade entre modelo e submodelo.

Esta conclusão está de acordo com as expectativas e sugere que podemos simplificar o modelo sem perda significativa de qualidade de ajustamento.

Falta ainda verificar se este submodelo com dois preditores é o modelo final, ou se é possível simplificar ulteriormente o modelo. Neste caso, queremos comparar o modelo de dois preditores **d1** e **b** a que chegámos, com os modelos de regressão linear simples de **v** com cada uma daquelas variáveis preditoras. Como se viu na alínea (a), a melhor destas duas variáveis preditoras, considerada isoladamente, é o preditor **b**, cujo coeficiente de determinação associado é $R_s^2 = 0.9131$. Vejamos se o modelo de regressão linear simples agora referido difere, de forma significativa, do modelo com dois preditores resultante do passo anterior (que aqui toma o papel de modelo completo, com $p = 2$):

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 = 0$ vs. $H_1 : \beta_2 \neq 0$.

Estatística do teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} \cap F_{(p-k, n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Unilateral direita): Rejeitar H_0 se $F_{calc} > f_{\alpha(p-k, n-(p+1))} = f_{0.05(1,61)} = 3.9985$.

Conclusões: O valor calculado da estatística é $F_{calc} = \frac{61}{1} \times \frac{0.9229 - 0.9131}{1 - 0.9229} \approx 7.7536$.

Logo, *rejeita-se* H_0 , a hipótese de igualdade entre modelo e submodelo. Esta conclusão indica que o modelo de regressão linear simples será significativamente pior que o submodelo com os dois preditores **b** e **d1**. Este último será o submodelo final.

(e) Nesta alínea trabalha-se com a regressão linear simples com variável resposta **v** e variável preditora **b**, logo de equação $v_i = \beta_0 + \beta_1 b_i + \epsilon_i$ ($i = 1, \dots, n$).

i. Como se trata duma regressão linear simples, podemos usar as fórmulas $b_1 = \frac{cov_{vb}}{s_b^2} = r_{vb} \frac{s_v}{s_b}$ e $b_0 = \bar{v} - b_1 \bar{b}$. As médias e variâncias de cada variável são dadas no enunciado, logo sabemos que $\bar{v} = 16.43750$, $\bar{b} = 17.53125$ e os desvios padrões são $s_v = \sqrt{54.85317} = 7.406293$ e $s_b = \sqrt{63.64980} = 7.978082$. Também conhecemos o coeficiente de correlação (igualmente disponibilizado no enunciado) $r_{vb} = 0.9555627$. Assim, $b_1 = 0.9555627 \cdot \frac{7.406293}{7.978082} = 0.8870774$ e $b_0 = 16.43750 - 0.8870774 \cdot 17.53125 = 0.8859243$. Logo, a equação da recta de regressão ajustada é $v = 0.8859 + 0.8871 b$. O declive ajustado indica que, por cada botão adicional por cacho, esperamos que vinguem, em média, mais 0.8871 frutos por cacho.

ii. O investigador chama a atenção que, dada a natureza das variáveis, tem de verificar-se $v \leq b$. No gráfico de **v** vs. **b**, disponibilizado no enunciado, essa relação reflecte-se no facto de todos os pontos estarem abaixo da bissectriz $v = b$. As observações que estão em cima dessa bissectriz correspondem a cachos em que todos os botões vingam.

A observação dos gráficos de resíduos do enunciado sugere que, apesar do valor bastante elevado de R^2 , existem alguns problemas com os pressupostos do modelo de regressão linear múltipla, nomeadamente para efeitos inferenciais. Assim, o primeiro gráfico indicia alguma tendência para um gráfico em forma de funil, o que levanta dúvidas sobre a validade do pressuposto de homogeneidade de variâncias. No segundo gráfico verifica-se que os quantis teóricos e empíricos estão longe de se dispor em linha recta, o que sugere erros aleatórios fortemente não-Normais. No terceiro gráfico é salientada uma observação influente, ou seja, cuja exclusão do conjunto de dados alteraria bastante a recta ajustada: a observação número 13, cuja distância de Cook excede 0.5. Este elevado valor da distância de Cook deve-se essencialmente ao elevado - em módulo - resíduo standardizado, já que $R_{13} \approx -4$ (recorde-se que as distâncias de Cook podem

ser escritas como $D_i = R_i^2 \cdot \left(\frac{h_{ii}}{1-h_{ii}} \right) \cdot \frac{1}{p+1}$ pelo que distâncias de Cook elevadas correspondem a grandes resíduos estandardizados $|R_i|$ e/ou a grandes valores do *leverage* h_{ii} . Note-se que o valor médio dos *leverages* é $\frac{p+1}{n} = \frac{2}{64} = 0.03125$, e a observação 13 tem um *leverage* próximo da média. Há duas observações com *leverage* algo elevado: as observações 62 ($h_{ii} \approx 0.20$) e 14 ($h_{ii} \approx 0.125$). Tratando-se duma regressão linear simples, sabemos que estas observações têm de ter valor da variável preditora \mathbf{b} mais distante da média dos valores dessa variável, ou seja, têm de ter um número de botões por cacho muito diferente de 17.53125. Este facto é confirmado pelo gráfico inicial, de \mathbf{v} vs. \mathbf{b} , onde as duas observações referidas têm um número de botões por cacho muito elevado, próximo de 40.

Nos gráficos surgem três observações de resíduos negativos elevados (em módulo): as observações 41, 33 e 13. A partir do gráfico original verificamos que se trata das observações em que maior parece ser a discrepância entre botões e frutos vingados, ou seja, os cachos onde há maiores problemas no vingamento.

É natural que uma parte importante destes problemas detectados nos gráficos de resíduos resulte da já referida restrição a que os dados estão sujeitos: $\mathbf{v} \leq \mathbf{b}$. Esta restrição não está incorporada no modelo de regressão linear múltipla. Como vimos, obriga a nuvem de pontos a estar no triângulo inferior direito do gráfico relacionando estas duas variáveis. Qualquer que seja a verdadeira equação da recta de regressão teórica ($\mathbf{v} = \beta_0 + \beta_1 \mathbf{b}$), este facto torna impossível que os erros aleatórios ϵ_i tenham distribuição Normal, uma vez que a simetria da Normal em torno do seu ponto médio entra em conflito com a existência duma barreira física (associada à desigualdade $\mathbf{v} \leq \mathbf{b}$) para além da qual o erro não pode tomar valores. É de esperar que a distribuição dos erros aleatórios seja assimétrica e de variâncias heterogéneas. Este facto condiciona o valor possível dos resíduos, a sua distribuição, etc.

Saliente-se ainda que, nos três gráficos de resíduos, são visíveis aglomerações de pontos que se distribuem em formas curiosas. Em particular, no primeiro gráfico existem resíduos que estão numa relação quase linear com os valores ajustados. É de supôr que se trata das observações para as quais $\mathbf{v} = \mathbf{b}$, já discutidas a propósito do gráfico inicial relacionando estas duas variáveis. De facto, para as observações i em que $v_i = b_i$, temos que a recta de regressão gera valores ajustados $\hat{v}_i = b_0 + b_1 b_i = b_0 + b_1 v_i$, o que equivale a dizer $v_i = \frac{\hat{v}_i - b_0}{b_1}$. Logo, os resíduos correspondentes serão: $e_i = v_i - \hat{v}_i = \left(\frac{\hat{v}_i}{b_1} - \frac{b_0}{b_1} \right) - \hat{v}_i = -\frac{b_0}{b_1} + \left(\frac{1}{b_1} - 1 \right) \hat{v}_i$. Ou seja, há uma relação linear exacta entre resíduos e valores esperados da variável resposta, nas observações para as quais $v_i = b_i$. O grupo de pontos em linha recta no primeiro gráfico de resíduos será, assim, o grupo de pontos em cima da bissectriz no gráfico original de \mathbf{v} vs. \mathbf{b} .

15. O conjunto de dados subjacente a este Exercício encontra-se num objecto de nome `trees`, no R. Nesse objecto, a variável `Diámetro` é designada `Girth`, a variável `Altura` é designada `Height`, e a variável `Volume` tem o mesmo nome. No entanto, toda a informação necessária para a resolução encontra-se no enunciado do Exercício.

(a) i. **Hipóteses:** $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = 0$, vs. $H_1 : \beta_1 \neq 0$ ou $\beta_2 \neq 0$.

Estatística do teste: $F = \frac{n-(p+1)}{p} \frac{R^2}{1-R^2} \cap F_{(p,n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Unilateral direita): Rejeitar H_0 se $F_{calc} > f_{\alpha(p,n-(p+1))} = f_{0.05(2,28)} \approx 3.33$ (entre 3.32 e 3.39, nas tabelas).

Conclusões: O enunciado indica que o valor calculado da estatística é $F_{calc} = 255$. Assim, *rejeita-se* H_0 , indicando que o modelo RLM difere significativamente do modelo nulo.

- ii. Nos testes a que o coeficiente β_j de cada preditor ($j = 1, 2$) seja nulo, os valores de prova dados no enunciado indicam que ambos são inferiores a $\alpha = 0.05$, pelo que haverá rejeição de $H_0 : \beta_j = 0$ em ambos os casos e, ao nível $\alpha = 0.05$, qualquer das regressões lineares simples possíveis terá uma qualidade de ajustamento significativamente pior. Já ao nível $\alpha = 0.01$ a situação é diferente. Enquanto o *p-value* para o teste a $H_0 : \beta_1 = 0$ é $p < 2 \times 10^{-16}$, ou seja, indistinguível de zero e portanto indicando com grande convicção que $\beta_1 \neq 0$, já o valor de prova no teste a $H_0 : \beta_2 = 0$ é $p = 0.0145$ e portanto superior a $\alpha = 0.01$. Assim, e embora por pouco, não se rejeita a hipótese $H_0 : \beta_2 = 0$ ao nível de significância $\alpha = 0.01$. Como tal, uma regressão linear simples de **Volume** sobre **Diâmetro** não difere significativamente (para $\alpha = 0.01$) da regressão com dois preditores ajustada no enunciado.
 - iii. Sabemos que numa regressão linear simples, o coeficiente de determinação é o quadrado do coeficiente de correlação entre o preditor e a variável resposta. Com base na matriz de correlações disponível no enunciado geral, temos que, na RLS de **Volume** sobre **Diâmetro** o coeficiente de determinação é $R^2 = 0.9671194^2 = 0.9353199$, enquanto que na RLS de **Volume** sobre **Altura** o coeficiente de determinação é $R^2 = 0.5982497^2 = 0.3579027$. Estes valores são coerentes com os resultados da alínea anterior. Quanto aos valores das estatísticas F nos testes de ajustamento global, podem ser obtidos pela fórmula da RLS, $F = (n-2) \frac{R^2}{1-R^2}$. Os valores nas duas regressões lineares simples são (e indicando o preditor pela sua inicial) $F_D = 29 \times \frac{0.9353199}{1-0.9353199} = 419.3605$ e $F_A = 29 \times \frac{0.3579027}{1-0.3579027} = 16.16449$.
- (b) Consideremos agora o modelo com base nas transformações logarítmicas das três variáveis originais. Designaremos por y o volume, por x_1 o diâmetro e por x_2 a altura.
- i. Partindo da relação linear entre as variáveis logaritmizadas, tem-se:

$$\begin{aligned}
 \ln(y) = b_0 + b_1 \ln x_1 + b_2 \ln x_2 &\Leftrightarrow y = e^{b_0 + b_1 \ln x_1 + b_2 \ln x_2} \\
 &\Leftrightarrow y = e^{b_0} e^{b_1 \ln x_1} e^{b_2 \ln x_2} \\
 &\Leftrightarrow y = \underbrace{e^{b_0}}_{=b_0^*} e^{\ln x_1^{b_1}} e^{\ln x_2^{b_2}} \\
 &\Leftrightarrow y = b_0^* x_1^{b_1} x_2^{b_2} .
 \end{aligned}$$

Assim, y é proporcional ao produto de potências de cada um dos preditores. A superfície em R^3 ajustada à nuvem de pontos das observações originais terá, tendo em conta os valores disponíveis no enunciado, equação $y = e^{-6.63162} x_1^{1.98265} x_2^{1.11712}$, ou seja, $Volume = 0.001318 Diâmetro^{1.98265} Altura^{1.11712}$.

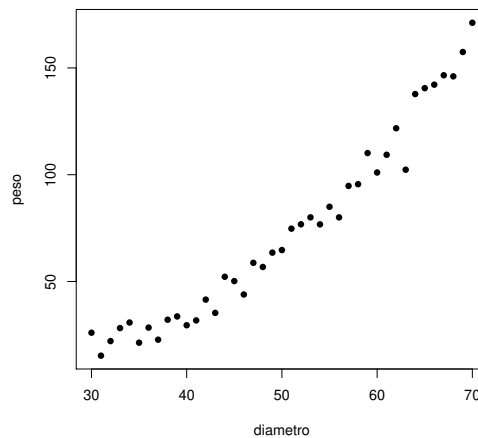
- ii. Esta frase baseia-se numa comparação errada, uma vez que as escalas da variável resposta y (usadas para medir, resíduos e todas as Somas de Quadrados numa regressão, logo também usadas para obter os coeficientes de determinação e portanto também o valor da estatística F) são diferentes nos dois modelos ajustados. Enquanto que na alínea anterior o volume era medido na escala original, nesta alínea a regressão linear usa a escala logarítmica para os volumes. Assim, o R^2 da alínea anterior media a proporção da variabilidade *dos volumes* observados que era explicada pela regressão então

usada, nesta alínea o R^2 mede a variabilidade *dos log-volumes* observados que é explicada pela nova regressão. Os *SQTs* de cada alínea não são iguais. Não são correctas as comparações referidas na frase do enunciado.

- (c) A troca de variável resposta piorou claramente o valor de R^2 do ajustamento. Este resultado pode parecer surpreendente à primeira vista, uma vez que do ponto de vista algébrico, uma relação da forma $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$ é equivalente a $x_2 = \frac{y - \beta_0 - \beta_1 x_1}{\beta_2} = \beta_0^* + \beta_1^* x_1 + \beta_2^* y$ (com $\beta_0^* = \frac{-\beta_0}{\beta_2}$, $\beta_1^* = \frac{-\beta_1}{\beta_2}$ e $\beta_2^* = \frac{1}{\beta_2}$). Além disso, numa regressão linear simples, a troca do preditor e da variável resposta, se bem que muda a equação da recta ajustada, não muda a qualidade do ajustamento (uma vez que $R^2 = r_{xy}^2$, e o coeficiente de correlação é simétrico nos seus argumentos). Mas numa regressão linear múltipla, permutar a variável resposta com um dos preditores pode, como este exemplo ilustra, gerar um modelo de qualidade bastante diferente. O exemplo sugere a razão de ser deste facto: as variáveis *Volume* e *Diâmetro* estão fortemente correlacionadas entre si. Qualquer modelo de regressão linear que tenha uma dessas variáveis como variável resposta, e a outra como preditor, terá de ter $R^2 \geq (0.9671194)^2 = 0.9353199$. Mas a variável *Altura*, que foi agora colocada como variável resposta, não está fortemente correlacionada com nenhuma das duas outras. Ao desempenhar o papel de variável resposta, com as outras duas variáveis como preditores, o valor do R^2 resultante poderá ser elevado, mas como este exemplo ilustra, poderá não o ser.

16. (a) O gráfico pedido pode ser obtido da forma usual:

```
> plot(ameixas, pch=16)
```



É visível uma relação curvilínea, mas uma relação linear entre diâmetro e peso não seria totalmente disparatada, como primeira aproximação. A recta de regressão resultante é:

```
> ameixas.lm <- lm(peso ~ diametro, data=ameixas)
> ameixas.lm
[...]
```

Coefficients:

(Intercept)	diâmetro
-106.618	3.615

O gráfico da recta $y = -106.618 + 3.615x$ é dado na alínea seguinte (em conjunto com o gráfico da parábola pedida nessa alínea).

-
- (b) É pedida uma *regressão polinomial* entre diâmetro e peso (mais concretamente uma relação quadrática), que pode ser ajustada como um caso especial de regressão múltipla, apesar de haver um único preditor (**diametro**). De facto, e como foi visto nas aulas teóricas, a equação polinomial de segundo grau $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2$ pode ser vista como uma relação linear de fundo entre a variável resposta Y e dois preditores: $X_1 = X$ e $X_2 = X^2$. Para ajustar este modelo, procedemos da seguinte forma:

```
> ameixas2.lm <- lm(peso ~ diametro + I(diametro^2), data=ameixas)
> summary(ameixas2.lm)
(...)
Coefficients:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  63.763698  18.286767   3.487  0.00125 **
diametro     -3.604849   0.759323  -4.747  2.91e-05 ***
I(diametro^2)  0.072196   0.007551   9.561  1.17e-11 ***
---
Residual standard error: 6.049 on 38 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9826, Adjusted R-squared:  0.9816
F-statistic:  1071 on 2 and 38 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

O ajustamento global deste modelo é muito bom. É possível interpretar o valor $R^2 = 0.9826$ da mesma forma que para qualquer outro modelo de regressão linear múltipla: este modelo explica cerca de 98,26% da variabilidade dos pesos das ameixas. O valor correspondente para o modelo linear ajustado na alínea anterior é $R^2 = 0.9406$.

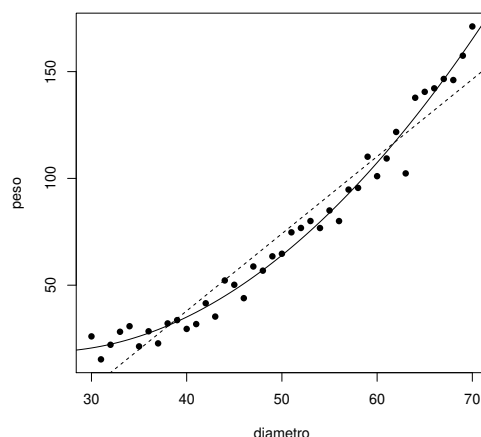
Os parâmetros do modelo (β_0 , β_1 e β_2) são estimados, respectivamente, por: $b_0 = 63.763698$, $b_1 = -3.604849$ e $b_2 = 0.072196$. Logo, a parábola ajustada tem a seguinte equação:

$$peso = 63.763698 - 3.604849 \text{ diametro} + 0.072196 \text{ diametro}^2 .$$

Deve salientar-se que a equação da recta de regressão obtida na alínea anterior (que corresponde a ajustar um polinómio de primeiro grau), **não** é a equação que resulta de deixar cair a parcela associada a x^2 na equação da parábola agora obtida.

Para desenhar esta parábola em cima da nuvem de pontos criada acima, já não é possível usar o comando **abline** (que apenas serve para traçar rectas). Podemos, no entanto, usar o comando **curve**, como se ilustra seguidamente. O argumento **add=TRUE** usado nesse comando serve para que o gráfico da função cuja expressão é dada no comando, seja traçado em cima da janela gráfica já aberta (e não criando uma nova janela gráfica). Como pedido na alínea anterior, também se representa (a tracejado) a recta de regressão de peso sobre diâmetro, a fim de visualizar a melhoria do ajustamento ao passar dum polinómio de grau 1 (associado à recta) para um polinómio de grau 2 (associado à parábola).

```
> curve(63.763698 - 3.604849*x + 0.072196*x^2, from=25, to=75, add=TRUE)
> abline(ameixas.lm, lty="dashed")
```



- (c) Pedem-se para testar se vale a pena passar do modelo linear para o modelo quadrático, ou seja, saber se o ajustamento da parábola é significativamente melhor do que o ajustamento dum recta de regressão. Para responder a esta pergunta, basta fazer um teste T à hipótese de que o coeficiente do termo quadrático β_2 seja nulo. De facto, a equação do modelo quadrático é $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2$. Se $\beta_2 = 0$, recupera-se a equação do modelo linear, $Y = \beta_0 + \beta_1 X$. Eis os passos deste teste:

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 = 0$ vs. $H_1 : \beta_2 \neq 0$

Estatística do Teste: $T = \frac{\hat{\beta}_2 - 0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} \cap t_{(n-(p+1))}$, sob H_0 .

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica: (Bilateral) Rejeitar H_0 se $|T_{\text{calc}}| > t_{\frac{\alpha}{2}(n-(p+1))}$.

Conclusões: Como $T_{\text{calc}} = \frac{b_2 - 0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} = \frac{0.072196}{0.007551} = 9.561$ (valor disponível na coluna de nome `t value`) é maior que $t_{0.025(28)} = 2.048$, rejeita-se H_0 ao nível de significância de 0.05, isto é, o modelo quadrático tem um ajustamento significativamente diferente (melhor) que o modelo linear. Registe-se que o valor de prova (*p-value*) associado ao valor calculado da estatística está na listagem do ajustamento do modelo, ao lado do valor da estatística correspondente ao teste a $\beta_2 = 0$, sendo 1.17×10^{-11} , pelo que a conclusão é válida para qualquer dos níveis usuais de α .

Alternativamente, seria possível (e equivalente) usar um teste F parcial para comparar o modelo quadrático com o submodelo linear. Vamos utilizar o comando `anova` do F para efectuar esse teste:

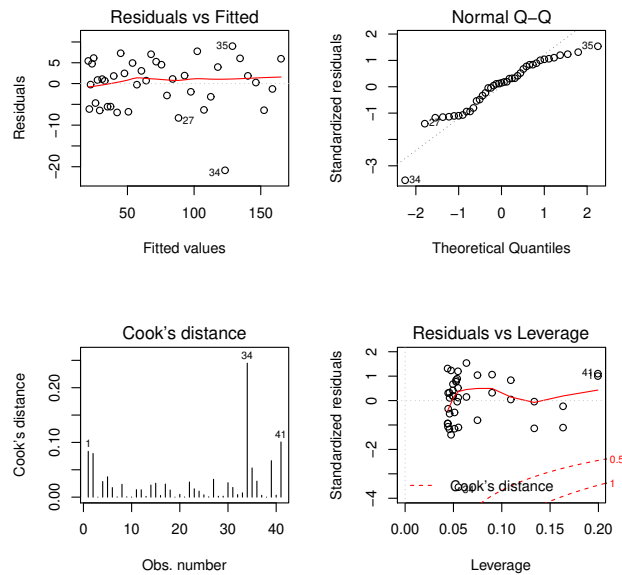
```
> anova(ameixas.lm, ameixas2.lm)
Analysis of Variance Table

Model 1: peso ~ diametro
Model 2: peso ~ diametro + I(diametro^2)
  Res.Df  RSS Df Sum of Sq    F    Pr(>F)
1      39 4735.3
2      38 1390.5  1    3344.9 91.411 1.171e-11 ***
```

Como se pode constatar, o valor da estatística deste teste F parcial, que compara um modelo completo (quadrático) e um submodelo (linear) que diferem num único preditor ($x_2 = x^2$) é (a menos de erros de arredondamento) o quadrado do valor da estatística do teste T a que o coeficiente do único preditor que distingue os dois modelos seja nulo: $F_{calc} = 91.411 = 9.561^2$. Os p -values são, nos dois casos, iguais. Trata-se dum teste equivalente.

(d) Vejamos os principais gráficos dos resíduos e diagnósticos:

```
> plot(ameixas2.lm, which=c(1,2,4,5))
```



Todos os gráficos parecem corresponder ao que seria de desejar, com exceção da existência duma observação (a número 34) que, sob vários aspectos é invulgar: tem um resíduo elevado (em módulo), sai fora da linearidade no *qq-plot* (que parece adequado para as restantes observações) e tem a maior distância de Cook (cerca de 0.25 e bastante maior que qualquer das restantes). Trata-se evidentemente duma observação anómala (qualquer que seja a razão), mas tratando-se duma observação isolada não é motivo para questionar o bom ajustamento geral do modelo.

(e) Para responder a esta questão, será necessário ajustar um polinómio de terceiro grau aos dados. O ajustamento correspondente é dado por:

```
> ameixas3.lm <- lm(formula = peso ~ diametro + I(diametro^2) + I(diametro^3), data = ameixas)
> summary(ameixas3.lm)
(...)
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  7.127e+01  8.501e+01   0.838   0.407
diametro     -4.089e+00  5.405e+00  -0.757   0.454
I(diametro^2) 8.222e-02  1.110e-01   0.741   0.463
I(diametro^3) -6.682e-05  7.380e-04  -0.091   0.928

Residual standard error: 6.13 on 37 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9826, Adjusted R-squared:  0.9812
F-statistic: 695.1 on 3 and 37 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

O polinómio de terceiro grau ajustado tem equação

$$peso = 71.27 - 4.089 \text{ diametro} + 0.08222 \text{ diametro}^2 - 0.0006682 \text{ diametro}^3 .$$

No entanto, o acréscimo no valor do valor de R^2 não se faz sentir nas quatro casas decimais mostradas, indicando que o ganho na qualidade de ajustamento com a passagem dum modelo quadrático para um modelo cúbico é quase inexistente. Mais formalmente, um teste de hipóteses bilateral a que o coeficiente do termo cúbico seja nulo, $H_0 : \beta_3 = 0$ (em cujo caso o modelo cúbico e quadrático coincidem) vs. $H_1 : \beta_3 \neq 0$, não permite rejeitar a hipótese nula (o valor de prova é um elevadíssimo $p = 0.928$). Logo, os modelos quadrático e cúbico não diferem significativamente, preferindo-se nesse caso o mais parcimonioso modelo quadrático (a parábola).

Refira-se ainda que, como para qualquer outra regressão linear múltipla, também aqui se verifica que não é possível identificar o modelo quadrático a partir do modelo cúbico: a equação da parábola obtida na alínea 16b não é igual à que se obteria ignorando a última parcela do ajustamento cúbico agora efectuado.

Repare-se ainda que, na tabela do ajustamento deste modelo cúbico, nenhum dos coeficientes das variáveis predictoras tem valor significativamente diferente de zero, sendo o menor dos valores de prova (p -values) nos testes à hipótese $H_0 : \beta_j = 0$ vs. $H_1 : \beta_j \neq 0$, um elevado $p = 0.454$. No entanto, esse facto não legitima a conclusão de que se poderiam excluir, simultaneamente e sem perdas significativas na qualidade do ajustamento, *todas* as parcelas do modelo correspondentes a estes coeficientes β_j . Aliás, se assim se fizesse, deitar-se-ia fora qualquer relação entre peso e diâmetro das ameixas, quando sabemos que o modelo acima referido explica 98.26% da variabilidade dos pesos com base na relação destes com os diâmetros. Este exemplo ilustra bem que os testes t aos coeficientes β_j não devem ser usados para justificar exclusões simultâneas de mais do que um preditor.

17. Vamos contruir o intervalo de confiança a $(1 - \alpha) \times 100\%$ para $\vec{a}^t \vec{\beta}$, a partir da distribuição indicada no enunciado. Sendo $t_{\frac{\alpha}{2}}$ o valor que, numa distribuição $t_{n-(p+1)}$, deixa à direita uma região de probabilidade $\alpha/2$, temos a seguinte afirmação probabilística, na qual trabalhamos a dupla desigualdade até deixar a combinação linear (para a qual se quer o intervalo de confiança) isolada no meio:

$$\begin{aligned} P \left[-t_{\frac{\alpha}{2}} < \frac{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}} - \vec{a}^t \vec{\beta}}{\hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}}} < t_{\frac{\alpha}{2}} \right] &= 1 - \alpha \\ P \left[-t_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} < \vec{a}^t \hat{\vec{\beta}} - \vec{a}^t \vec{\beta} < t_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} \right] &= 1 - \alpha \\ P \left[t_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} > \vec{a}^t \vec{\beta} - \vec{a}^t \hat{\vec{\beta}} > -t_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} \right] &= 1 - \alpha \quad (\text{multiplicando por } -1) \\ P \left[\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}} - t_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} < \vec{a}^t \vec{\beta} < \vec{a}^t \hat{\vec{\beta}} + t_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} \right] &= 1 - \alpha \end{aligned}$$

Assim, calculando o valor $\vec{a}^t \vec{b} = a_0 b_0 + a_1 b_1 + \dots + a_p b_p$ do estimador $\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}$ e o erro padrão $\hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}}$, para a nossa amostra, temos o intervalo a $(1 - \alpha) \times 100\%$ de confiança para $\vec{a}^t \vec{\beta} = a_0 \beta_0 + a_1 \beta_1 + \dots + a_p \beta_p$:

$$\left[\vec{a}^t \vec{b} - t_{\frac{\alpha}{2}[n-(p+1)]} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} \quad , \quad \vec{a}^t \vec{b} + t_{\frac{\alpha}{2}[n-(p+1)]} \cdot \hat{\sigma}_{\vec{a}^t \hat{\vec{\beta}}} \quad \right]$$

18. Parte-se dum regressão linear simples relacionando a variável resposta **Peso** e o preditor **Calibre**.

- (a) A ordenada na origem natural é $\beta_0 = 0$: a calibre nulo corresponde inexistência de fruto, ou seja, peso nulo. O intervalo a 95% de confiança para a ordenada na origem é dado por:

$$\left] b_0 - t_{\frac{\alpha}{2}(n-2)} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0} \quad , \quad b_0 + t_{\frac{\alpha}{2}(n-2)} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0} \quad \left[\right.$$

No enunciado verifica-se que $b_0 = -210.3137$, com erro padrão associado $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0} = 3.8078$. Tem-se ainda $t_{0.025(1271)} \approx 1.96$. Logo, o IC pedido é $\left] -217.777, -202.8504 \left[\right.$. Este intervalo está muito longe de incluir o valor natural $\beta_0 = 0$, pelo que essa eventualidade pode ser excluída. Não sendo um resultado encorajador, a verdade é que não faz sentido utilizar um modelo deste tipo para frutos de calibre próximo de zero. Os calibres utilizados no ajustamento do modelo variaram entre 53 e 79, pelo que deve evitar-se utilizar este modelo para calibres muito distantes da gama de calibres observados.

- (b) Nesta alínea ajustou-se um polinómio de segundo grau, através dum modelo de regressão múltipla em que $X_1 = \text{Calibre}$ e $X_2 = \text{Calibre}^2$. A equação de base neste modelo é $\text{Peso} = \beta_0 + \beta_1 \text{Calibre} + \beta_2 \text{Calibre}^2$.

i. A equação da parábola ajustada é: $\text{Peso} = 72.33140 - 3.38747 \text{Calibre} + 0.06469 \text{Calibre}^2$. Observe como a ordenada na origem e o coeficiente da variável **Calibre** são radicalmente diferentes do que eram na regressão linear simples.

ii. O modelo linear e o modelo quadrático são equivalentes caso $\beta_2 = 0$. Essa hipótese pode ser testada como qualquer outro teste t a um parâmetro β_j individual do modelo:

Hipóteses: $H_0 : \beta_2 = 0$ vs. $H_1 : \beta_2 \neq 0$.

Estatística do teste: $T = \frac{\hat{\beta}_2 - 0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_2}} \cap t_{n-(p+1)}$

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Bilateral): Rejeitar H_0 se $|T_{calc}| > t_{\alpha/2(n-3)} = t_{0.025(1270)} \approx 1.962$.

Conclusões: O valor calculado da estatística do teste é dado no enunciado, na penúltima coluna da tabela *Coefficients*: $T_{calc} = \frac{0.06469}{0.01067} = 6.064$. Logo, rejeita-se claramente a hipótese nula $\beta_2 = 0$, pelo que o modelo polinomial (quadrático) tem um ajustamento significativamente melhor que o modelo linear. Repare-se como este resultado está associado a um aumento bastante pequeno do coeficiente de determinação R^2 (de 0.8638 para 0.8677). Este facto está, mais uma vez, associado à grande dimensão da amostra ($n = 1273$), que permite considerar significativas diferenças tão pequenas quanto estas.

19. Em notação matricial/vectorial, a equação base deste modelo é $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$ com $\mathbf{X} = \vec{\mathbf{1}}_n$ e $\boldsymbol{\beta}$ o vector com um único elemento, β_0 (o único parâmetro do modelo).

- (a) A fórmula (disponível no formulário) para o vector dos estimadores de mínimos quadrados do modelo linear contínua válida, pelo que $\hat{\beta}_0 = \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \vec{\mathbf{Y}}$. Como

$$\mathbf{X}^T \vec{\mathbf{Y}} = [1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1] \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n Y_i, \quad \text{e} \quad \mathbf{X}^T \mathbf{X} = [1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1] \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = n,$$

temos que $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{n}$ e $\hat{\beta}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i = \bar{Y}$. Ou seja, o estimador de mínimos quadrados de β_0 é a média amostral da variável Y .

- (b) Tem-se $E[\hat{\beta}_0] = E[\hat{\beta}] = E[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \vec{Y}] = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \underbrace{E[\vec{Y}]}_{=X\vec{\beta}} = \beta = \beta_0$ (estimador cen-

trado). Por outro lado, os passos do modelo linear também se aplicam neste caso, produzindo a fórmula geral para a matriz de covariâncias. Logo, $V[\hat{\beta}_0] = V[\hat{\beta}] = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \frac{\sigma^2}{n}$.

- (c) Admitindo os habituais pressupostos do modelo de regressão linear, continua válido que $\hat{\beta}_0 = \hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \vec{Y}$ tem distribuição normal (multinormal com uma só componente), de média $E[\hat{\beta}] = \beta = \beta_0$ e variância $V[\hat{\beta}] = \frac{\sigma^2}{n}$ (como determinado na alínea b). Ou seja, $\hat{\beta}_0 \cap \mathcal{N}(\beta_0, \sigma^2/n)$.

- (d) Por definição $SQR = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$. Considerando o modelo em estudo e o resultado obtido na alínea a), $\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 = \bar{Y}, \forall i = 1, \dots, n$, pelo que $SQR = \sum_{i=1}^n (\bar{Y} - \bar{Y})^2 = 0$. Assim,

$$SQR = 0 \quad \text{e} \quad SQRE = SQT - SQR = SQT.$$

Isto é, este modelo explica 0% da variabilidade total de Y . Toda a variabilidade de Y é residual.

- (e) Seja $\{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\}$ uma amostra aleatória duma população normal com média μ e variância σ^2 , isto é, $Y_i \cap \mathcal{N}(\mu, \sigma^2), \forall i$ e $\{Y_i\}_{i=1}^n$ v.a. independentes. De acordo com os conhecimentos adquiridos na disciplina introdutória de Estatística (primeiros ciclos do ISA), $\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i$ é um estimador de μ e $\bar{Y} \cap \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$.

Considerando o modelo linear sem preditores e admitindo os usuais pressupostos, sabemos que $Y_i \cap \mathcal{N}(\beta_0, \sigma^2), \forall i$ e $\{Y_i\}_{i=1}^n$ são v.a. independentes, ou seja, estamos na situação considerada na outra disciplina de Estatística (com $\beta_0 = \mu$). Não admira assim que $\hat{\beta}_0 = \bar{Y}$ e que, como se viu na alínea c), $\hat{\beta}_0 \cap \mathcal{N}(\beta_0, \sigma^2/n)$. Isto é, numa situação em que só temos informação sobre a variável Y , a melhor maneira de a modelar, de estimar um novo valor dessa variável, é através da sua média amostral. A regressão linear, com um ou mais preditores, estende esta situação, admitindo que para prever novos valores de Y utilizamos informação extra, informação fornecida pelas variáveis predictoras.

- (f) Vamos utilizar o teste F parcial para comparar um modelo com p preditores e o seu submodelo *sem preditores* ($k = 0$):

$$\text{Modelo completo (C)} \quad Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_p x_p$$

$$\text{Submodelo (S)} \quad Y = \beta_0$$

Hipóteses: $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_p = 0$ vs. $H_1 : \beta_1 \neq 0 \vee \beta_2 \neq 0 \vee \dots \vee \beta_p \neq 0$

Estatística do Teste:

$$F = \frac{(SQRE_s - SQRE_c)/(p - k)}{SQRE_c/(n - (p - 1))} \cap F_{(p-k, n-(p+1))}, \text{ sob } H_0$$

Como $k = 0$ e $SQRE_s = SQT$, temos que

$$F = \frac{(SQT - SQRE_c)/p}{SQRE_c/(n - (p - 1))} = \frac{SQR_c/p}{SQRE_c/(n - (p - 1))} = \frac{QMR_c}{QMRE_c} \cap F_{(p, n-(p+1))},$$

o que corresponde à estatística (e às hipóteses) do teste de ajustamento global do modelo completo (com p preditores). Ou seja, o teste de ajustamento global de um modelo não

é mais do que um teste F parcial que compara esse modelo com o modelo nulo (sem preditores). A Hipótese Nula no teste de ajustamento global corresponde a dizer que o modelo completo não se distingue do modelo nulo.

20. Trata-se dum modelo linear, mas sem constante aditiva β_0 . Neste caso, a matriz \mathbf{X} do modelo (cujas colunas geram o subespaço onde se pretende ajustar o modelo) será constituída por uma única coluna, com os valores da variável preditora X (não existindo a usual coluna de uns, que estava associada à constante aditiva do modelo). O modelo, em forma matricial/vectorial, continua a escrever-se como $\vec{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\vec{\beta} + \epsilon$, embora agora $\vec{\beta}$ seja um escalar: β_1 .

(a) Existe um único parâmetro no modelo (β_1) e a fórmula usual para o vector dos estimadores dos parâmetros no modelo linear (que continua válida, mas com a nova matriz \mathbf{X} acima referida) vai produzir um único estimador. De facto, $\vec{\beta} = (\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^t\vec{\mathbf{Y}}$. Mas $\mathbf{X}^t\vec{\mathbf{Y}}$ é o produto interno dos dois vectores \mathbf{X} e $\vec{\mathbf{Y}}$, com valor $\sum_{i=1}^n x_i Y_i$. Analogamente, $\mathbf{X}^t\mathbf{X} = \sum_{j=1}^n x_j^2$, pelo que $(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{\sum_{j=1}^n x_j^2}$, ficando então $\vec{\beta} = \hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i Y_i}{\sum_{j=1}^n x_j^2}$.

(b) Com os pressupostos usuais no modelo de regressão linear, o vector das observações $\vec{\mathbf{Y}}$ tem distribuição Multinormal, com vector médio $\mathbf{X}\vec{\beta} = \beta_1\mathbf{X}$ e matriz de variâncias-covariâncias $\sigma^2\mathbf{I}_n$, como no caso usual. Também se mantém válido que $\vec{\beta} = \hat{\beta}_1 = (\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^t\vec{\mathbf{Y}}$ é o produto duma matriz constante, $(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^t$, e do vector Multinormal $\vec{\mathbf{Y}}$, logo terá distribuição Normal (Multinormal, mas com uma única componente), de média $E[\vec{\beta}] = \vec{\beta} = \beta_1$ e variância $V[\vec{\beta}] = \sigma^2(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1} = \frac{\sigma^2}{\sum_{j=1}^n x_j^2}$.

21. (a) O modelo de regressão linear múltipla relaciona uma variável resposta Y com p variáveis predictoras X_1, X_2, \dots, X_p . Designando por $\vec{\mathbf{Y}}$ o vector das n observações da variável resposta Y , $\vec{\epsilon}$ o vector dos n erros aleatórios correspondentes, $\vec{\beta}$ o vector dos $p+1$ parâmetros do modelo, $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$, e \mathbf{X} a matriz $n \times (p+1)$, cuja primeira coluna é constituída por n uns e cada uma das restantes p colunas contém as n observações duma variável preditora, tem-se:

$$\vec{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1(1)} & x_{2(1)} & \cdots & x_{p(1)} \\ 1 & x_{1(2)} & x_{2(2)} & \cdots & x_{p(2)} \\ 1 & x_{1(3)} & x_{2(3)} & \cdots & x_{p(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1(n)} & x_{2(n)} & \cdots & x_{p(n)} \end{bmatrix}, \vec{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}, \vec{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}$$

O modelo de regressão linear múltipla é então dado por:

- i. $\vec{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\vec{\beta} + \vec{\epsilon}$
- ii. $\vec{\epsilon} \cap \mathcal{N}_n(\vec{\mathbf{0}}, \sigma^2\mathbf{I}_n)$,

sendo $\vec{\mathbf{0}}$ o vector de n zeros e \mathbf{I}_n a matriz identidade $n \times n$. Na segunda condição, indica-se que o vector dos erros aleatórios segue uma distribuição Multinormal, com vector médio dado pelo vector de zeros (ou seja, cada erro aleatório individual tem valor esperado zero) e matriz de variâncias-covariâncias diagonal, com os elementos diagonais todos iguais a σ^2 . Uma vez que, numa matriz de (co-)variâncias os elementos diagonais representam as variâncias de cada componente do vector, esta condição indica que $V[\epsilon_i] = \sigma^2, \forall i$. O facto

de os elementos não diagonais da matriz $\sigma^2 \mathbf{I}_n$ serem todos nulos equivale a dizer que a covariância entre elementos diferentes do vector aleatório dos erros é sempre nula (ou seja, $Cov[\epsilon_i, \epsilon_j] = 0$, sempre que $i \neq j$) e, como sabemos, numa distribuição Multinormal tal facto implica a independência desses elementos.

- (b) O vector $\vec{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)^t$ dos estimadores dos $p + 1$ parâmetros dum modelo linear é dado (ver formulário) por $\vec{\beta} = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\mathbf{Y}}$. Mas, pelo modelo, tem-se $\vec{\mathbf{Y}} = \mathbf{X} \vec{\beta} + \vec{\epsilon}$. Substituindo, tem-se:

$$\vec{\beta} = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t (\mathbf{X} \vec{\beta} + \vec{\epsilon}) = \underbrace{(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{X}}_{=\mathbf{I}} \vec{\beta} + (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon} = \vec{\beta} + (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon},$$

como se pedia para mostrar.

- (c) A expressão da alínea anterior é a soma dum vector não aleatório, $\vec{\beta}$, com um vector aleatório, $(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}$. Ora, para qualquer vector aleatório $\vec{\mathbf{W}}$ e vector não aleatório $\vec{\mathbf{a}}$ verifica-se $E[\vec{\mathbf{W}} + \vec{\mathbf{a}}] = E[\vec{\mathbf{W}}] + \vec{\mathbf{a}}$. Logo, no nosso caso, tem-se: $E[\vec{\beta}] = E[\vec{\beta} + (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}] = \vec{\beta} + E[(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}]$. A segunda parcela é o vector esperado dum vector que resulta de multiplicar uma matriz não aleatória $((\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t)$ por um vector aleatório ($\vec{\epsilon}$). Por outra propriedade operatória dos vectores esperados, tem-se $E[\mathbf{B} \vec{\mathbf{W}}] = \mathbf{B} E[\vec{\mathbf{W}}]$, onde \mathbf{B} é uma matriz não aleatória. Assim, $E[\vec{\beta}] = \vec{\beta} + E[(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}] = \vec{\beta} + (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t E[\vec{\epsilon}] = \vec{\beta} + \vec{\mathbf{0}} = \vec{\beta}$.

Por outro lado, tendo em conta a propriedade operatória geral de matrizes de (co-)variâncias, $V[\vec{\mathbf{W}} + \vec{\mathbf{a}}] = V[\vec{\mathbf{W}}]$, tem-se $V[\vec{\beta}] = V[\vec{\beta} + (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}] = V[(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}]$. Outra propriedade operatória de matrizes de (co-)variâncias diz-nos que $V[\mathbf{B} \vec{\mathbf{W}}] = \mathbf{B} V[\vec{\mathbf{W}}] \mathbf{B}^t$, para uma matriz não aleatória \mathbf{B} . Logo (e sendo no nosso caso $\mathbf{B} = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t$), tem-se:

$$\begin{aligned} V[\vec{\beta}] &= V[(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \vec{\epsilon}] = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t V[\vec{\epsilon}] [(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t]^t \\ &= (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \sigma^2 \mathbf{I}_n \mathbf{X} [(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}]^t = \sigma^2 (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{X} [(\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}]^t = \sigma^2 (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1}. \end{aligned}$$

Notas:

- Embora o vector esperado e matriz de variâncias de $\vec{\beta}$ tenham sido calculados de forma diferente nas aulas, as propriedades usadas para chegar ao resultado final são as mesmas.
- Este exercício fazia parte do Grupo III na primeira chamada de exame do ano 2016-17.

22. O R^2 modificado definiu-se como $R_{mod}^2 = 1 - \frac{QMRE}{QMT}$ onde $QMT = \frac{SQT}{n-1} = s_y^2$.

- (a) Tem-se $R_{mod}^2 = 1 - \frac{QMRE}{QMT} = 1 - \frac{\frac{SQRE}{n-(p+1)}}{\frac{SQT}{n-1}} = 1 - \frac{n-1}{n-(p+1)} \times \frac{SQRE}{SQT}$. Mas $\frac{SQRE}{SQT} = \frac{SQT - SQR}{SQT} = 1 - R^2$. Substituindo na expressão anterior, tem-se o resultado pretendido: $R_{mod}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-(p+1)}$.
- (b) Por definição, a estatística do teste F de ajustamento global tem valor $F_{calc} = \frac{QMR}{QMRE} = \frac{n-(p+1)}{p} \cdot \frac{R^2}{1-R^2}$. Ora, usando a expressão da alínea anterior, tem-se $R^2 - R_{mod}^2 = R^2 - 1 + (1 - R^2) \frac{n-1}{n-(p+1)} = (1 - R^2) \left[-1 + \frac{n-1}{n-(p+1)} \right] = (1 - R^2) \left[\frac{n-(p+1) + n-1}{n-(p+1)} \right] = (1 - R^2) \frac{p}{n-(p+1)}$. Logo, $\frac{R^2}{R^2 - R_{mod}^2} = \frac{R^2}{(1-R^2) \frac{p}{n-(p+1)}} = \frac{n-(p+1)}{p} \times \frac{R^2}{1-R^2} = F_{calc}$, como se queria mostrar.

- (c) Usando os resultados da primeira alínea, tem-se $R_{mod}^2 < 0 \Leftrightarrow 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-(p+1)} < 0 \Leftrightarrow 1 < (1 - R^2) \frac{n-1}{n-(p+1)} \Leftrightarrow \frac{n-(p+1)}{n-1} < 1 - R^2 \Leftrightarrow R^2 < 1 - \frac{n-(p+1)}{n-1} = \frac{n-1-n+p-1}{n-1} = \frac{p}{n-1}$, como se pedia para mostrar. Se esta condição se verifica, tem-se, a partir da expressão da alínea anterior, que F_{calc} terá valor inferior a 1. Uma rápida vista de olhos pelas tabelas da distribuição F mostra que valores de F_{calc} inferiores a 1 nunca conduzem (para os níveis de significância usuais) à rejeição da H_0 , pelo que o modelo ajustado não passa o teste de ajustamento global. Assim, ajustamentos de modelos em que p seja pouco menor do que $n-1$ podem não passar o teste de ajustamento global, mesmo com valores relativamente elevados de R^2 . Esta conclusão ajuda a perceber o aparente paradoxo do Exercício 12, embora a condição $R^2 < \frac{p}{n-1}$ não chegue a ser atingida nesse caso, já que $R^2 = 0.9252$ e $\frac{p}{n-1} = \frac{12}{14} = 0.8571$.

Nota: Este exercício fazia parte do Grupo III no segundo teste do ano 2016-17.

23. O enunciado afirma que $R^2 = 1$, situação que corresponde a dizer que a relação linear é *exacta*.
- (a) $R^2 = \frac{SQR}{SQT} = 1$ equivale a ter-se $SQR = SQT$. Mas como $SQT = SQR + SQRE$, necessariamente $SQRE = 0$. Logo, o estimador da variância σ^2 dos erros aleatórios, ou seja o Quadrado Médio Residual, $QMRE = \frac{SQRE}{n-(p+1)}$, toma o valor zero.
- (b) Não é possível efectuar qualquer teste F parcial, cuja estatística $F = \frac{n-(p+1)}{p-k} \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2}$ é impossível de calcular se $R_c^2 = 1$. No entanto, é possível perceber que o valor de F tende para infinito à medida que R_c^2 se aproxima de 1. Dito de outra forma, tem-se em limite $\lim_{R_c^2 \rightarrow 1} \frac{n-(p+1)}{p-k} \frac{R_c^2 - R_s^2}{1 - R_c^2} = +\infty$. Uma vez que a Região Crítica associada ao teste F de ajustamento global é unilateral direita, este valor limite de F_{calc} corresponde a uma rejeição certa de H_0 (quaisquer que sejam os graus de liberdade correspondentes).
- (c) Exponenciando os dois membros da relação linear entre as variáveis logaritmizadas, tem-se:

$$\begin{aligned} \ln(vcc) &= -9.935185 + 1.819071 \ln(d) + 1.070288 \ln(h) \\ \Leftrightarrow vcc &= e^{-9.935185 + 1.819071 \ln(d) + 1.070288 \ln(h)} \\ \Leftrightarrow vcc &= e^{-9.935185} \cdot e^{1.819071 \ln(d)} \cdot e^{1.070288 \ln(h)} \\ \Leftrightarrow vcc &= e^{-9.935185} \cdot e^{\ln(d^{1.819071})} \cdot e^{\ln(h^{1.070288})} \\ \Leftrightarrow vcc &= 0.00004844 \cdot d^{1.819071} \cdot h^{1.070288} \end{aligned}$$

Assim, o modelo ajustado diz que o volume com casca (vcc) é proporcional ao produto de potências do diâmetro (d) e da altura (h) da árvore, sendo as potências dadas, respectivamente, por $b_1 = 1.819071$ e $b_2 = 1.070288$.

- (d) O facto de $R^2 = 1$ significa que a relação linearizada é exacta, ou seja, os pontos correspondentes aos dados logaritmizados encontram-se *exactamente* em cima dum plano de equação $y = -9.935185 + 1.819071 x_1 + 1.070288 x_2$ no sistema $x_1 0 x_2 0 y$. Uma tal situação corresponde a um modelo determinístico, e não estatístico. Seguramente os dados relativos às três variáveis não foram *observados* no terreno, mas correspondem a valores de vcc que foram *calculados* a partir de diâmetros e alturas observadas, usando a equação $vcc = 0.00004844 \cdot d^{1.819071} \cdot h^{1.070288}$. É também por isso que na listagem produzida pelo R e disponibilizada no enunciado os erros padrão estimados são indistinguíveis de 0 e que $QMRE = 0$.

Num tal contexto, não faz sentido usar o Modelo Linear, um modelo estatístico que prevê a existência de *dados observados* na totalidade das variáveis envolvidas e de *variabilidade em torno duma tendência linear de fundo*.

A situação descrita alerta para um perigo: o da confusão entre *dados* e *resultados do ajustamento de modelos*. A actividade científica pressupõe sempre que se confrontem modelos com dados experimentais observados de forma *independente*, de forma a sustentar (ou não) esses modelos. A utilização de valores resultantes de modelos como se fossem dados experimentais cria um raciocínio circular, em que supostos ‘dados’ resultantes de modelos se substituem à realidade experimentalmente observada.

Nota: Adaptação de exercício do Exame da Época Especial de Finalistas do ano lectivo 2019-20.