Estatística e Análise de Dados em Zootecnia
Aulas Teóricas

Elsa Gonçalves
Secção de Matemática (DCEB)
Instituto Superior de Agronomia (ULisboa)

2024-25

Pressupostos

Admite-se que houve frequência duma disciplina introdutória de Estatística no primeiro ciclo (semelhante à existente no ISA) e que são conhecidos:

- principais indicadores descritivos (média, variância, covariância, coeficiente de correlação linear, etc.) e suas propriedades;
- conceitos básicos de probabilidades;
- variáveis aleatórias e sua caracterização;
- principais distribuições de probabilidades (Normal, t-Student, χ^2, F, etc.);
- conceitos de intervalos de confiança e testes de hipóteses.

Programa

A UC Estatística e Delineamento Experimental é uma disciplina de aprofundamento, que procura relacionar uma variável de interesse com outras variáveis.

O programa da UC consiste no estudo do principal modelo estatístico: o Modelo Linear, que inclui como casos particulares:

- Regressão Linear (Simples e Múltipla);
- Regressão Polinomial;
- Análise de Variância (ANOVA), de efeitos fixos e de efeitos aleatórios;
- Análise de Covariância (ANCOVA).

Delineamento Experimental

Modelo Linear

Modelação de relações entre variáveis

Importância central da recolha de informação (dados).

Nas disciplinas introdutórias de Estatística aprende-se a trabalhar com dados relativos a uma variável.

Nesta disciplina: relações (modelos) entre duas ou mais variáveis.

Variáveis podem ser:

- numéricas (medições, rendimentos, contagens, etc.) ou categóricas (factores) (espécies, locais, tratamentos, etc.);
- foco de interesse (variável resposta) ou auxiliares para explicar uma variável resposta (variável preditora ou explicativa).

Modelos determinísticos e modelos estatísticos

Uma relação (modelo) entre duas ou mais variáveis pode ser:

- essencialmente exacta (como na Mecânica: $F = ma$).
  Trata-se de modelos determinísticos.

  Ou
- apenas uma tendência de fundo, sabendo-se que existe variabilidade das observações em torno dessa tendência de fundo. Trata-se de modelos estatísticos ou probabilísticos.

Modelação Estatística

Objectivo (informal): Descrever a relação de fundo entre

- uma variável resposta (ou dependente) y; e
- uma ou mais variáveis preditoras (variáveis explicativas ou independentes), $x_1, x_2, ..., x_p$.

Informação: A identificação da relação de fundo é feita com base em n observações do conjunto de variáveis envolvidas na relação.

Vamos inicialmente considerar o contexto de um único preditor numérico, para modelar uma única variável resposta numérica.

Motivamos a discussão com dois exemplos.

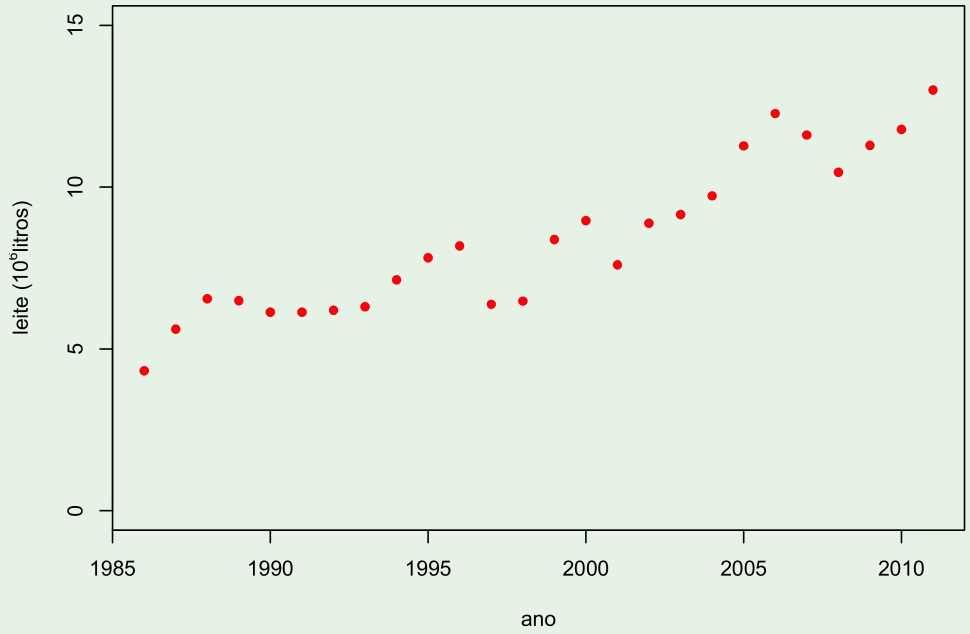
O Modelo Linear

- O Modelo Linear é um caso particular de modelação estatística;
- engloba um grande número de modelos específicos:
  Regressão Linear (Simples e Múltipla) , Regressão Polinomial, Análise de Variância, Análise de Covariância;
- é o mais completo e bem estudado tipo de modelo;
- serve de base para numerosas extensões
  (Regressão não linear, Modelos Lineares Generalizados, Modelos Lineares Mistos, etc.).

Exemplo 1

Produção de leite de cabra em Portugal, 1986 a 2011 (INE)

Produção (y) *vs.* Anos (x), $n = 26$ pares de valores, $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{26}$.



Existe uma tendência de fundo e é aproximadamente linear.

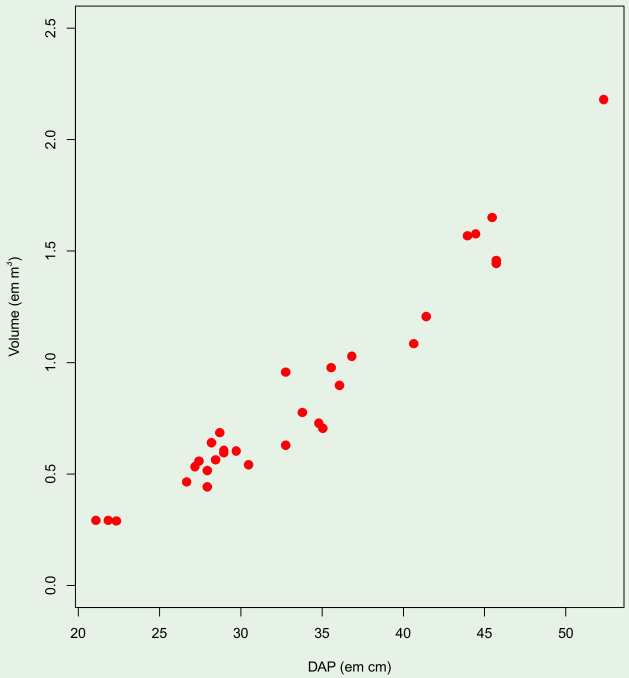
O coeficiente de correlação linear é $r_{xy} = 0.9348$.

Qual a "melhor" equação de recta, $y = b_0 + b_1 x$, para descrever as n observações (e que critério de "melhor")?

Exemplo 2 - relação linear

Volume de tronco *vs.* DAP em cerejeiras

DAP (Diâmetro à altura do peito, variável x) e Volume de troncos (y) de cerejeiras. Existem $n = 31$ pares de medições: $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{31}$.



A tendência de fundo é aproximadamente linear. O coeficiente de correlação linear é $r_{xy} = 0.9671$. Mas os $n = 31$ pares de observações são apenas uma amostra aleatória duma população mais vasta. Interessa o contexto inferencial: o que se pode dizer sobre a recta populacional $y = \beta_0 + \beta_1 x$?

Regressão Linear - Abordagem Descritiva

Regressão Linear Simples - contexto descritivo

Revisão: Estudado nas disciplinas introdutórias de Estatística.

Se n pares de observações $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$ têm relação linear de fundo, a recta de regressão de y sobre x define-se como:

Recta de Regressão Linear de y sobre x

$$y = b_0 + b_1 x$$

com

$$\begin{array}{lcl} \text{Declive} & b_1 & = & \dfrac{cov_{xy}}{s_x^2} \\ \text{Ordenada na origem} & b_0 & = & \overline{y} - b_1 \overline{x} \end{array}$$

sendo

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \qquad s_x^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \qquad cov_{xy} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y}) \,.$$

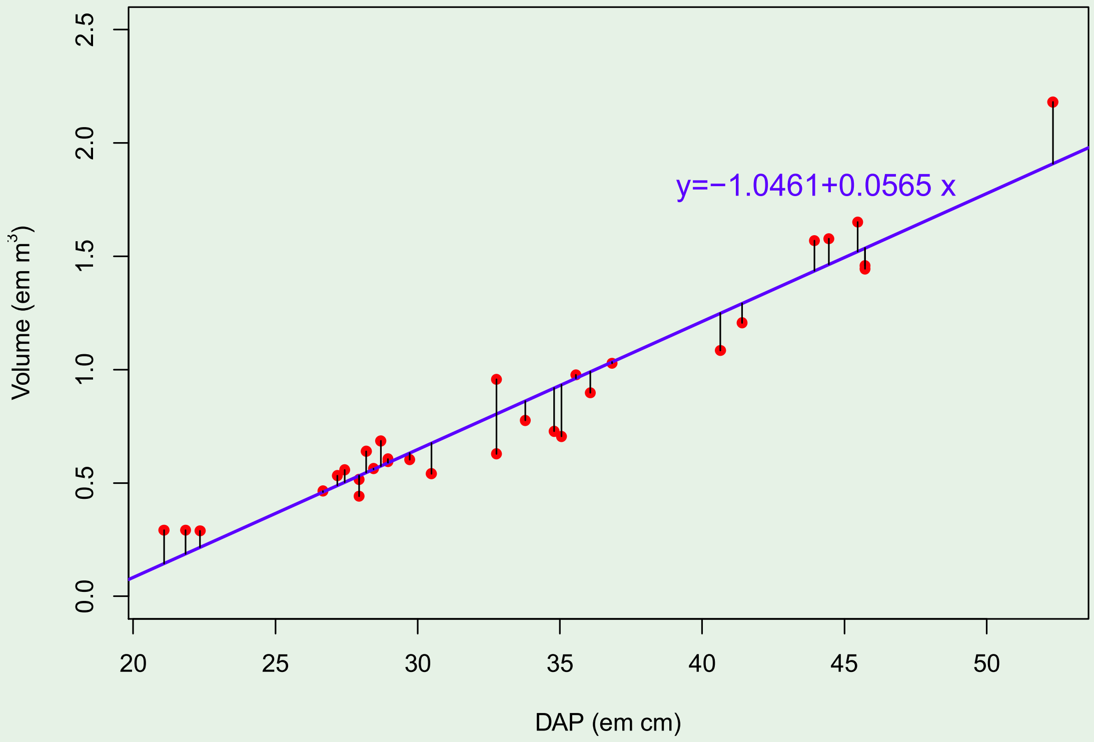
Regressão Linear Simples - contexto descritivo

Exemplo das cerejeiras

$n = 31$ pares de medições, $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{31}$.
DAP (x) e Volume de troncos (y) de cerejeiras.

$$\begin{aligned} cov_{xy} &= 3.5881929 \\ s_x^2 &= 63.5348018 \\ \overline{x} &= 33.6509032 \\ \overline{y} &= 0.8543468 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_1 = \frac{cov_{xy}}{s_x^2} &= 0.056476 \\ b_0 = \overline{y} - b_1\,\overline{x} &= -1.046122 \end{aligned}$$



Como se chegou à equação da recta?

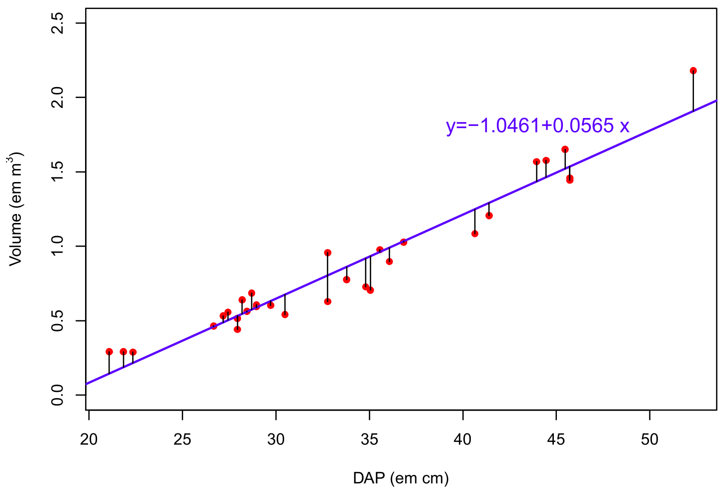
Valores ajustados e Resíduos

Dada uma recta, valores de y podem ser previstos a partir de valores de x, obtendo-se os "valores de y ajustados pela recta", $\hat{y}_i$:

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i \ .$$

Os resíduos são as diferenças entre os valores de y observados e ajustados ou seja, são as diferenças na vertical entre pontos e recta ajustada:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (b_0 + b_1 x_i) \ ,$$



O Critério de Mínimos Quadrados

Critério: minimizar a Soma de Quadrados dos Resíduos

$$SQRE = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (b_0 + b_1 x_i)]^2 .$$

Determinar b_0 e b_1 que minimizam $SQRE$ é um problema de minimizar uma função ($SQRE$) de duas variáveis (aqui chamadas b_0 e b_1).

Regressão Linear Simples - contexto descritivo

O critério de minimizar Soma de Quadrados dos Resíduos tem, subjacente, um pressuposto:

O papel das 2 variáveis, x e y, não é simétrico.

y – **variável resposta** ("dependente")

- variável que se deseja modelar, prever a partir da variável x.

x – **variável preditora** ("independente")

- variável com base na qual se pretende tirar conclusões sobre y.

Regressão Linear Simples - contexto descritivo

O i-ésimo resíduo é o desvio (com sinal) da observação y_i face à sua previsão a partir da recta:

$$e_i \;=\; y_i - \hat{y}_i \;=\; y_i - (b_0 + b_1 x_i)$$

Interpretação do Critério de Mínimos Quadrados

Minimizar a soma de quadrados dos resíduos corresponde a minimizar a soma de quadrados dos “erros de previsão”.

O critério tem subjacente a preocupação de prever o melhor possível a variável y, a partir da sua relação com o preditor x.

Revisão: Propriedades dos parâmetros da recta

Propriedades dos parâmetros da recta de regressão

- A ordenada na origem b_0:
  - é o valor de y (na recta) associado a $x = 0$;
  - tem unidades de medida iguais às de y.
- O declive b_1:
  - é a variação (média) de y associada a um aumento de uma unidade em x;
  - tem unidades de medida iguais a $\frac{unidades\ de\ y}{unidades\ de\ x}$.

Exemplo das cerejeiras

$$b_1 = 0.05648 \, \frac{m^3}{cm}$$

por cada cm a mais no DAP, o volume do tronco aumenta, em média, $0.05648\, m^3$.

Revisão: Propriedades da recta de regressão

Propriedades da recta de regressão

- A recta de regressão passa sempre no centro de gravidade da nuvem de pontos, isto é, no ponto $(\overline{x}, \overline{y})$, como é evidente a partir da fórmula para a ordenada na origem:

$$b_0 = \overline{y} - b_1 \overline{x} \qquad \Leftrightarrow \qquad \overline{y} = b_0 + b_1 \overline{x} \ .$$

- $\overline{y}$ é simultaneamente a média dos y_i observados e dos $\hat{y}_i$ ajustados.

- Embora não tenha sido explicitamente exigido, a média dos resíduos e_i é nula, ou seja, $\overline{e} = 0$.

Revisão: RLS - As três Somas de Quadrados

Recordar: $s_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2$ a variância amostral das observações y_i.

Soma de Quadrados Total (SQT)

SQ Total $\quad SQT = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2 \quad = \quad (n-1)\, s_y^2$

Tem-se: $s_{\hat{y}}^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2$ a variância amostral dos $\hat{y}_i$ ajustados.

Soma de Quadrados da Regressão (SQR)

SQ Regressão $\quad SQR = \sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2 \quad = \quad (n-1)\, s_{\hat{y}}^2$

Soma de Quadrados Residual (SQRE) - já dado

SQ Residual $\quad SQRE = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 \quad = \quad (n-1)\, s_e^2$

Revisão: RLS - Fórmula fundamental e R^2

Fórmula Fundamental da Regressão

Prova-se a seguinte Fórmula Fundamental (ver Exercício RLS 5):

$$SQT = SQR + SQRE \qquad \Leftrightarrow \qquad s_y^2 = s_{\hat{y}}^2 + s_e^2$$

Definição: Coeficiente de Determinação

$$R^2 = \frac{SQR}{SQT} = \frac{s_{\hat{y}}^2}{s_y^2} \quad , \qquad {\scriptstyle (s_y^2 \neq 0)}$$

R^2 mede a proporção da variabilidade total da variável resposta Y que é explicada pela regressão. Quanto maior, melhor.

Propriedades do Coeficiente de Determinação

Propriedades de $R^2 = \frac{SQR}{SQT}$

- $0 \leq R^2 \leq 1$ (Todas as SQs são não negativas e $SQT = SQR + SQRE$)
- $R^2 = 1$ se, e só se, os n pontos são colineares. ("ideal")
  ($SQT = SQR \Leftrightarrow SQRE = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = 0 \Rightarrow$ $e_i = 0$, para todo o i.
  Logo, todos os resíduos são nulos: os pontos estão todos em cima da recta.)
- $R^2 = 0$ se, e só se, a recta de regressão for horizontal. ("inútil")
  ($SQR = 0 \Leftrightarrow SQRE = SQT$. Toda a variabilidade de y é residual.
  $SQR = 0$ implica $\hat{y}_i = \overline{y}$, para todo o i. A recta é $y = \overline{y} \Leftrightarrow b_1 = 0$)
- Numa regressão linear simples, R^2 é o quadrado do coeficiente de correlação linear entre x e y:

$$R^2 \; = \; r_{xy}^2 \; = \; \left(\frac{cov_{xy}}{s_x \, s_y} \right)^2 \qquad \text{se } s_x \neq 0 \text{ e } s_y \neq 0$$

Algumas ideias prévias sobre modelação

- Todos os modelos são apenas aproximações da realidade.
- Pode haver mais do que um modelo adequado a uma relação. Um dado modelo pode ser melhor num aspecto, mas pior noutro.
- O princípio da parcimónia na modelação: de entre os modelos considerados adequados, é preferível o mais simples.
- Os modelos estatísticos apenas descrevem tendência de fundo: há variação das observações em torno da tendência de fundo.
- Num modelo estatístico não há necessariamente uma relação de causa e efeito entre variável resposta e preditores. Há apenas associação. A eventual existência de uma relação de causa e efeito só pode ser justificada por argumentos extra-estatísticos.

Transformações linearizantes

Nalguns casos, a relação de fundo entre x e y é não-linear, mas pode ser linearizada caso se proceda a transformações numa ou em ambas as variáveis.

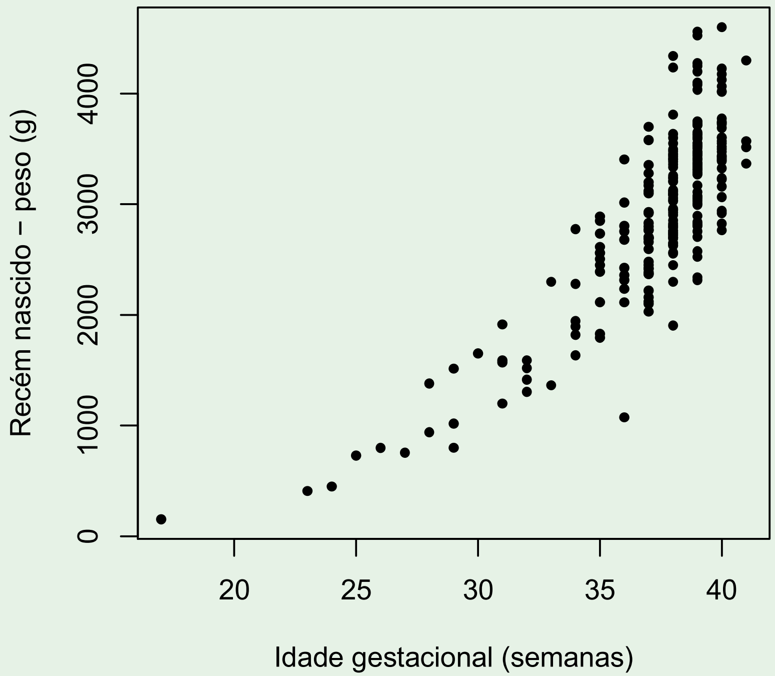
Tais transformações podem permitir utilizar a Regressão Linear Simples, apesar de a relação original ser não-linear.

Vamos ver alguns exemplos particularmente frequentes de relações não-lineares que são linearizáveis através de transformações da variável resposta e, nalguns casos, também do preditor.

Exemplo 3 - Uma relação não linear

Peso de bebés à nascença

$n = 251$ pares de observações
Idade gestacional (x) e peso de bebé à nascença y, $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{251}$.



A tendência de fundo é não-linear: $y = f(x)$.

Exemplo 3 (cont.)

Neste caso, há uma questão adicional:

- Qual a forma da relação (qual a natureza da função f)?
  - f exponencial ($y = c\,\mathrm{e}^{dx}$)?
  - f função potência ($y = c\,x^{d}$)?
  - outra?

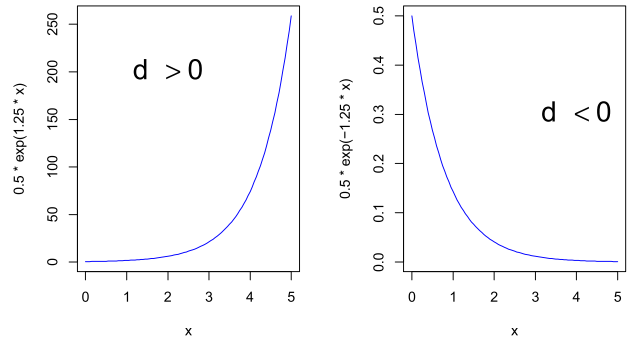
Além das perguntas análogas ao caso linear:

- Como determinar os "melhores" parâmetros c e d?
- E, se os dados forem amostra aleatória, o que se pode dizer sobre os respectivos parâmetros populacionais?

A Regressão Não Linear não faz parte do programa da disciplina. Mas transformações linearizantes de uma ou ambas as variáveis podem criar uma relação linear, que permita usar o Modelo Linear.

Relação exponencial

Relação exponencial : $y = c\,e^{d\,x}$
$(y>0 \quad ; \quad c>0)$



Transformação : Logaritmizando, obtém-se:

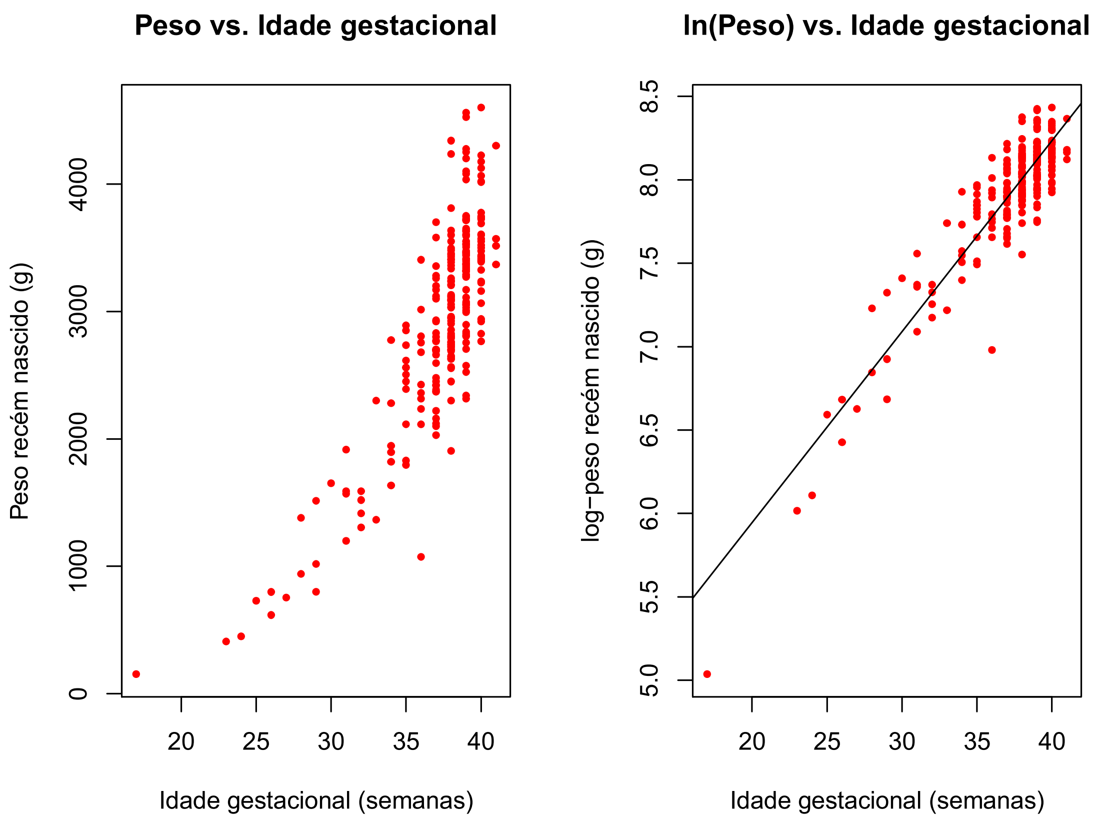
$$
\begin{aligned}
\ln(y) &= \ln(c) + d\,x \\
\Leftrightarrow \quad y^* &= b_0 + b_1\,x
\end{aligned}
$$

que é uma relação linear entre $y^* = \ln(Y)$ e x, com declive $b_1 = d$ e ordenada na origem $b_0 = \ln(c)$.

O sinal do declive da recta indica se a relação exponencial original é crescente ($b_1 > 0$) ou decrescente ($b_1 < 0$).

Uma linearização no Exemplo 3

O gráfico de log-pesos dos recém-nascidos contra idade gestacional produz uma relação de fundo linear:



Esta linearização da relação significa que a relação original (peso vs. idade gestacional) pode ser considerada exponencial.

Ainda a relação exponencial

Uma relação exponencial resulta de admitir que y é função de x e que a taxa de variação de y, ou seja, a derivada $y'(x)$, é proporcional a y:

$$y'(x) = d \cdot y(x) \ ,$$

isto é, que a taxa de variação relativa de y é constante:

$$\frac{y'(x)}{y(x)} = d \ .$$

Primitivando (em ordem a x), tem-se:

$$\ln(y(x)) \ = \ \underbrace{d}_{=b_1} x + \underbrace{C}_{=b_0} \qquad \Leftrightarrow \qquad y(x) \ = \ e^{C} e^{d\,x}.$$

Repare-se que o declive b_1 da recta é o valor (constante) d da taxa de variação relativa de y. A constante de primitivação C é a ordenada na origem da recta: $C = b_0$.

Modelo exponencial de crescimento populacional

Um modelo exponencial é frequentemente usado para descrever o crescimento de populações, numa fase inicial onde não se faz ainda sentir a escassez de recursos limitantes.

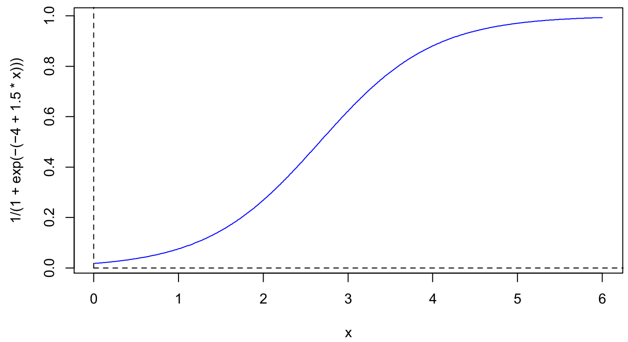
Mas nenhum crescimento populacional exponencial é sustentável a longo prazo.

Em 1838 Verhulst propôs uma modelo de crescimento populacional alternativo, prevendo os efeitos resultantes da escassez de recursos: o modelo logístico.

Considera-se aqui uma versão simplificada (com 2 parâmetros) desse modelo. Pode pensar-se que a variável y mede a dimensão duma população, relativa a um máximo possível, sendo assim uma proporção.

Relação Logística (com 2 parâmetros)

Relação Logística : $y = \frac{1}{1+e^{-(c+dx)}}$



$(b_1 > 0)$

Transformação : Como $y \in]0,1[$, tem-se uma relação linear entre a transformação *logit* de Y, i.e., $y^* = \ln\left(\frac{y}{1-y}\right)$, e x:

$$\Rightarrow \quad 1-y = \frac{e^{-(c+dx)}}{1+e^{-(c+dx)}}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{y}{1-y} = \frac{1}{e^{-(c+dx)}} = e^{c+dx}$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\ln\left(\frac{y}{1-y}\right)}_{=y^*} = \underbrace{c}_{=b_0} + \underbrace{d}_{=b_1} x$$

Ainda a Logística

A relação logística resulta de admitir que y é função de x e que a taxa de variação relativa de y diminui com o aumento de y:

$$\frac{y'(x)}{y(x)} = d \cdot [1 - y(x)] \,.$$

De facto, a expressão anterior equivale a:

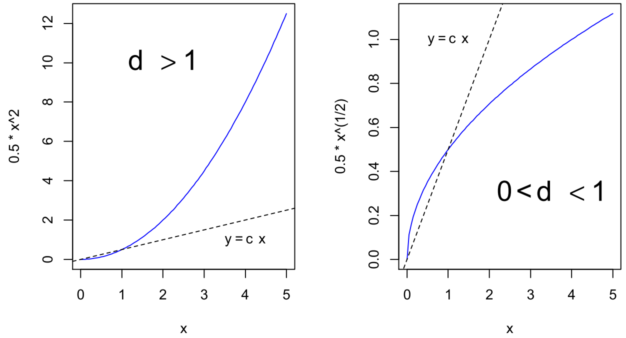
$$\frac{y'(x)}{y(x)\cdot(1-y(x))} = d \qquad \Leftrightarrow \qquad \frac{y'(x)}{1-y(x)} + \frac{y'(x)}{y(x)} = d$$

Primitivando (em ordem a x), tem-se:

$$\begin{aligned} -\ln(1-y(x)) + \ln y(x) &= d\,x + C \\ \Leftrightarrow \quad \ln\left(\frac{y}{1-y}\right) &= b_1 x + b_0 \,. \end{aligned}$$

Relação potência ou alométrica

Relação potência : $y = c\,x^d$ $(x,y>0 \quad ; \quad c,d>0)$



Transformação : Logaritmizando, obtém-se:

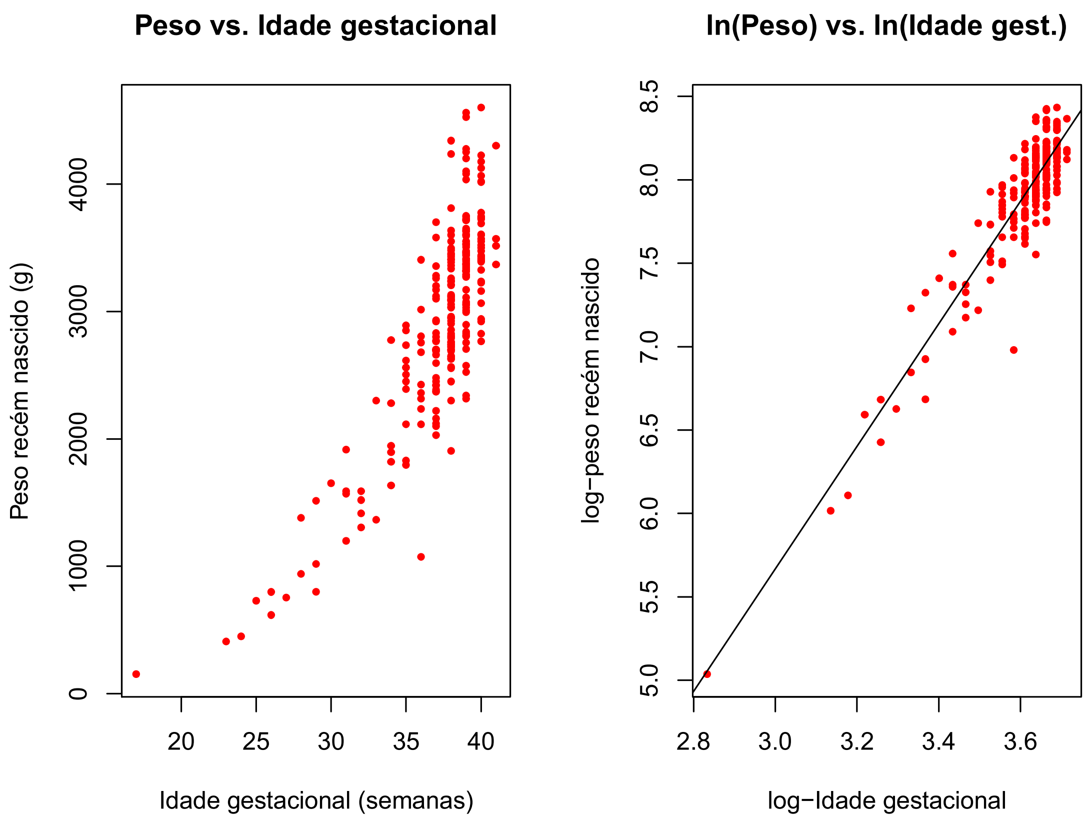
$$\begin{aligned} \ln(y) &= \ln(c) + d\ln(x) \\ \Leftrightarrow \qquad y^* &= b_0 + b_1\,x^* \end{aligned}$$

que é uma relação linear entre $y^* = \ln(y)$ e $x^* = \ln(x)$.

O declive b_1 da recta é o expoente d na relação potência original.
Mas $b_0 = \ln(c)$.

Outra linearização no Exemplo 3

O gráfico de log-pesos dos recém-nascidos contra log-idade gestacional produz outra relação de fundo linear:



Esta linearização significa que a relação original (peso vs. idade gestacional) também pode ser considerada uma relação potência.

Ainda a relação potência

Uma relação potência resulta de admitir que y e x são funções duma terceira variável t e que a taxa de variação relativa de y é proporcional à taxa de variação relativa de x:

$$\frac{y'(t)}{y(t)} = d \cdot \frac{x'(t)}{x(t)} \ .$$

De facto, primitivando (em ordem a t), tem-se:

$$\ln y \;=\; d \ln x + C$$

e exponenciando,

$$y \;=\; x^d \cdot \underbrace{\mathrm{e}^C}_{=c}$$

A relação potência é muito usado em estudos de alometria, que comparam o crescimento de partes diferentes dum organismo.
A isometria corresponde ao valor $d = 1$.

Advertência sobre transformações linearizantes

A regressão linear simples não modela directamente relações não lineares entre x e y. Pode modelar uma relação linear entre as variáveis transformadas.

Transformações da variável-resposta y têm um impacto grande no ajustamento: a escala dos resíduos é alterada.

Nota: Linearizar, obter os parâmetros b_0 e b_1 da recta e depois desfazer a transformação linearizante não produz os mesmos parâmetros ajustados que resultariam de minimizar a soma de quadrados dos resíduos directamente na relação não linear. Esta última abordagem corresponde a efectuar uma regressão não linear, metodologia não englobada nesta disciplina.