ESTATÍSTICA 2024/2025

Maria João Martins
(adaptado dos slides de 2021/22 da Profª Manuela Neves)

Slides de apoio às Aulas

Parte A - Estatística Descritiva

Objetivos da Estatística Descritiva:

- condensar, sob a forma de tabelas, os dados observados;
- fazer a representação gráfica;
- calcular indicadores de localização e de dispersão.

Conceitos básicos em Estatística (definição e um exemplo):

- **população ou universo** $\longrightarrow$ conjunto de todos os elementos que têm uma característica de interesse em comum (ex: todas as árvores de uma dada espécie)
- **unidades estatísticas** $\longrightarrow$ são os elementos da população (ex: as árvores)
- **variável** $\longrightarrow$ característica de interesse (ex: altura de árvores de uma espécie).
- **amostra** $\longrightarrow$ subconjunto da população, efectivamente observado.

Ao(s) valor(es) da(s) característica(s) de interesse observadas nos elementos da amostra costuma chamar-se **dado(s)**.

Os **dados** podem ser de natureza:

– **quantitativa** $\longrightarrow$ **discreta** (contagens: nº de peras em cada pereira, nº de machos por ninhada de coelhos) ou
$\longrightarrow$ **contínua** (medições: peso, comprimento, altura, tempo)

– **qualitativa** $\longrightarrow$ **nominal** (cor dos olhos de um indivíduo, categoria taxonómica de uma espécie) ou
$\longrightarrow$ **ordinal** (avaliação numa escala de A (óptima) a E (péssima) da qualidade do almoço numa cantina)

ED univariada | tabelas de frequências

Exemplo 1.

Num estudo para analisar a taxa de germinação de um certo tipo de cereal foram semeadas <u>cinco</u> sementes em cada um de 50 vasos iguais com o mesmo tipo de solo.

O número de sementes germinadas em cada vaso está registado a seguir:

1	0	1	2	1	3	2	0	0	1	4	0	2	1	0
2	4	1	2	0	3	5	3	0	2	1	3	3	0	4
0	2	5	3	0	2	5	1	1	0	4	4	1	2	1
0	5	1	2	3										

Neste caso os **dados são de natureza discreta, com um número pequeno de valores distintos**.

Dados deste tipo podem ser condensados numa tabela da forma

Dados de natureza discreta, com um número pequeno de valores distintos

x_i	n_i	f_i	F_i
0	12	0.24	0.24
1	12	0.24	0.48
2	10	0.20	0.68
3	7	0.14	0.82
4	5	0.10	0.92
5	4	0.08	1

n é a **dimensão da amostra** (n º de vasos), $n = 50$

$x_i \longrightarrow$ n º de sementes germinadas;

$n_i \longrightarrow$ frequência absoluta, $\sum_i n_i = n$;

$f_i \longrightarrow$ frequência relativa, $f_i = \dfrac{n_i}{n}$;

$F_i \longrightarrow$ frequência relativa acumulada

Exemplo 2.

Um dos principais indicadores da poluição atmosférica nas grandes cidades é a concentração de ozono na atmosfera. Num dado Verão registou-se 78 valores dessa concentração (em μg / m^3), numa dada cidade:

3.5	6.2	3.0	3.1	5.1	6.0	7.6	7.4	3.7	2.8	3.4	3.5
1.4	5.7	1.7	4.4	6.2	4.4	3.8	5.5	4.4	2.5	11.7	4.1
6.8	9.4	1.1	6.6	3.1	4.7	4.5	5.8	4.7	3.7	6.6	6.7
2.4	6.8	7.5	5.4	5.8	5.6	4.2	5.9	3.0	3.3	4.1	3.9
6.8	6.6	5.8	5.6	4.7	6.0	5.4	1.6	6.0	9.4	6.6	6.1
5.5	2.5	3.4	5.3	5.7	5.8	6.5	1.4	1.4	5.3	3.7	8.1
2.0	6.2	5.6	4.0	7.6	4.7						

Agora estamos em presença de dados de **natureza contínua**

ED univariada | tabelas de frequências

Para dados de natureza contínua (ou dados de natureza discreta com um elevado número de valores distintos) elabora-se a **tabela de frequências** procedendo assim:

- Determina-se $\max(x_i)$ e $\min(x_i)$, $A_T = \max(x_i) - \min(x_i)$ é a **amplitude total**
- Escolhe-se um número m de subintervalos, as **classes**
- Define-se a amplitude cada classe. Em tabelas com classes de igual amplitude, será $h \approx A_T/m$
- Definem-se as classes
- Para cada classe calcula-se a **frequência absoluta**, n_i, e a **frequência relativa**, f_i.

O número m de classes pode ser escolhido através da **Regra de Sturges**: m é o **o inteiro mais próximo de** $1 + (\log_2 n) = 1 + \frac{\log n}{\log 2}$.

ED univariada | tabelas de frequências

Para o **Exemplo 2:** $min(x_i) = 1.1$, $max(x_i) = 11.7$, $A_T = 10.6$.

- pela regra de Sturges $m \approx 7.285 \longrightarrow m = 7$
- a amplitude de cada classe é $h = 1.51 \longrightarrow h = 1.5$
- a primeira classe começa em 1.0 (tem que conter $min(x_i)$) e a última termina em 13.0 (tem que conter $max(x_i)$)

Nota: com estas escolhas, será necessário considerar 8 classes

A **tabela de frequências** associada a estas escolhas é:

c_i	n_i	f_i	F_i
$]1.0, 2.5]$	10	0.128	0.128
$]2.5, 4.0]$	16	0.205	0.333
$]4.0, 5.5]$	18	0.231	0.564
$]5.5, 7.0]$	26	0.333	0.897
$]7.0, 8.5]$	5	0.064	0.962
$]8.5, 10.0]$	2	0.026	0.987
$]10.0, 11.5]$	0	0.00	0.987
$]11.5, 13.0]$	1	0.013	1

ED univariada | representação gráfica

- **Diagrama de barras** $\longrightarrow$ para dados de natureza discreta com um número pequeno de valores distintos
- **Histograma** $\longrightarrow$ para dados de natureza contínua, ou de natureza discreta com muitos valores distintos.

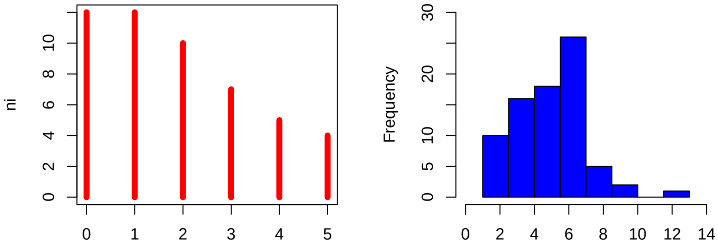


Diagrama de barras (exemplo 1) e histograma (exemplo 2) das frequências absolutas

Nota:

No caso de o agrupamento dos dados ser realizados com classes de amplitude variável, a área (e não a altura) do retângulo de cada classe deve ser proporcional à frequência dessa classe. Assim, a classe i é representada no histograma por um retângulo de largura h_i e altura f_i/h_i (também poderia ser n_i/h_i, mas há vantagem em ter as áreas dos retângulos a somar 1).

- Por omissão, o Python faz histogramas com altura proporcional à frequência absoluta.
- Se as classes têm amplitude variável deve acrescentar-se o argumento `density=True`.

ED univariada | indicadores numéricos

As tabelas e gráficos constituem um primeiro conjunto de ferramentas usadas pela Estatística Descritiva para resumir e descrever um conjunto de dados

Outro conjunto de ferramentas que permite caracterizar um conjunto de dados é constituído pelos indicadores numéricos ou indicadores amostrais.

- **Indicadores de localização**: **média**, **mediana**, **quantis**, **moda**
- **Indicadores de dispersão**: **amplitude total**, **amplitude inter-quartis**, **variância**, **desvio padrão**, **coeficiente de variação**.

Somatórios | notação e propriedades

Seja $\{x_k\}_{k\in\mathbb{N}} = x_1, x_2, \ldots$ uma sequência de números reais,

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = x_1 + x_2 + \cdots + x_n \qquad \sum_{i=1}^{n} x_k = n x_k \qquad \sum_{i=m}^{n} x_i = x_m + x_{m+1} + \cdots + x_n.$$

Propriedades:

- $\displaystyle\sum_{i=m}^{n} (x_i \pm y_i) = \sum_{i=m}^{n} x_i \pm \sum_{i=m}^{n} y_i$
- $\displaystyle\sum_{i=m}^{n} \alpha x_i = \alpha \sum_{i=m}^{n} x_i,\ \alpha \in \mathbb{R}$

Exemplos:

- $\displaystyle\sum_{n=1}^{3} (2n-1) = (2\times 1 - 1) + (2\times 2 - 1) + (2\times 3 - 1) = 1 + 3 + 5 = 9$
- $\displaystyle\sum_{n=1}^{3} (2n-1) = \sum_{n=1}^{3} 2n - \sum_{n=1}^{3} 1 = 2\sum_{n=1}^{3} n - 3\times 1 = 2\times(1+2+3) - 3 = 9$

Somatórios úteis em Estatística

- $$\sum_{i=1}^{n} x_i = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$$
- $$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2$$
- $$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 = (x_1 + x_2 + \cdots + x_n)^2$$
- $$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$
- $$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) . \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right) = (x_1 + x_2 + \cdots + x_n) . (y_1 + y_2 + \cdots + y_n)$$

Resolver o Exercício 1.3 do Caderno de Exercícios para praticar.

ED univariada | média

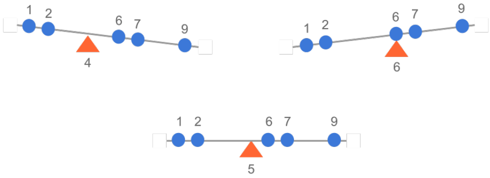
Considere-se $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$, uma amostra de n observações de x.

Definição

Chama-se **média aritmética**, **média empírica** ou simplesmente **média** e representa-se por $\overline{x}$ a

$$\overline{x} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \cdots + x_n}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$$

$\overline{x}$ é o centro de gravidade, ou ponto de equilíbrio, dos dados:



(ver `http://www.gastonsanchez.com/matrix4sl/`

Propriedades da média

- A soma dos desvios de todas as observações relativamente à média é zero: $\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x}) = 0$.
- Seja $(x_1, x_2, ..., x_n)$ uma amostra cuja média é $\overline{x}$ e considere-se $y_i = a + bx_i, \quad i = 1, ..., n \quad \text{e} \quad a, b \in \mathbb{R}$.
  A amostra constituída pelas observações transformadas $(y_1, y_2, ..., y_n)$ tem média $\overline{y} = a + b\overline{x}$.
- Seja $(x_1^{(1)}, ..., x_n^{(1)})$ uma primeira amostra de dimensão n, de média $\overline{x^{(1)}}$, e $(x_1^{(2)}, ..., x_m^{(2)})$ uma segunda amostra de dimensão m da mesma variável, de média $\overline{x^{(2)}}$. A média das $n + m$ observações pode calcular-se como: $\dfrac{n\,\overline{x^{(1)}} + m\,\overline{x^{(2)}}}{n+m}$.

ED univariada | mediana

Definição

A **mediana** é um valor que divide a amostra ordenada em duas partes com igual número de observações.

Dada a amostra $(x_1, ..., x_n)$, seja $x_{(1)} \leq ... \leq x_{(n)}$ a amostra **ordenada.**
A **mediana** define-se por:

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = \begin{cases} x_{\left(\frac{n+1}{2}\right)} & \text{se } n \text{ ímpar} \\ \dfrac{x_{(n/2)} + x_{(n/2+1)}}{2} & \text{se } n \text{ par} \end{cases}$$

Se considerarmos a amostra ordenada dividida em quatro partes, cada uma com o mesmo número de observações, os pontos da divisão chamam-se **quartis empíricos** ou apenas **quartis** e costumam representar-se por Q_1, Q_2 e Q_3.
É claro que $Q_2 \equiv \tilde{x}$.

ED univariada | quantis empíricos

Definição – Generalização do conceito de quartil

Chama-se **quantil de ordem θ**, $(0 \leq \theta \leq 1)$, o valor Q^*_θ tal que há pelo menos uma proporção θ de observações inferiores ou iguais a Q^*_θ e pelo menos uma proporção $(1-\theta)$ de observações maiores ou iguais a esse valor.

Uma fórmula de cálculo pode ser

$$Q^*_\theta = (1-\epsilon)x_{(r)} + \epsilon x_{(r+1)}$$

com $1+(n-1)\theta = r+\epsilon$, em que r é a parte inteira e ϵ é a parte fracionária.

Por exemplo, se $n=10$:
$Q^*_{0.25} = 0.75x_{(3)} + 0.25x_{(4)}$ já que $1+9\times 0.25 = 3.25 = 3+0.25$
$Q^*_{0.5} = 0.5x_{(5)} + 0.5x_{(6)}$ já que $1+9\times 0.5 = 5.5 = 5+0.5$
$Q^*_{0.75} = 0.25x_{(7)} + 0.75x_{(8)}$ já que $1+9\times 0.75 = 7.75 = 7+0.75$

Nota: $Q^*_{0.25} \equiv Q_1$; $Q^*_{0.5} \equiv Q_2 \equiv \tilde{x}$ e $Q^*_{0.75} \equiv Q_3$

ED univariada | moda

Definição

A **moda,** ***mo*****,** é a observação mais frequente (se existir).

Caso discreto → é a observação que tem maior frequência.
Caso contínuo → só faz sentido definir-se sobre dados agrupados → é um valor da classe que tem maior frequência

ED univariada | indicadores de dispersão

Amplitude total

$$A_T = max(x_i) - min(x_i)$$

Amplitude inter-quartis

$$AIQ = Q_3 - Q_1$$

Variância

$$s_x^2 = s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}{n-1}$$

Outra fórmula de cálculo da variância: $s^2 = \dfrac{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}{n(n-1)}$

Desvio padrão

$$s_x = s = \sqrt{\text{variância}}$$

Propriedades

- $s_x^2 \geq 0$
- Sejam $x_1, ..., x_n$, observações com variância s_x^2. Considere-se $y_i = a + bx_i, \quad i = 1, ..., n$ e $a, b \in \mathbb{R}$. As observações transformadas têm como variância $s_y^2 = b^2\ s_x^2$.
  Para o **desvio padrão** tem-se $s_y = |b| s_x$.

A variância e o desvio padrão medem dispersão relativamente à média. São medidas de dispersão absolutas, cujas unidades são o quadrado da unidade dos dados para a variância, ou a unidade dos dados para o desvio padrão.

Uma medida de dispersão relativa é o

Coeficiente de variação

$$CV = \frac{s}{\overline{x}} \times 100\%$$

O CV só se calcula quando as observações têm todas o mesmo sinal. É uma grandeza adimensional e permite comparar as dispersões de conjuntos de dados com diferentes unidades.

ED univariada | dados agrupados em classes

Nota:

Quando apenas se dispõe dos dados agrupados em classes (e não da totalidade dos dados) é possível obter valores aproximados de alguns indicadores de localização e dispersão. Ver por exemplo Slides 17, 18, 19 e 21 em `https://fenix.isa.ulisboa.pt/downloadFile/563022967881513/slides_estat_desc_21_22.pdf`.

ED univariada | caixa de bigodes

Um modo gráfico que permite facilmente visualizar a localização e a dispersão de um conjunto de dados, efectuando em simultâneo a sua síntese $\longrightarrow$ **o diagrama de extremos e quartis**.

Se nesse gráfico identificarmos as observações que se afastam do padrão geral dos dados (candidatos a *outliers*) é hábito designá-lo por **caixa de bigodes** (***boxplot***).

Existem vários critérios para classificar uma observação como um *outlier*.

Definição

Um valor x_i é um candidato a ***outlier*** se

$$x_i < B_I \qquad \text{ou} \qquad x_i > B_S$$

sendo B_I **barreira inferior** e B_S **barreira superior** definidas como:

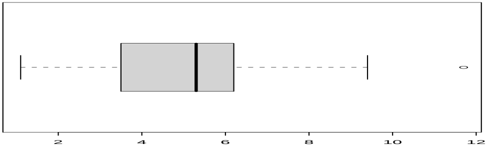
$$B_I = Q_1 - 1.5(Q_3 - Q_1) \qquad B_S = Q_3 + 1.5(Q_3 - Q_1)$$

ED univariada | caixa de bigodes

Para desenhar **uma caixa de bigodes**

- Marcar **o valor adjacente inferior** $\longrightarrow$ é o **menor** valor do conjunto dos dados (podendo ser o *mínimo*) maior ou igual à barreira inferior;
- Marcar **o valor adjacente superior** $\longrightarrow$ é o **maior** valor do conjunto dos dados (podendo ser o *máximo*) menor ou igual à barreira superior;
- Marcar **a mediana, primeiro e terceiro quartis** (que vão permitir desenhar uma "caixa") e marcar os candidatos a *outlier*.

Caixa de bigodes referente os dados do Exemplo 2.



ED univariada | caixas de bigodes paralelas

Quando se pretende comparar várias amostras, o recurso a caixas de bigodes paralelas é uma ferramenta muito útil.

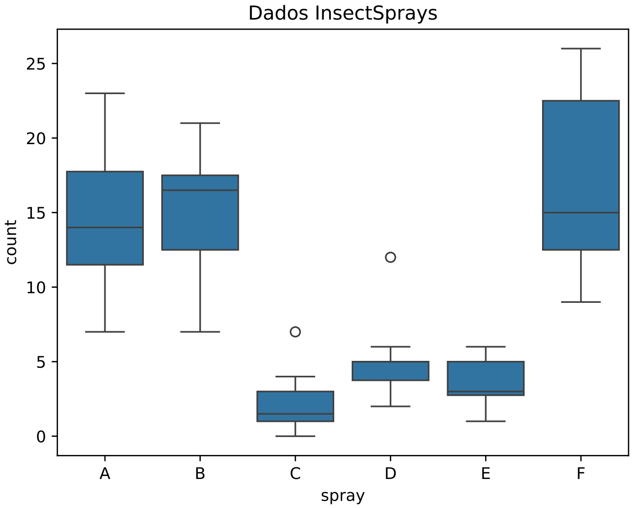
Exemplo 3.
As seguintes caixas de bigodes referem-se ao conjunto de dados `InsectSprays` disponível no *package* `pydataset` do Python. São contagens de insectos em 6 unidades agrícolas experimentais, às quais foram aplicados diferentes tipos de insecticidas.

Fonte: Beall, G., (1942) The Transformation of data from entomological field experiments, Biometrika, 29, 243-262.
(`stat.ethz.ch/R-manual/R-devel/library/datasets/html/InsectSprays.html`)

Código Python para produzir o gráfico:

```
from pydataset import data
import seaborn as sns
insect_sprays = data("InsectSprays")
sns.boxplot(data=insect_sprays,y="count",x="spray")
plt.title('Dados InsectSprays')
plt.show()
```

ED univariada | caixas de bigodes paralelas



Estatística descritiva bivariada

Nas aulas anteriores, em cada unidade estatística, estudámos uma única caraterística. Muitas vezes, porém, interessa averiguar a existência de alguma relação entre duas caraterísticas (variáveis) e descrever essa relação.

Exemplos: peso e altura de recém nascidos em Portugal; comprimento e largura das folhas de uma espécie vegetal.

Não são relações determinísticas que interessam à Estatística, mas é o comportamento em média (relação estatística) das duas características.
Se duas variáveis estão ligadas por uma relação estatística diz-se haver **correlação** entre elas.

Correlação **positiva** se as duas características variam no mesmo sentido e **negativa** caso contrário.

ED bivariada | nuvem de pontos

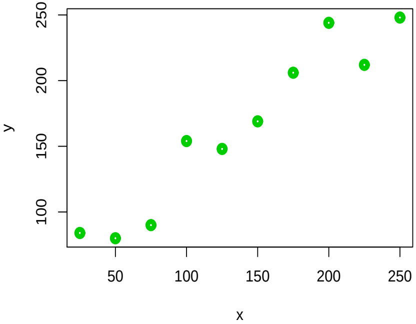
Sejam $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$ observações efectuadas em n unidades estatísticas.

Num diagrama de dispersão ou nuvem de pontos, cada observação i é representada por 1 ponto num sistema de dois eixos cartesianos. A abcissa desse ponto é x_i e a ordenada é y_i.

Exemplo 4.
Pretende-se estudar o efeito da aplicação de diferentes quantidades de um dado fertilizante (x) na produção de relva (y). A relva é semeada uniformemente numa dada área na qual são marcados ao acaso 10 talhões de 1 m^2, a cada um dos quais é aplicada uma certa quantidade de fertilizante. A relva é depois cortada, seca e pesada. Os dados obtidos e a **nuvem de pontos** correspondente são:

ED bivariada | nuvem de pontos

x (g/m^2)	y (g/m^2)
25	84
50	80
75	90
100	154
125	148
150	169
175	206
200	244
225	212
250	248



ED bivariada | indicadores numéricos

Médias marginais de x e y, respetivamente, são

$$\overline{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \qquad \overline{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$$

$(\overline{x}, \overline{y}) \longrightarrow$ centro de gravidade da nuvem de pontos.

Dispersões marginais de x e y, respetivamente

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

Mas... há uma medida que dá informação sobre a relação entre as duas variáveis.

Definição

Dadas as variáveis x e y, chama-se **covariância de x e y** a

$$\boldsymbol{cov(x, y)} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{n-1}.$$

Uma fórmula de cálculo alternativa é:

$$cov(x, y) = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i\, y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n(n-1)}$$

(demonstrar como exercício).

Propriedades da covariância

1. Seja (x_i, y_i) um conjunto de n observações e considere-se:
   $x_i^{'} = a + bx_i$ e $y_i^{'} = c + dy_i$, com $i = 1, \ldots, n$ e $a, b, c, d \in \mathbb{R}$.
   Então $cov(x^{'}, y^{'}) = bd\ cov(x, y)$.

2. $|cov(x, y)| \leq s_x s_y$. A igualdade só se verifica quando todos os pontos observados se encontram sobre uma reta.

Nota

Importância da covariância:
$cov(x, y) > 0 \rightarrow$ há correlação positiva
$cov(x, y) < 0 \rightarrow$ há correlação negativa.

Desvantagem da covariância:
é fortemente afectada por mudanças de escala nas observações (ver propriedade 1.)

ED bivariada | coeficiente de correlação

Definição

O **coeficiente de correlação** é definido como

$$\boldsymbol{r = r_{x,y}} = \frac{cov(x,y)}{s_x\ s_y} \qquad \text{com } s_x \neq 0 \text{ e } s_y \neq 0$$

Propriedades

1. $\boldsymbol{r}$ tem sempre o mesmo sinal da covariância;
2. $\boldsymbol{-1 \leq r \leq 1}$ (se $|r_{xy}| = 1$ todos os valores observados se encontram sobre uma reta);
3. Se (x, y) têm coeficiente de correlação r_{xy}, $x_i' = a + bx_i$ e $y_i' = c + dy_i$ (com $bd \neq 0$), tem-se:
   $r_{x'y'} = r_{xy}$ (se $bd > 0$) e $r_{x'y'} = -r_{xy}$ (se $bd < 0$).

ED bivariada | coeficiente de correlação

Nota:

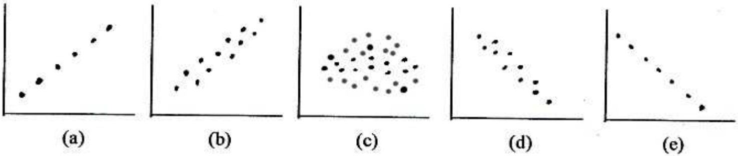
O coeficiente de correlação é uma grandeza adimensional.

Não é afectado, em valor absoluto, por transformações afins.

ED bivariada | coeficiente de correlação

(a) $r = 1$ todos os pontos observados se encontram sobre uma reta de declive positivo.
(b) $r \simeq 1$ todos os pontos observados se encontram próximos de uma reta de declive positivo.
(c) $r \simeq 0$ a nuvem apresenta um aspecto arredondado ou alongado segundo um dos eixos.
(d) $r \simeq -1$ todos os pontos observados se encontram próximos de uma reta de declive negativo.
(e) $r = -1$ todos os pontos observados se encontram sobre uma reta de declive negativo.

Nota: O coeficiente de correlação mede *a nitidez da ligação* existente entre duas variáveis, quando essa ligação *é linear ou aproximadamente linear*



Regressão linear simples

Se $|r| \simeq 1$ e a nuvem de pontos sugere a existência de uma relação linear entre os valores observados, faz sentido determinar a equação de uma reta que possa traduzir bem a relação observada, i.e., pretende-se determinar

$\boldsymbol{y = b_0 + b_1 x}$ $\longrightarrow$ **reta de regressão**, que permita:

- descrever a relação entre y (variável resposta ou dependente) e x (variável explicativa, regressora ou independente);
- prever um valor de y para um dado valor de x.

Mas ... a equação $y = b_0 + b_1 x$ não é verificada para todos os pares (x_i, y_i) (note-se que só o seria se $|cov(x, y)| = s_x s_y$, ou seja se $|r| = 1$).

Regressão linear simples

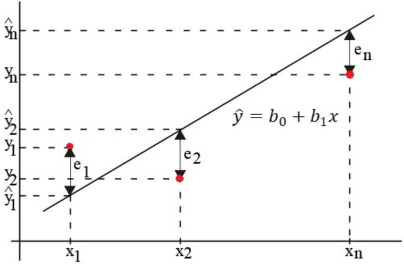
Para cada par (x_i, y_i) tem-se $\boldsymbol{y_i = b_0 + b_1 x_i + e_i}$

$\hat{y}_i = b_0 + b_1 \, x_i$ é o **valor estimado** de y para x_i, pela reta de regressão.

Então pode-se escrever $\boldsymbol{y_i = \hat{y}_i + e_i}$

$\boldsymbol{e_i = y_i - \hat{y}_i}$ é o **resíduo** da observação i.

Obter a reta $\Longleftrightarrow$ determinar $\boldsymbol{b_0}$ (ordenada na origem) e $\boldsymbol{b_1}$ (declive).



(adaptado de `https://rce.casadasciencias.org/rceapp/art/2019/045/`)

Regressão linear simples

No **método dos mínimos quadrados** $\longrightarrow$ $\boldsymbol{b_0}$ e $\boldsymbol{b_1}$ são determinados de modo a

Minimizar a soma dos quadrados dos resíduos ou seja, minimizar

$$\sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1\ x_i)^2 = Q(b_0, b_1)$$

Pretende-se então determinar os minimizantes de uma função de duas variáveis. As condições de estacionaridade são:

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial b_0} = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial b_1} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 2\ \sum (y_i - b_0 - b_1\ x_i) = 0 \\ 2\ \sum x_i\ (y_i - b_0 - b_1\ x_i) = 0 \end{cases}$$

A estas equações chama-se **equações normais**

Regressão linear simples

Algumas conclusões podem ser tiradas destas equações:

- $\sum(y_i - b_0 - b_1\ x_i) = 0 \Rightarrow \sum(y_i - \hat{y}_i) = \sum e_i = 0$ a soma dos resíduos é nula.
- $\sum(y_i - \hat{y}_i) = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\overline{y} = \overline{\hat{y}}}$ a média dos valores observados é igual à média dos valores estimados.
- a reta de regressão passa no ponto $(\overline{x}, \overline{y})$.

- **Solução do sistema**

$$\boldsymbol{b_1} = \frac{n\sum x_i \; y_i - \sum x_i \; \sum y_i}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} = \frac{\sum(\boldsymbol{x_i} - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{y_i} - \overline{\boldsymbol{y}})}{\sum(\boldsymbol{x_i} - \overline{\boldsymbol{x}})^2} = \frac{cov(x,y)}{s_x^2} = r\,\frac{s_y}{s_x}$$

$$\boldsymbol{b_0} = \overline{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{b_1}\overline{\boldsymbol{x}}$$

A $\boldsymbol{b_1}$ chama-se **coeficiente de regressão de y sobre x**.

Observações:

- b_1 tem o mesmo sinal que $cov(x, y)$ e r.
- Dado x_i e sendo $x_i' = x_i + 1$ tem-se
  $\hat{y}_i = b_0 + b_1 \; x_i \qquad \hat{y}_i' = b_0 + b_1 \; (x_i + 1)$.

$\boldsymbol{b_1 = \hat{y}_i' - \hat{y}_i}, \longrightarrow$ $\boldsymbol{b_1}$ representa a variação esperada para y quando x aumenta uma unidade.

RLS | precisão da reta de regressão

Um dos objectivos da reta de regressão é o de **predizer** o valor de uma variável conhecido o valor assumido pela outra **mas** é necessário avaliar o **grau de precisão** atingido pelas estimativas.

O método dos mínimos quadrados permite uma importante decomposição de $\sum(y_i - \overline{y})^2$.

$$\sum(y_i - \overline{y})^2 = \sum(y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum(\hat{y}_i - \overline{y})^2$$

cujas parcelas se costumam representar por

$$\boldsymbol{SQ_T} \quad = \quad \boldsymbol{SQ_{RE}} \quad + \quad \boldsymbol{SQ_R}$$

Soma dos Quadrados Totais =
Soma dos Quadrados devidos aos REsíduos +
Soma dos Quadrados devidos à Regressão.

RLS | coeficiente de determinação

Definição

O coeficiente de determinação da reta de regressão, definido por $\boldsymbol{R^2 = \frac{SQ_R}{SQ_T}} = \frac{s^2_{\hat{y}}}{s^2_y}$ é uma medida da precisão da reta de regressão.

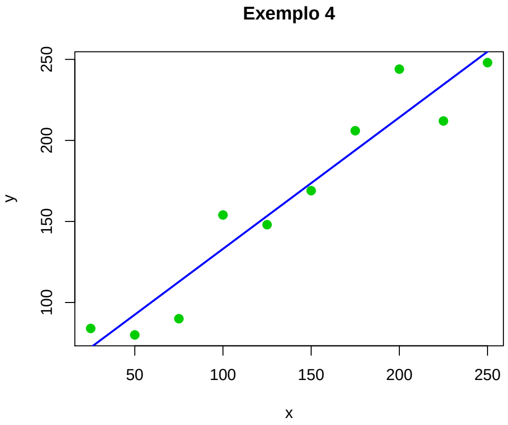
$\boldsymbol{R^2}$ é a **fração de variabilidade dos valores observados da variável resposta que é explicada pela regressão**

No contexto da regressão linear simples:

$$\boldsymbol{R^2} = \frac{SQ_R}{SQ_T} = \frac{b_1^2 \sum (x_i - \overline{x})^2}{\sum (y_i - \overline{y})^2} = \frac{b_1^2 s_x^2}{s_y^2} = \frac{r^2 s_y^2}{s_x^2} \frac{s_x^2}{s_y^2} = \boldsymbol{r^2},$$

ou seja, o coeficiente de determinação da reta é o quadrado do coeficiente de correlação (linear) entre as duas variáveis.

RLS | o Exemplo 4 de novo



$$\overline{x} = 137.5 \text{ g/m}^2$$
$$\overline{y} = 163.5 \text{ g/m}^2$$
$$s_x^2 = 5729.167 \text{ (g/m}^2)^2$$
$$s_y^2 = 4092.722 \text{ (g/m}^2)^2$$
$$cov_{xy} = 4648.611 \text{ (g/m}^2)^2$$

RLS | o Exemplo 4 de novo

A nuvem de pontos mostra a existência de uma tendência linear de fundo entre a produção de relva e a quantidade de fertilizante. O coeficiente de correlação é $r = 0.96$, indicando que essa tendência linear é forte. A reta de regressão ajustada (representada no gráfico sobre a nuvem de pontos) tem a equação $y = 51.933 + 0.8114x$. De acordo com este modelo, por cada g/m^2 a mais na quantidade de fertilizante, a produção de relva aumenta, em média, 0.8114 g/m^2. A reta explica 92.16% da variabilidade dos valores observados para a produção de relva; trata-se de uma reta com precisão elevada.

(Obter os valores assinalados a azul como exercício).