ESTUDO DA UTILIZAÇÃO DE ESTIMADORES COM PROBLEMAS DE ESTIMABILIDADE E APLICAÇÕES

PAULO AFONSO BRACARENSE COSTA

Bacharel em Estatística

Orientador: Prof. Dr. EUCLYDES CUSTÓDIO DE LIMA FILHO

**Dissertação apresentada à Escola Superior
de Agricultura "Luiz de Queiroz", da
Universidade de São Paulo, para obtenção
do título de Mestre em Agronomia, Área
de Concentração: Estatística e
Experimentação Agronômica.**

P I R A C I C A B A

Estado de São Paulo - Brasil

Janeiro de 1995

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Livros da
Divisão de Biblioteca e Documentação - PCLQ/USP

Costa, Paulo Afonso Bracarense
C837e Estudo da utilização de estimadores com problemas
de estimabilidade e aplicações. Piracicaba, 1995.
111p. ilus.

Diss. (Mestre) - ESALQ
Bibliografia.

1. Estatística matemática 2. Modelo de Gaus-Markov
3. Modelo matemático I. Escola Superior de Agricultura
Luiz de Queiroz, Piracicaba

CDD 519.5

ESTUDO DA UTILIZAÇÃO DE ESTIMADORES COM PROBLEMAS DE ESTIMABILIDADE E APLICAÇÕES

PAULO AFONSO BRACARENSE COSTA

Aprovado em 24/03/95

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Eúclydes Custódio de Lima Filho.

UNICAMP

Prof. Dr. Antônio Francisco Iemma

ESALQ - USP

Prof. Dr. Anselmo Chaves Neto

UFPR

Prof. Dr. EÚCLYDES CUSTÓDIO DE LIMA FILHO
Orientador

A meu pai (in memoriam)

A minha mãe e a meus irmãos,

ofereço.

A Sandra e Natália,

dedico.

"HOMO SUM, HUMANI NIHIL

A ME ALIENUM PUTO."

Terêncio

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Euclides Custódio de Lima Filho,
pela orientação e pela paciência.

Ao Prof. Dr. Antônio Francisco Iemma, pelos
primeiros passos em Modelos Lineares.

Ao Prof. Dr. Anselmo Chaves Neto, quem primeiro
nos fez trilhar os caminhos acadêmicos.

À Profa. Dra. Zélia Milléo Pavão, minha mentora
intelectual.

Ao Prof. Dr. Décio Barbin, exemplo de postura
profissional e pessoal invejáveis.

Ao Prof. Dr. Luiz Gonzaga Caleffe, pelos
ensinamentos em Metodologia de Pesquisa e pela redação do
SUMMARY.

Aos professores, colegas e funcionários da
ESALQ/USP.

À Universidade Estadual de Ponta Grossa, pelo
incentivo e confiança.

À Universidade Federal do Paraná, pelo apoio.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de
Nível Superior - CAPES, pela bolsa de estudos (PICD).

À Rosa e à Iza pela amizade, pelo apoio,
e pelo estímulo durante todo o curso. Sem elas esta
história não teria sido escrita desta forma.

Ao Paulo Justiniano, companheiro de estudo,
pelas infindáveis e proveitosas discussões.

Ao Roberto Fernandez, pelo apoio computacional
que foi além do profissionalismo.

Ao Alexandre Brocca, pelo incentivo
desinteressado.

Aos meus alunos, pela manifestação carinhosa
de apoio.

À minha esposa Sandra, pelos constantes
estímulos, solidariedade e paciência.

3.5.2.2. Decomposição da variância do	
Coeficiente de Regressão	74
3.6. Estimação Viciada	77
3.6.1. Avaliação do erro na Estimação	
viciada	78
3.7. Um Exemplo	82
3.7.1. Delimitação do Problema	82
3.7.2. Estudo da Multicolinearidade ...	83
4. CONCLUSÕES	93
5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	96
6. APÊNDICE 1	106
7. APÊNDICE 2	109

ESTUDO DA UTILIZAÇÃO DE ESTIMADORES COM PROBLEMAS DE ESTIMABILIDADE E APLICAÇÕES

AUTOR: PAULO AFONSO BRACARENSE COSTA

ORIENTADOR: EUCLYDES CUSTÓDIO DE LIMA FILHO

RESUMO

No presente trabalho, objetivou-se avaliar a importância do erro que se comete ao se tomar estimadores viciados dos parâmetros do particular modelo linear de regressão múltipla.

Algumas combinações lineares dos parâmetros $(\lambda'\beta)$ são determinadas através de combinações lineares dos dados observados. Neste contexto adota-se a definição de RAO (1945) que a função linear $\lambda'\beta$ é linearmente estimável se existe um vetor " α " tal que $E(\alpha'y) = \lambda'\beta$, para todos os possíveis $\beta \in \mathbb{R}^p$, ou seja, se $\alpha'y$ é um estimador não tendencioso de $\lambda'\beta$.

Ocorre, no entanto, que muitas vezes, não é possível encontrar combinações lineares que obedeçam os pressupostos do Teorema de Gauss-Markov. E nestas circunstâncias, os parâmetros não são estimáveis, e o

problema não pode mais ser estudado no contexto da teoria de modelos lineares.

Foi realizada uma avaliação da importância do erro que se comete ao se tomarem combinações lineares ($a'y$) que não obedecessem àqueles pressupostos e buscar soluções que contornassem o problema de estimabilidade. Foi verificada então a possibilidade de se trabalhar com "quase-estimabilidade", conceito que pode ser compreendido quando se toma λ bastante "próximo" do espaço-linha da matriz X do modelo. O método utilizado foi o da decomposição em valores singulares (DVS) da matriz do modelo. Através dele foi possível compreender a estrutura da matriz e obter algoritmos estáveis para os cálculos realizados.

Foi apresentada uma aplicação em bioestatística, em um estudo de diabete.

STUDY OF THE USE OF ESTIMATORS WITH ESTIMABILITY PROBLEMS AND APPLICATIONS

AUTHOR: PAULO AFONSO BRACARENSE COSTA

ADVISER: EUCLYDES CUSTÓDIO DE LIMA FILHO

SUMMARY

The purpose of this study was to evaluate the importance of the error that is associated with the use of biased estimators of the parameters of the particular multiple regression linear model.

Some linear combinations of the parameters $(\lambda'\beta)$ are determined by means of linear combinations of the observed data. In this context, it adopts the definition of RAO (1945) that the linear function $\lambda'\beta$ is linearly estimable if there exist a vector " a " such that $E(a'y) = \lambda'\beta$ for all possible $\beta \in \mathbb{R}^p$, that is, if $a'y$ is a non biased estimator of $\lambda'\beta$.

However, it is not always possible to determine linear combinations that comply with the assumptions of the Gauss-Markov Theorem. Under these circumstances, the parameter are no longer estimable and the

problem can not be studied within the context of the linear model theory.

An evaluation of the importance of the error associated with the use of linear combinations ($\alpha'y$) that do not meet those assumptions was undertaken. This was followed by the search for solutions to the problem of estimability. The possibility of using the concept of "quasi-estimability" was then analyzed. This concept can be understood as a great proximity of λ to the row-space of the X matrix of the model. The method uses the singular value decomposition (SVD) of the matrix and which makes available a stable algorithm for the necessary calculations.

An application in biostatistics, in a study of diabetes, was presented.

1. INTRODUÇÃO

Análises de modelos são técnicas estatísticas para pesquisar e descrever a relação entre variáveis. Suas aplicações são numerosas e ocorrem em quase todos os campos da ciência. Um dos seus objetivos consiste em explicar um fenômeno real através de um modelo matemático.

Se y é uma variável que deve ser descrita através de um conjunto de fatores $x_1, x_2, \dots, x_n$, então $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n, \varepsilon) = f(x, \varepsilon)$ onde ε representa um conjunto, provavelmente, grande de outros fatores não considerados, e que se convencionou chamar de resíduo ou erro.

Seja, por exemplo, o modelo de regressão linear simples, $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$, que explica a relação entre as variáveis x e y . Então, tomando-se os dados de uma amostra, pode-se obter informações sobre os valores dos parâmetros β_0 e β_1 através de seus estimadores de mínimos quadrados $\hat{\beta}_0$ e $\hat{\beta}_1$, técnica fartamente utilizada e de domínio comum.

A justificativa principal para a utilização do método dos mínimos quadrados para estimar uma regressão linear é dada pelo Teorema de Gauss-Markov. Este teorema garante que na classe dos estimadores lineares não tendenciosos de β , o estimador $\hat{\beta}$ de quadrados mínimos é o que tem variância mínima. Isto é, ele é o melhor estimador linear não tendencioso (BLUE - "Best Linear Unbiased Estimator").

Algumas combinações lineares dos parâmetros $(\lambda'\beta)$ são determinadas através de combinações lineares dos dados observados. Define-se então, que a função linear $\lambda'\beta$ é linearmente estimável se existe um vetor " a " tal que

$$E(a'y) = \lambda'\beta$$

para todos os possíveis $\beta \in \mathbb{R}^p$, ou seja, se $a'y$ é um estimador não tendencioso de $\lambda'\beta$, onde p é o número de parâmetros.

Ocorre, no entanto, que muitas vezes não é possível encontrar combinações lineares que obedecem aos pressupostos do Teorema de Gauss-Markov. E nestas circunstâncias, os parâmetros não são estimáveis, e o problema não pode mais ser estudado no contexto da teoria de modelos lineares.

E ainda, dizer que a função linear $\lambda'\beta$ é linearmente estimável se $a'y$ é um estimador não tendencioso

de $\lambda'\beta$ é fundamentalmente um problema de natureza matemática. Assim, é de grande interesse buscar métodos que proporcionem estabilidade numérica na solução das equações lineares.

O objetivo deste trabalho é avaliar a importância do erro que se comete ao se tomarem combinações lineares $(a'y)$ que não obedeçam aos pressupostos do Teorema de Gauss-Markov, e buscar soluções que contornem o problema de estimabilidade. Será verificada então a possibilidade de se trabalhar com "quase-estimabilidade", conceito que pode ser compreendido quando se tom λ próximo do espaço-linha da matriz X do modelo. Para tanto utiliza-se o método da decomposição em valores singulares (DVS) da matriz do modelo visando obter algoritmos estáveis para o cálculo da aproximação. Ademais, com o objetivo de ilustrar os procedimentos adotados, apresenta-se uma aplicação em um problema real em bioestatística.

2. REVISÃO DE LITERATURA

O problema de multicolinearidade em regressão é fundamentalmente o do mal-condicionamento da matriz X do modelo linear. Ele ocorre quando colunas da matriz X , que são os dados amostrais dos preditores ou variáveis independentes, ou combinações lineares delas são altamente correlacionadas.

A multicolinearidade pode ser compreendida pelo estudo de (i) suas causas, (ii) seu efeito, (iii) seu diagnóstico e (iv) possíveis soluções para o problema de multicolinearidade.

(i) MONTGOMERY E PECK (1981) sugerem como possíveis causas de multicolinearidade : o método utilizado na obtenção dos dados, as restrições sobre o modelo, a especificação do modelo e modelos super parametrizados. As recomendações para a análise de dados e interpretação do modelo resultante depende muito da causa do problema. Esta questão é discutida em detalhes por MASON, GUNST E WEBSTER (1975). Os autores também afirmam que a questão de multicolinearidade é mais uma questão de seu grau, do que simplesmente de sua existência.

Para NETER, WASSERMAN E KUTNER (1983), as variáveis independentes tendem a ser correlacionadas entre si em muitas situações não experimentais, tais como, em ciências sociais e biológicas, economia, finanças dentre outras.

DRAPPER E SMITH (1981) pensam este problema de duas formas. Ou o modelo é super-especificado, isto é, mais parâmetros são postulados que os necessários para expressar os dados, ou os dados não são adequados para estimar os parâmetros do modelo proposto. O que para eles, estas duas formas são "as faces de uma mesma moeda". Essencialmente o que se tem a fazer é simplificar o modelo ou se for possível, coletar dados que possibilitem a sua estimação.

(ii) Para BELSLEY, KUH E WELSCH (1980), o virtual dano que resulta de dados provenientes de variáveis multicolineares, pode ser entendido intuitivamente constatando-se que tais variáveis não fornecem informações que sejam muito diferentes daquelas já inerentes nas outras variáveis, e que portanto, fica difícil inferir sobre as influências individuais dessas variáveis independentes sobre a resposta. MONTGOMERY E PECK (1981) afirmam que a presença de multicolinearidade acarreta sérios efeitos nas estimativas de mínimos quadrados dos coeficientes de regressão. A forte multicolinearidade entre dois preditores resulta em variâncias e covariâncias muito elevadas para os

coeficientes da regressão, embora, esta não seja a única causa. HOERL E KENNARD (1970a) mostram que a multicolinearidade também tende a produzir estimativas dos parâmetros que são muito grandes em valores absolutos, o que implica que a distância entre a estimativa e o verdadeiro valor do parâmetro pode ser muito grande. O que não significa necessariamente que o modelo ajustado seja mal preditor, se a predição ficar confinada a regiões do sub-espço onde a multicolinearidade acontece aproximadamente. MANDEL (1982) corrobora esta opinião através da apresentação do problema pela decomposição em valores singulares da matriz de regressão.

Também, WEBSTER, GUNST E MASON (1974) indicam, entre outros problemas, que a multicolinearidade tende a produzir estimativas de mínimos quadrados com variâncias muito grandes, visto que $V(\hat{\beta}_j) = (1 - R_j^2)^{-1} \sigma^2$, onde R_j^2 é o coeficiente de determinação múltipla da regressão de X_j sobre as variáveis independentes restantes.

BELSLEY, KUH E WELSCH (1980) ilustram o efeito da multicolinearidade em diversas situações de mal condicionamento da matriz do modelo, mostrando que a perfeita colinearidade compromete a unicidade dos estimadores de quadrados mínimos. No caso da quase-multicolinearidade a equação do hiper-plano é mal definida, o que se traduz estatisticamente para o fato que as estimativas de quadrados mínimos (o intercepto e as

inclinações parciais) são imprecisas.

(iii) Muitos procedimentos têm sido empregados para detectar multicolinearidade. BELSLEY, KUH E WELSCH (1980) apresentam métodos mais usuais e seus respectivos problemas e fraquezas. Entre eles estão: sinais hipotéticos dos coeficientes da regressão trocados, "importantes" preditores tem baixos valores da estatística "t" e vários resultados da regressão são sensíveis à deleção de uma linha ou uma coluna da matriz X. NETER, WASSERMAN E KUTNER (1983) chamam estes métodos de informais e complementam a lista quando existem grandes alterações nos coeficientes de regressão estimados; quando uma variável é incluída ou excluída, ou quando uma observação é alterada ou retirada, e intervalos de confiança com grandes amplitudes, para coeficientes de regressão representando importantes variáveis independentes. Nos dois trabalhos, os autores observam que estes métodos informais têm limitações importantes, por não serem condições necessárias ou suficientes para a existência de multicolinearidade e não avaliarem a intensidade nem identificarem a natureza da multicolinearidade.

BELSLEY, KUH E WELSCH (1980) discutem também a utilização do exame da matriz de correlação R dos preditores ou de sua inversa R^{-1} . Afirmam que a falta de altas correlações não indica que não há problema de multicolinearidade. E ainda é possível que três ou mais

variáveis sejam colineares enquanto duas a duas não apresentam esta situação. O mesmo problema surge na proposição de CHATTERJEE E PRICE (1977) da avaliação da multicolinearidade pelos chamados fatores de inflação da variância (VIF_i "variance inflation factors") definidos como

$$VIF_i = \frac{1}{1 - R_i^2}$$

onde R_i^2 é o coeficiente da correlação múltipla de X_i com os preditores remanescentes. Sua fraqueza está em sua incapacidade de distinguir entre muitas quase-colinearidades co-existentes. No entanto, NETER, WASSERMAN E KUTNER (1983) afirmam que experiências têm mostrado, que quando quaisquer dos VIF's excedem a 10, isto pode ser tomado como uma indicação de que os coeficientes de regressão associados a estes valores, têm estimativas de quadrados mínimos demasiadamente influenciadas pela multicolinearidade.

BELSLEY, KUH E WELSCH (1980), citam ainda a técnica de FARRAR E GLAUBER (1967), que teve grande impacto em econometria e que encontraram uma medida de colinearidade baseada na assunção que a matriz $X_{n \times p}$ é uma matriz de uma amostra de tamanho "n" com "p" variáveis com distribuição normal. Além da utilização dos VIF's e de medida de desvio da ortogonalidade através da estatística χ^2 calculada a partir do determinante de R, a matriz de

correlação. Os autores mostram, utilizando vários trabalhos de outros autores que estes métodos não são exatos para apontar multicolinearidade.

MONTGOMERY E PECK (1981) apresentam no cálculo do determinante de $X'X$ um possível indicador de multicolinearidade quando este valor se aproxima de zero. Mas observam que este procedimento não dá qualquer indicação da fonte de multicolinearidade.

BELSLEY, KUH E WELSCH (1980) apontam que por muitos anos os autovalores e autovetores de $X'X$ ou sua correspondente matriz de correlações R foi empregada para diagnosticar multicolinearidade. Cita os trabalhos de KENDALL (1957) e SILVEY (1969) que utilizam os autovalores de $X'X$ como a chave da presença de multicolinearidade, ou seja, "pequenos" autovalores seriam indicativos de multicolinearidade. A dificuldade que surge neste procedimento é determinar o significado de "pequeno", e a natural tendência de comparar "pequeno" com zero.

Segundo MONTGOMERY E PECK (1981) as características desejáveis de um procedimento de diagnóstico resume-se em refletir diretamente o grau de multicolinearidade do problema e fornecer informações úteis para determinar que variáveis independentes estão envolvidas. BELSLEY, KUH E WELSCH (1980) afirmam que a base para o diagnóstico de multicolinearidade está no campo da análise numérica, que é capaz de colocar significado real

para as medidas baseadas nos autovalores e apresenta a decomposição em valores singulares da matriz X , que tem íntima conexão com o sistema de equações características da matriz $X'X$. Aplica o conceito de número de condição e a decomposição da variância dos coeficientes de regressão, discutidos em detalhes no corpo deste trabalho.

(iv) MANDEL (1982), afirma que a grande dificuldade no uso de quadrados mínimos é a existência de colinearidade em muitos conjuntos de dados, e que a maioria das modificações do método de mínimos quadrados ordinários se deveram ao estudo desta questão. Cita como as principais técnicas para a solução deste problema a regressão por componentes principais, a regressão pela análise de valores latentes ("latent root regression"), a regressão contraída ou "shrinkage" e a regressão de cumeeira ("ridge regression"). Uma discussão comparativa entre estas técnicas foi realizada por PALM E IEMMA (1994) incluindo ainda as técnicas de quadrados médios parciais e estimadores de James e Stein.

HOERL & KENNARD (1970) propuseram na solução das equações de mínimos quadrados $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'y$ para modelos de regressão não-ortogonais, a solução $\hat{\beta} = [X'X + KI]^{-1} X'y$ (estimador de cumeeira - "ridge estimator"), onde K é uma matriz diagonal de constantes não negativas. MARQUARDT E SNEE (1976) apresentam uma interpretação geométrica da regressão de cumeeira para o

caso hipotético envolvendo apenas dois parâmetros. HOCKING (1976) ressalta que grande parte da controvérsia, acerca da regressão de cumeira está na escolha do valor da constante K. FERRARI (1989) apresenta vários trabalhos de comparações em busca de um método ótimo para a obtenção de k, destacando os seguintes: método baseado no teorema da existência, método baseado na estimação de $\beta'\beta$, método iterativo, método de Lawless e Wang, método baseado na estatística C_k que envolve a soma de quadrados do resíduo com o valor de K, e o método baseado no traço da cumeira.

O método chamado de análise de valores latentes (ou "latent root regression") desenvolvido por WEBSTER, GUNST E MASON (1974) é uma variante do método de componentes principais. Os autores sugerem calcular os componentes não a partir da matriz $X'X$, mas a partir de $A'A$ onde $A = [y \ X]$, incluindo assim a variável dependente dentro do cálculo dos componentes principais.

PALM E IEMMA (1994) discutem a regressão de mínimos quadrados parciais, que foi desenvolvido dentro do domínio da química, em relação aos problemas de calibragem por MARTENS E NAES (1989). O método apresenta analogias com a regressão por componentes principais e a regressão por valores latentes. Os autores discutem, ainda os estimadores de JAMES E STEIN (1961), que tem por objetivo encontrar um compromisso entre o vício e a variância, a fim de minimizar a esperança matemática do quadrado médio do erro sobre o

vetor dos coeficientes da regressão.

MAYER & WILKE (1973) apresentam a classe dos estimadores viciados ("ridge estimators") para os parâmetros de um modelo linear com matriz de delineamento mal condicionada, como uma sub-classe da classe das transformações lineares dos estimadores de mínimos quadrados, e apresentaram uma classe alternativa de estimadores, rotulados de estimadores contraídos ("shrunk estimators").

LIMA FILHO (1981) discute uma forma de otimizar a estimação de combinações lineares de vetores de parâmetros no modelo linear utilizando observações adicionais. Utiliza a decomposição em valores singulares da matriz de delineamento para indicar com detalhe a estrutura do modelo. Tal método pode ser utilizado para a avaliação de estimadores viciados, representando o espaço-coluna $C(X)$ e o espaço-linha $C(X')$ de modo a permitir a visualização das funções estimáveis e eventuais problemas nos dados e colinearidades nas colunas da matriz X . Além disso, a decomposição em valores singulares da matriz X fornece um modo numericamente estável de cálculo das quantidades de interesse na regressão e proporciona um modo igualmente elementar de apresentar toda a teoria de Modelos Lineares.

HAWKINS (1973), GREENBERG (1975), entre outros, propõem o uso da regressão em componentes principais, como procedimento alternativo ao de mínimos

quadrados, para situações em que as variáveis independentes são altamente correlacionadas. Para a obtenção do estimador em componentes principais HOCKING, SPEED E LYNN (1976) consideram o modelo na forma canônica, onde as variáveis independentes no modelo são consideradas em ordem decrescente de seus autovalores, sendo que os últimos autovalores são próximos de zero, e são então excluídos da análise. Assim a regressão por componentes principais é obtida aplicando-se a técnica de mínimos quadrados aos componentes restantes. Entre as vantagens da regressão por componentes principais, GUNST E MASON (1977b) apontam que tanto a teoria exata sobre as distribuições, como os procedimentos de seleção de variáveis estão disponíveis.

MANDEL (1982) analisa situações de quase-multicolinearidade a partir da decomposição em valores singulares da matriz X , procedimento correlato à regressão por componentes principais e avalia a vantagem de se tomar um estimador viciado para β , desde que a variância das estimativas seja suficientemente menor do que para estimadores não viciados obtidos do método de mínimos quadrados ordinários.

GOOD (1969) mostra que o tratamento mais simplificado de inversas generalizadas é feito através da decomposição em valores singulares da matriz X . A definição da inversa generalizada a partir da DVS é sugestiva por ela mesma, e é mais simples que a definição dada por Moore

(1920)¹ e Penrose (1955)² , que definem a inversa generalizada através de quatro propriedades. A existência e a unicidade são obtidas imediatamente da aplicação da DVS

Do ponto de vista computacional o programa MATLAB é integrado entre outros módulos por um de análise numérica e outro de cálculo matricial. Apresenta os resultados da DVS e os demais resultados numéricos com grande acurácia e é de fácil utilização.

1 MOORE, E. H. On the reciprocal of the general algebraic matrix. Bull. Am. Math. Soc. , 26: 394-95, 1920.

2 PENROSE, R.A. A generalized inverse for matrices. Proc. Cambridge Philos. Soc. 51: 406-13, 1955.

3. MÉTODOS

3.1. DECOMPOSIÇÃO EM VALORES SINGULARES DA MATRIZ X

Seja X uma matriz $n \times p$ de posto $r \leq p$. Os valores $s_1 \geq \dots \geq s_r > 0$, onde s_i^2 ($i = 1, \dots, r$) são as raízes características de $X'X$ (e de XX'), são definidos como valores singulares da matriz X .

Existem matrizes ortogonais $U(n \times n)$ e $V(p \times p)$ e a matriz $S(n \times p)$ com

$$S = \begin{bmatrix} s_1 & & & & & \\ & s_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & s_r & & \\ & & & & 0 & \\ \phi & & & & & \ddots \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

tais que,

$$X_{n \times p} = U_{n \times n} S_{n \times p} V'_{p \times p}$$

Este resultado obtido por ECKART E YOUNG (1936) é chamado de decomposição em valores singulares (DVS) da matriz X .

Os vetores $u_1, u_2, \dots, u_r, u_{r+1}, \dots, u_n$, as n colunas de U , são escolhidos como um conjunto de autovetores ortogonais normalizados de XX' , correspondendo aos autovalores $s_1^2, s_2^2, \dots, s_r^2, 0, \dots, 0$ de XX' .

Define-se

$$U = [U_1 \mid U_2] ; \text{ onde}$$

$U_1 = [u_1, u_2, \dots, u_r]$ são os autovetores normalizados correspondentes aos autovalores não nulos de XX' , $s_1^2, s_2^2, \dots, s_r^2$.

E, $U_2 = [u_{r+1}, u_{r+2}, \dots, u_n]$ são autovetores correspondentes aos autovalores nulos de XX' , $s_{r+1}^2, s_{r+2}^2, \dots, s_n^2$.

Se U_1 é um conjunto ortonormal de autovetores de XX' , correspondentes aos autovalores não nulos, então:

$$XX' u_i = s_i^2 u_i, \quad i = 1, \dots, r.$$

E, v_i , $i = 1, \dots, r$ pode ser definido como

$$v_i = \frac{1}{s_i} X' u_i, \text{ tendo-se então:}$$

$$v_i' v_j = \frac{1}{s_i s_j} (X' u_i)' (X' u_j) = \frac{1}{s_i s_j} u_i' X X' u_j =$$

$$= \frac{1}{s_i s_j} u_i' s_j^2 u_j = \frac{s_j}{s_i} u_i' u_j, \text{ com os } u_i \text{ ortogonais,}$$

então, $v_i' v_j = \frac{s_i}{s_j} \delta_{ij} = \delta_{ij}'$, onde δ_{ij} é o delta

de Kronecker

$U_1 = [u_1, u_2, \dots, u_r]$ constitui uma base ortonormal para $C(X)$, o espaço coluna da matriz X . $[v_1, v_2, \dots, v_r]$ onde

$$v_i = \frac{1}{s_i} X' u_i, \text{ constitui uma base ortonormal para}$$

$C(X')$, o espaço linha da matriz X .

$[u_{r+1}, u_{r+2}, \dots, u_n]$ constitui uma base ortonormal para $C^\perp(X)$, o espaço complemento ortogonal a $C(X)$ e $[v_{r+1}, v_{r+2}, \dots, v_p]$ constitui uma base ortonormal para $C^\perp(X')$, o espaço complemento ortogonal a $C(X')$.

Tem-se por construção:

a) $U = [U_1 | U_2]$ e $V = [V_1 | V_2]$ são ortogonais.

b) $XV_2 = 0$ e $X'U_2 = 0$

(ou $Xv_j = 0 \quad j > r$ e $X'u_j = 0 \quad j > r$).

Tomando a matriz $S = U'XV = (s_{ij})$, obtém-se

$$s_{ij} = u_i'Xv_j = 0, \quad j > r \text{ ou } i > r.$$

Para $i \leq r$ e $j \leq r$

$$s_{ij} = u_i'Xv_j = \frac{1}{s} u_i'XX' u_j = \frac{s_i^2}{s} u_i' u_j = s_i \delta_{ij}$$

logo,

$$S = \begin{bmatrix} s_1 & & & & & \\ & s_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & s_r & & \\ & & & & 0 & \\ \phi & & & & & \ddots \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

o que completa a demonstração. $\square$

X pode ser escrita como:

$$X = U_1 S_1 V_1'$$

$$\text{onde } S_1 = \text{diag} (s_1, \dots, s_r), \text{ ou } X = \sum_{i=1}^r s_i u_i v_i'$$

A DVS está apresentada em detalhes em

BEN-ISRAEL E GREVILLE (1974). Seu cálculo é exposto em detalhes por LAWSON E HANSON (1974). Um algoritmo fácil de cálculo está em GOLUB (1969). AOKI (1992) apresenta uma série de propriedades e teoremas da DVS.

3.2. PROJETORES

3.2.1. PROJETORES ORTOGONAIS

DEFINIÇÃO 3.2.1.1 Diz-se que um espaço linear E é a soma direta dos subespaços E_1 e E_2 , e denota-se $E = E_1 \oplus E_2$ se, e somente se, as seguintes condições forem satisfeitas:

- (i) $E_1 \subseteq E$ e $E_2 \subseteq E$;
- (ii) para cada $x \in E$, existe um $x_1 \in E_1$ e $x_2 \in E_2$, tal que: $x = x_1 + x_2$ e;
- (iii) se $x \in E_1$ e $x \in E_2$ então $x = 0$.

A condição (iii) é análoga a dizer que E_1 e E_2 são virtualmente disjuntos, ou seja $E_1 \cap E_2$ consiste somente do vetor nulo, o que implicará que a resolução descrita em (ii) é única. Pois, dado que:

$$x \in E \text{ e } x = x_1 + x_2 = y_1 + y_2,$$

onde,

$$x_1, y_1 \in E_1 \text{ e } x_2, y_2 \in E_2,$$

então

$$x_1 - y_1 = x_2 - y_2, \text{ e como } x_1 - y_1 \in E_1 \text{ e } x_2 - y_2 \in E_2,$$

por (iii) implica que:

$$y_1 = x_1 \quad \text{e} \quad y_2 = x_2 \quad \square$$

Se $E = E_1 \oplus E_2$ diz-se que E_1 e E_2 são complementares, ou E_1 é complemento de E_2 , ou E_2 é complemento de E_1 . Além disso, se $\langle x, y \rangle = 0$ (produto interno de x e y) para todo $x \in E_1$ e $y \in E_2$ diz-se que E_1 é complemento ortogonal de E_2 , ou E_2 é complemento ortogonal de E_1 .

DEFINIÇÃO 3.2.1.2 *Projektor: Considere um vetor arbitrário $x \in E = E_1 \oplus E_2$ e seja $x = x_1 + x_2$, tal que $x_1 \in E_1$ e $x_2 \in E_2$, onde x_1 e x_2 são únicos. O mapeamento $P : x \rightarrow x_1$ é chamado projetor de E em E_1 na direção de E_2 .*

TEOREMA 3.2.1.1 *Um operador linear P é um projetor se e somente se P é idempotente, ou seja, $P^2 = P$.*

Prova:

($\Rightarrow$) Seja E um espaço linear, tal que $E = E_1 \oplus E_2$ e P um projetor de E em E_1 na direção de E_2 . Então para todo $x_1 \in E_1$ tem-se que $P(x_1) = x_1$ e para todo $x_2 \in E_2$ tem-se que $P(x_2) = 0$.

Então para $x \in E$, $x = x_1 + x_2$ e por (iii) é único. E portanto:

$$\begin{aligned}
 P^2(x) &= P(P(x_1 + x_2)) = P(P(x_1) + P(x_2)) = \\
 &= P(x_1) = x_1 = P(x).
 \end{aligned}$$

(e) Seja $x \in E$ onde $E_1 = \text{Im}(P)$ (imagem de P), $E_2 = \text{Ker}(P)$

(núcleo de P) e $x_1 = P(P(x)) = P^2(x) = P(x) = x_1$.

Seja $x_2 = x - x_1$. Então:

$$P(x_2) = P(x - x_1) = P(x) - P(x_1) = x - x_1 = 0.$$

Então $x = x_1 + x_2$ onde $x_1 \in \text{Im}(P)$ e $x_2 \in \text{Ker}(P)$.

Claramente $\text{Im}(P) \cap \text{Ker}(P) = 0$ e portanto P é um projetor de E em E_1 na direção de E_2 .

Fig. 3.2.1.1

No caso onde E é o plano real a Fig. 3.2.1.1 indica a interpretação geométrica de projeção.

COROLÁRIO 3.2.1.1 Se P é o projetor de E em E_1 na direção de E_2 , então $I - P$ é o projetor de E em E_2 na direção de E_1 .

Prova:

Note que: $(I - P)^2 = I - 2P + P^2$

como $P^2 = P$, então $(I - P)^2 = (I - P)$

e portanto $I - P$ é idempotente e $I - P$ é projetor. Agora se P é um projetor de E em E_1 na direção de E_2 , tem-se que:

$$Px = x_1$$

e portanto

$$(I - P)x = x - Px = x_1 + x_2 - x_1 = x_2$$

ou seja, $(I - P)$ é um projetor de E em E_2 na direção de E_1 .

TEOREMA 3.2.1.2 Se P é idempotente, então:

a) $\text{Im}(I - P) = \text{Ker}(P)$

b) $\text{Ker}(I - P) = \text{Im}(P)$

Prova:

a) Se $x \in \text{Im}(I - P)$, então existe um $y \in C$ (onde C é um espaço linear), tal que $x = (I - P)y$. Então:

$$Px = P(I - P)y = Py - P^2y = Py - Py = 0$$

E portanto,

$$\text{Im} (I - P) \subseteq \text{Ker} (P)$$

Agora se $x \in \text{Ker} (P)$, então $Px = 0$ e portanto

$$(I - P)x = x - Px = x$$

ou seja $x \in \text{Im} (I - P)$, e tem-se que:

$$\text{Ker} (P) \subseteq \text{Im} (I - P) \square.$$

b) Se $x \in \text{Ker} (I - P)$, então

$$(I - P)x = 0 \quad \text{e} \quad x = Px$$

e portanto

$$\text{Ker} (I - P) \subseteq \text{Im} (P)$$

Agora, se $x \in \text{Im} (P)$, então existe um $y \in C$, tal que $Py = x$.

Então,

$$(I - P)x = (I - P)Py = Py - P^2y = Py - Py = 0$$

E portanto, $\text{Im} (P) \subseteq \text{Ker} (I - P) \square$

TEOREMA 3.2.1.3 Se P é idempotente, então $C = K(P) \oplus \text{Im}(P)$.

Prova:

O axioma (i) é certamente satisfeito. Agora para qualquer $x \in C$ pode-se escrever $x = x_1 + x_2$ onde $x_1 = (I - P)x$ e $x_2 =$

Px , pois $x = x_1 + x_2 = (I - P)x + Px = x - Px + Px = x$.
 Então $x_1 \in \text{Im}(I - P)$ e pelo item (a) do Teorema 3.2.1.2, $x_1 \in K(P)$ e $x_2 \in \text{Im}(P)$ e portanto o axioma (ii) é satisfeito. Se $x \in K(P)$ e $x \in \text{Im}(P)$ então pelo item (b) do teorema 3.2.1.2 $(I - P)x = 0$ e $Px = 0$. E portanto $x = 0$ e o axioma (iii) é satisfeito $\square$.

DEFINIÇÃO 3.2.1.3 *Seja E um espaço linear com produto interno. Para um subespaço E_1 qualquer, denota-se $E_1^\perp$ o complemento ortogonal de E_1 , então $E = E_1 \oplus E_1^\perp$, ou seja todo $x \in E$ pode ser expresso unicamente como $x = x_1 + x_2$, onde $x_1 \in E_1$ e $x_2 \in E_1^\perp$. A correspondência $P : x \rightarrow x_1$ é uma transformação linear de E , a qual é chamada projeção ortogonal de E em E_1 .*

TEOREMA 3.2.1.4 *Se P é um projetor ortogonal de E em E_1 , então $(I - P)$ é um projetor ortogonal de E em $E_1^\perp$.*

Prova: Análoga à do corolário 3.2.1.1.

TEOREMA 3.2.1.5 *Seja P um projetor de E em E_1 . Então $P^2 = P$ e $P' = P$, onde P' é o transposto de P . Reciprocamente qualquer transformação linear P com estas propriedades é um projetor ortogonal em algum subespaço.*

Prova:

(I) Se P é um projetor ortogonal de E em E_1 então $P^2 = P$ e $P' = P$.

A primeira parte pode ser obtida através do teorema 3.2.1.1. Agora com $Px \in E_1$ e $(I - P)y \in E_1^\perp$, $\forall x, y \in E$, tem-se que $\langle (I - P)y, Px \rangle = 0 \forall x, y \in E$, ou seja, $\langle P'(I - P)y, x \rangle = 0 \forall x, y \in E$. Então,

$$P'(I - P)y = 0, \forall y \in E$$

$$\Rightarrow P'(I - P) = 0$$

$$\Rightarrow P' = P'P$$

$$\text{e como, } P = (P')' = (P'P)' = P'P = P'$$

$$\text{e portanto } P' = P$$

(II) Se $P = P^2$ e $P' = P$ então P é um projetor ortogonal.

Seja E_1 o conjunto de todos os vetores x_1 , tal que $Px = x_1$ para algum $x \in E$. Pelo Teorema 3.2.1.1, se $P^2 = P$,

$$Px_1 = x_1, \quad \forall x_1 \in E_1$$

$$Px_2 = 0, \quad \forall x_2 = x - x_1$$

Objetiva-se mostrar que para todo $x \in E$,

$$x = x_1 + x_2,$$

onde $x_1 \in E_1$ e $x_2 \in E_1^\perp$. Como

$$\langle Px, x_2 \rangle = (Px)'x_2 = x'P'x_2$$

e por suposição. $P' = P$

$$\langle Px, x_2 \rangle = x'Px_2 = 0, \quad \forall x \in E, \quad \forall x_2 = x - x_1$$

e portanto,

$$x_2 \in E_1^\perp \quad \square.$$

TEOREMA 3.2.1.6 *Seja P um projetor ortogonal de E em E_1 . Então, $\|y\|_2^2 = \|Py\|_2^2, \forall y \in E$, onde $\|\cdot\|_2$ é a norma euclidiana.*

Prova:

Tem-se que:

$$(I) \quad \|Py\|_2^2 \geq 0, \quad \forall y \in E,$$

então

$$\begin{aligned} \|Py\|_2^2 &= \langle Py, Py \rangle = y'P'Py = \\ &= y'P^2y = y'Py = \langle Py, y \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

$$(II) \quad \|(I - P)y\|_2^2 \geq 0, \quad \forall y \in E,$$

então

$$\begin{aligned} \|(I - P)y\|_2^2 &= \langle (I - P)y, (I - P)y \rangle = \\ &= y'(I - P)'(I - P)y = y'(I - P)^2y = \\ &= y'(I - P)y = \langle (I - P)y, y \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Agora,

$$\begin{aligned} \|y\|_2^2 - \|Py\|_2^2 &= \\ &= \langle y, y \rangle - \langle Py, Py \rangle = \quad (I) \\ &= \langle y, y \rangle - \langle Py, y \rangle \geq 0 \quad (II) \end{aligned}$$

e portanto

$$\|Py\|_2 \leq \|y\|_2 \quad \square$$

3.2.2. PROJETORES ORTOGONAIS E MATRIZES

A utilização dos conceitos de projetores ortogonais no modelo linear será apresentada neste item. Alguns poucos conceitos serão apresentados sem um maior desenvolvimento de modelos lineares, que serão detalhados no próximo item para não perder a oportunidade de tirar conclusões simples e imediatas de definições e teoremas apresentados neste item.

DEFINIÇÃO 3.2.2.1 Considere a matriz real $A_{m \times n}$ e os vetores $x \in \mathbb{R}^n$ e $y \in \mathbb{R}^m$. Se y é um vetor definido pelo sistema de equações

$$A_{m \times n} x_{n \times 1} = y_{m \times 1}$$

então y é um vetor do espaço vetorial E^m . Diz-se, neste caso, que o vetor $x \in E^n$ foi transformado no vetor $y \in E^m$ através da matriz de transformação $A_{m \times n}$.

Seja $A_{m \times n}$ uma matriz que transforma vetores $x_i \in \mathbb{R}^n$ em vetores $y_i \in \mathbb{R}^m$. Então, se para quaisquer dois

vetores x_1 e x_2 e quaisquer dois escalares reais c_1 e c_2 , ocorrer sempre.

$$A(c_1 x_1 + c_2 x_2) = c_1 (Ax_1) + c_2 (Ax_2)$$

a transformação é dita linear. As transformações do tipo $Ax = y$ são, além de lineares, homogêneas. Posto que $A0 = 0$.

Se A_n é não singular então $y = Ax$ é transformação singular. Se B_n é ortogonal então $y = Bx$ é dita ortogonal. Em ambos os casos as transformações são bijetoras.

TEOREMA 3.2.2.1 *As transformações ortogonais preservam a distância euclidiana entre vetores.*

Prova:

Seja $y = Ax$, $A' = A^{-1}$

Uma vez que $\|y_1 - y_2\|_2^2 = \langle (y_1 - y_2), (y_1 - y_2) \rangle$
então

$$\|y_1 - y_2\|_2^2 = (y_1 - y_2)' (y_1 - y_2) =$$

$$= (Ax_1 - Ax_2)' (Ax_1 - Ax_2) =$$

$$= (x_1' A' - x_2' A') (Ax_1 - Ax_2) = (x_1' - x_2') A' A (x_1 - x_2) =$$

$$= (x_1' - x_2') (x_1 - x_2) = \langle (x_1 - x_2), (x_1 - x_2) \rangle =$$

$$= || x_1 - x_2 ||_2^2$$

$$\text{logo, } || y_1 - y_2 ||_2 = || x_1 - x_2 ||_2.$$

DEFINIÇÃO 3.2.2.2 *Seja V^n um espaço vetorial e seja a transformação A , que leva os vetores de V^n em E^m .*

Então $E^m = \{y : Ax = y, x \in E^n\}$ é um espaço vetorial.

Serão formalizadas agora algumas idéias sobre tipos especiais de transformações lineares e que tem particular importância em modelos lineares que são as projeções. Deseja-se inicialmente, projetar um vetor $v \in E \subseteq \mathbb{R}^m$ num subespaço E_1 de E .

TEOREMA 3.2.2.2 *Seja um espaço vetorial $E \subseteq \mathbb{R}^m$ e seja $\{v_1, \dots, v_k\}$ um conjunto de vetores ortonormais de E . Se E_1 é o subespaço de E gerado por $\{v_1, \dots, v_k\}$ então qualquer vetor $u \in E$ pode ser escrito na forma $u = s_1 + s_2$, com $s_1 \in E_1$, $s_2 \in E_2$ e $E_1 \perp E_2$ onde*

$$\begin{aligned} s_1 &= \langle u, v_1 \rangle v_1 + \dots + \langle u, v_k \rangle v_k = \\ &= (u' v_1) v_1 + \dots + (u' v_k) v_k \\ s_2 &= u - s_1. \end{aligned}$$

Neste caso s_1 é projeção ortogonal de u sobre E_1 e $s_2 \in E_2$ é a direção dessa projeção.

Dados dois vetores reais u e v de mesmas dimensões, então

$$\langle u, v \rangle v = \langle v, u \rangle v = v \langle v, u \rangle = v \langle v', u \rangle = vv' u$$

Então o vetor s_1 definido no Teorema 3.2.2.2 pode ser reescrito como:

$$s_1 = v_1 v_1' u + \dots + v_k v_k' u = (v_1 v_1' + \dots + v_k v_k') u = Pu$$

Por outro lado seja $A = [v_1, \dots, v_k]$ uma matriz cujas colunas são vetores ortonormais $v_i \in E$, $i = 1, \dots, k$.

Decorre por simples multiplicação que $s_1 = Pu$, onde $P = AA'$ é uma matriz simétrica idempotente, denominada projetor ortogonal de u no espaço gerado pelas colunas da matriz A ou seja, o espaço gerado por $[v_1, \dots, v_n]$ ou ainda o espaço E_1 , o espaço coluna da matriz A , $E_1 = C(A)$.

Então a transformação linear $Pu = s_1$ projeta ortogonalmente os vetores de E no subespaço E_1 . (Projeta ortogonalmente E sobre $C(A)$).

Além disso, a transformação linear $(I - P)u = s_2$, projeta ortogonalmente os vetores de E sobre $C^\perp(A) = E_2$ o espaço complemento ortogonal do espaço coluna da matriz A .

3.2.2.1. A INVERSA DE MOORE-PENROSE

DEFINIÇÃO 3.2.2.1 Define-se como inversa de Moore-Penrose da matriz A ($m \times n$) a matriz X que satisfaz as seguintes condições:

$$(i) \quad AXA = A$$

$$(ii) \quad XAX = X$$

$$(iii) \quad (AX)' = AX$$

$$(iv) \quad (XA)' = XA$$

a inversa de Moore-Penrose será denotada por X^+ .

TEOREMA 3.2.2.1.1 Seja $A \in M_{m,n}$. Existe uma única matriz $X \in M_{n,m}$ que satisfaz as condições (i) a (iv) acima.

Prova:

Sejam x_1 e x_2 duas matrizes satisfazendo as condições (i) a (iv) acima.

Por (ii) e (iii), tem-se que:

$$x_i' = x_i' A' x_i' = A x_i x_i', \quad i = 1, 2$$

$$\Rightarrow x_1' - x_2' = A(x_1 x_1' - x_2 x_2')$$

e então

$$\text{Im}(x_1' - x_2') \subset \text{Im}(A)$$

Utilizando-se as equações (i) e (iv), tem-se que:

$$A' = A' x_i' A' = x_i' A A' , i = 1, 2$$

$$\Rightarrow (x_1' - x_2') A A' = 0 \text{ ou } A A' (x_1' - x_2') = 0$$

e então

$$Im (x' - x') \subset Ker (A A') = {}^{(1)}Ker (A')$$

((1) LANCASTER E JOHNSON (1985), seção 5.3). E como $Ker (A')$ é $Im (A)$ (Lancaster, seção 5.1), temos que:

$$x_1' - x_2' = 0$$

e portanto $x_1' = x_2'$ □.

TEOREMA 3.2.2.1.2 Se $A \in M_{m,n}$, então:

$$Im (A) + Ker (A^+) = \mathbb{R}^m$$

$$Ker (A) + Im (A^+) = \mathbb{R}^n$$

Prova:

Tem-se que $Im (A A^+) = Im (A)$, pois:

$$(i) \text{ se } y = A A^+ x \Rightarrow y \in Im (A A^+)$$

$$\text{e } y = A(A^+ x) \Rightarrow y \in Im (A)$$

então

$$Im (A A^+) \subset Im (A)$$

$$(ii) \text{ se } y = A x \Rightarrow y \in Im (A)$$

$$\text{e como } A = A A^+ A,$$

$$y = A A^+ A x = A A^+ (A x) \Rightarrow y \in Im (A A^+)$$

então

$$Im (A) \subset Im (A A^+)$$

e portanto $\text{Im}(AA^+) = \text{Im}(A)$

seja $H = AA^+$, então $A^+H = A^+AA^+ = A^+$

(1)

e $\text{posto}(A^+) = \text{posto}(A^+H) \leq \min(\text{posto}(A^+), \text{posto}(H)) \leq \text{posto}(H)$ e

$\text{posto}(H) = \text{posto}(AA^+) \leq \min(\text{posto}(A), \text{posto}(A^+)) \leq \text{posto}(A^+)$

(1) ORTEGA (1987) seção 3.5)

e portanto:

$$\text{posto}(H) = \text{posto}(AA^+) = \text{posto}(A^+)$$

Assim,

$\dim(\text{Ker } A^+) = m - \text{posto}(A^+) = m - \text{posto}(AA^+) = \dim(\text{Ker } AA^+)$ onde $\dim(\cdot)$ é a dimensão (*) é dado por LANCASTER E JOHNSON (1985), seção 3.8.

Dado que $x \neq 0$, tem-se que $A^+x = 0$, $x \in \text{Ker } A^+$, e como se $A^+x = 0 \Rightarrow AA^+x = 0$, $x \in \text{Ker}(A^+) \subset \text{Ker}(AA^+)$

Supondo que $AA^+ = 0$, tal que $x \in \text{Ker}(AA^+)$, então $A^+AA^+x = 0 \Rightarrow A^+AA^+ = A^+$, tem-se que $A^+x = 0$, tal que $x \in \text{Ker}(A^+)$ Então $\text{Ker}(AA^+) \subset \text{Ker}(A^+)$.

E portanto $\text{Ker}(A^+) = \text{Ker}(AA^+)$, e pelo Teorema 2, seção 5.8 LANCASTER E JOHNSON (1985), tem-se que:

$$\text{Ker}(AA^+) + \text{Im}(AA^+) = \mathbb{R}^m,$$

e como $\text{Im}(AA^+) = \text{Im}(A)$ e $\text{Ker}(AA^+) = \text{Ker}(A^+)$, tem-se que:

$$\text{Ker}(A^+) + \text{Im}(A) = \mathbb{R}^n$$

e desenvolvendo-se de forma análoga ao anterior, usando a definição de inversa de Moore-Penrose, chega-se ao resultado:

$\text{Ker}(AA^+) = \text{Ker}(A)$ e $\text{Im}(AA^+) = \text{Im}(A^+)$. E portanto:

$$\text{Ker}(A) + \text{Im}(A^+) = \mathbb{R}^n \quad \square.$$

TEOREMA 3.2.2.1.3 Para qualquer matriz $A \in M_{m,n}$, tem-se que:

$$\text{Ker}(A^+) = \text{Ker}(A')$$

$$\text{Im}(A^+) = \text{Im}(A')$$

Prova:

Por definição, tem-se que AA^+ e A^+A são matrizes simétricas.

Como

$$(AA^+)(AA^+) = A(A^+AA^+) = AA^+, \text{ e}$$

$$(A^+A)(A^+A) = (A^+AA^+)A = A^+A$$

A^+A e AA^+ são matrizes idempotentes e por Lancaster seção 5.1, se uma matriz $B \in M_{m,n}$ é idempotente e simétrica, $\text{Im}(B) \oplus \text{Ker}(B) = \mathbb{R}^n$.

Então como AA^+ e A^+A são matrizes simétricas e idempotentes, tem-se:

$$\text{Im}(AA^+) \oplus \text{Ker}(AA^+) = \mathbb{R}^m$$

$$\text{Im}(A^+A) \oplus \text{Ker}(A^+A) = \mathbb{R}^n$$

e como na prova do Teorema 3.2.2.1.2 foi visto que a.

$\text{Im}(AA^+) = \text{Im}(A)$, $\text{Ker}(AA^+) = \text{Ker}(A^+)$, $\text{Im}(A^+A) = \text{Im}(A^+)$ e $\text{Ker}(A^+A) = \text{Ker}(A)$, tem-se:

$$\text{Im}(A) \oplus \text{Ker}(A^+) = \mathbb{R}^m$$

$$\text{Im}(A^+) \oplus \text{Ker}(A) = \mathbb{R}^n$$

e como por LANCASTER E JOHNSON (1985) seção 5.1 tem-se que:

$$\text{Im}(A^+) \oplus \text{Ker}(A') = \mathbb{R}^m$$

$$\text{Im}(A^+) \oplus \text{Ker}(A') = \mathbb{R}^n$$

então

$$\text{Ker}(A^+) = \text{Ker}(A'),$$

$$\text{Im}(A^+) = \text{Im}(A') \square.$$

TEOREMA 3.2.2.1.4 Se $A \in M_{m,n}$, então:

(i) AA^+ é um projetor ortogonal em $\text{Im}(A)$ na direção de $\text{Ker}(A')$.

(ii) A^+A é um projetor ortogonal em $\text{Im}(A')$ na direção de $\text{Ker}(A)$.

(iii) $I - A^+A$ é um projetor ortogonal em $\text{Ker}(A)$ na direção de $\text{Im}(A)$.

(iv) $I - AA^+$ é um projetor ortogonal em $\text{Ker}(A')$ na direção de $\text{Im}(A')$.

Prova:

(i) Como AA^+ é simétrica e idempotente, pelo teorema 3.2.1.5 AA^+ é um projetor ortogonal. Agora seja x um vetor $m \times 1$ qualquer, então se $AA^+x = y$, $y \in \text{Im}(AA^+)$ e como

$\text{Im}(AA^+) \oplus \text{Ker}(AA^+) = \mathbb{R}^m$, AA^+ é um projetor ortogonal em $\text{Im}(AA^+)$ na direção de $\text{Ker}(AA^+)$, e como pelo teorema 3.2.2.1.2 $\text{Ker}(AA^+) = \text{Ker}(A^+)$ e $\text{Im}(AA^+) = \text{Im}(A)$, e pelo teorema 3.2.2.1.3 $\text{Ker}(A^+)$, obtém-se (i).

(ii) Análoga à (i).

(iii) Tem-se que:

(a) $(I - AA^+)' = (I - AA^+) = (I - AA^+)$, pois AA^+ é simétrica.

(b) $(I - AA^+)(I - AA^+) = I - AA^+ - AA^+ + (AA^+)(AA^+) = I - AA^+$ pois AA^+ é idempotente.

Portanto por (a) e (b) tem-se que $I - AA^+$ é um projetor ortogonal em $\text{Im}(A)$ na direção de $\text{Ker}(A')$, seja $x = x_1 + x_2$, onde $x_1 \in \text{Im}(A)$ e $x_2 \in \text{Ker}(A')$.

Então:

$$\begin{aligned} AA^+x &= x_1, \text{ e} \\ (I - AA^+)x &= x - AA^+x = \\ &= x_1 + x_2 - x_1 = x_2 \end{aligned}$$

e portanto $I - AA^+$ é um projetor ortogonal em $\text{Ker}(A')$ na direção de $\text{Im}(A)$.

(iv) Análoga à (iii).

TEOREMA 3.2.2.1.5 Seja $X \in M_{m,n}$ e $X = USV'$ a decomposição por valores singulares da matriz X . Supondo que X tem posto r então:

$$X = U S V'$$

$$X = [U_1 \ U_2] \begin{bmatrix} S_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \end{bmatrix}$$

onde $U_1 \in M_{m,r}$, $U_2 \in M_{m,m-r}$, $S_1 \in M_{r,r}$, $V_1 \in M_{r,n}$ e
 $V_2 \in M_{n-r,n}$

tem-se que:

$X^+ = V_1 S_1^{-1} U_1'$ é a inversa de Moore-Penrose de X .

Prova:

Como X tem posto r :

$$X = U S V' = U_1 S_1 V_1'$$

Pela definição de inversa de Moore-Penrose, X^+ é tal matriz, se ela satisfizer as condições (i) a (iv). Supondo então que $X^+ = V S^{-1} U'$ é a inversa de Moore-Penrose de X é necessário a verificação das condições:

$$(i) \quad XX^+X = X$$

tem-se que:

$$XX^+X = U_1 S_1 V_1' V_1 S_1^{-1} U_1 U_1 S_1 V_1' = U_1 S_1 S_1^{-1} S_1 V_1' = U_1 S_1 V_1' = X.$$

As demais condições são verificadas de modo análogo à verificação da condição (i).

3.3. O MODELO LINEAR

3.3.1. O PROBLEMA DE MÍNIMOS QUADRADOS

O problema do ajuste por quadrados mínimos pode ser expresso da seguinte maneira:

DEFINIÇÃO 3.3.1.1 Dada uma matriz real $A_{m \times n}$ onde $m \geq n$, e um vetor real b de tamanho m , encontrar um vetor x^0 de tamanho n , tal que:

$$\|Ax^0 - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

Define-se o vetor x como:

$$X = \{x : \|Ax - b\|_2 \leq \|Az - b\|_2, \forall z \in \mathbb{R}^n\}$$

(i) Se $x \in X$ então $A'(Ax - b) = 0$, ou seja o resíduo $r = Ax - b$ é ortogonal às colunas de A ($r \in \text{Im}(A)^\perp$).

Prova:

Seja $x \in X$ e seja $w = A'(Ax - b)$. Para todo $\alpha \in \mathbb{R}$ tem-se:

$$\|Ax - b\|_2^2 \leq \|A(x + \alpha w) - b\|_2^2$$

assim:

$$\begin{aligned} & \|A(x + \alpha w) - b\|_2^2 = \\ &= ((Ax + \alpha Aw) - b)'((Ax + \alpha Aw) - b) = \\ &= (Ax + \alpha Aw)'(Ax + \alpha Aw) - (Ax + \alpha Aw)'b - \\ & \quad - b'(Ax + \alpha Aw) + b'b = \end{aligned}$$

$$= \| Ax - b \|_2^2 + \alpha^2 \| Aw \|_2^2 + 2\alpha (Ax - b)'(Aw) - 2\alpha b'(Aw) = \| Ax - b \|_2^2 + \alpha^2 \| Aw \|_2^2 + 2\alpha \| w \|_2^2 =$$

$$= \| Ax - b \|_2^2 + \alpha (\alpha \| Aw \|_2^2 + 2 \| w \|_2^2)$$

e portanto se $w \neq 0$, há uma contradição para α negativo pequeno. $\square$

(ii) X é convexo e tem um único elemento de norma mínima x^0 .

$$\| x^0 \|_2 < \| x \|_2 \quad \forall x \in X - x^0$$

Inicialmente será provado que X tem um único elemento de norma mínima x^0 . O seguinte teorema será utilizado nesta demonstração.

TEOREMA 3.3.1.1 Se A é uma matriz $m \times n$ e $b \in \text{Im}(A)$, então a equação linear $Ax = b$ tem uma única solução x^0 em $\text{Ker}(A)^\perp$, e qualquer solução pode ser escrita como $x^0 + y$, onde $y \in \text{Ker}(A)$.

Prova:

Seja $A : \mathbb{R} \rightarrow S$ e a equação linear:

$$Ax = b \quad (I)$$

para um dado $b \in S$.

Esta equação pode ter uma solução se e somente se, $b \in \text{Im}(A)$. Então se $b \in \text{Im}(A)$, supondo que

x^0 seja uma solução. Então $x^0 + y$ é também uma solução para qualquer $y \in \text{Ker}(A)$, uma vez que:

$$A(x^0 + y) = Ax^0 = b$$

Em geral, qualquer uma das infinitas soluções em (I), pode ter a mesma regra que x^0 . No entanto, se x^0 é restrita a $\text{Ker}(A)^\perp$ então ele é único. Para isto, sejam x_1^0 e x_2^0 duas soluções quaisquer de (I), e seja

$$x_i^c = u_i + v_i, \quad i = 1, 2$$

a decomposição de x_i^c nas partes u_i em $\text{Ker}(A)$ e v_i em $\text{Ker}(A)^\perp$.

Então:

$$Ax_i^c = Av_i = b$$

tal que,

$$A(v_1 - v_2) = 0$$

então $v_1 - v_2$ está no $\text{Ker}(A)$ e no $\text{Ker}(A)^\perp$, e portanto ele deve ser 0. Então $v_1 = v_2$, e ficou comprovado que o componente em $\text{Ker}(A)^\perp$ de qualquer solução é único. $\square$

Seja então $x^0 \in \text{Ker}(A)^\perp$. Então x^0 é único.

Seja $x = x^0 + y$, qualquer outra solução. Então

$$\|x^0 + y\|_2 = \|x^0\|_2 + \|y\|_2$$

$$\|x^0\|_2 \leq \|x^0 + y\|_2$$

e portanto:

$$\|x^0\|_2 < \|x\|_2, \quad \forall x \in X - x^0. \quad \square$$

Será provado agora que X é convexo.

Dado x_1 e $x_2 \in X$, deseja-se mostrar que:

$$x = \alpha x_1 + (1 - \alpha) x_2 \in X, \quad \forall \alpha \in [0, 1]$$

Seja x^0 o único elemento de norma mínima de X . Então $x_i + y_i$, $i = 1, 2$, onde $y_i \in \text{Ker}(A)$. Então

$$\|Ax - b\|_2 = \|A(\alpha x_1 + (1 - \alpha) x_2) - b\|_2 =$$

$$\|\alpha A(x^0 + y_1) + (1 - \alpha) A(x^0 + y_2) - b\|_2 =$$

$$= \|Ax^0\|_2$$

e portanto $\|Ax - b\|_2 \in X. \quad \square$

3.3.1.1 A SOLUÇÃO POR EQUAÇÕES NORMAIS

Seja o modelo linear:

$$y = X\beta + \varepsilon$$

onde

y é o vetor $n \times 1$ de variáveis respostas

X é a matriz $n \times p$ de variáveis preditoras

β é o vetor $p \times 1$ de parâmetros do modelo

ε é o vetor de erro $n \times 1$, sem qualquer suposição adicional sobre sua estrutura estocástica.

Deseja-se encontrar β que torne mínima a função

$$Q(\beta) = \|y - X\beta\|_2^2$$

Tem-se então:

$$Q(\beta) = y'y - 2\beta'X'y + \beta'X'X\beta$$

Derivando $Q(\beta)$ em relação β obtém-se:

$$\frac{dq(\beta)}{d\beta} = -2X'y + 2X'X\beta,$$

igualando-se a derivada a zero, encontra-se o chamado sistema de equações normais:

$$X'X\hat{\beta} = X'y$$

Se X tiver posto p , $X'X$ é definida positiva e portanto não singular, que é o caso de modelos de regressão ou de modelos de planejamento com restrições. Neste caso a

equação tem solução única:

$$\beta^0 = (X'X)^{-1}X'y$$

Uma vez que $X\beta^0 = X(X'X)^{-1}X'y = Py$, P é a transformação linear representando a projeção ortogonal do espaço Euclidiano n -dimensional E_n , em $\text{Im}(X)$. Da mesma forma, com já visto $(I - P)$ representa a projeção ortogonal de E_n no complemento ortogonal, $\text{Im}(X)^\perp$. Então pode-se escrever y como $y = Py + (I - P)y$ onde $Py \in \text{Im}(X)$ e $(I - P)y \in \text{Im}(X)^\perp$.

No entanto, se X não tiver posto p , $X'X$ também não terá, e a equação normal não poderá ser resolvida da mesma forma, uma vez que $X'X$ não tem inversa e as equações normais não proporcionarão uma única solução. Este é o caso de modelos de planejamento de experimentos sem restrições e o caso de matrizes mal-condicionadas de regressão, surgindo então, o caso de multicolinearidade que será tema de discussão em capítulos posteriores.

3.3.2. PROJETORES ORTOGONAIS E O MODELO LINEAR

Foi visto em 3.2.2 que sendo $A = [v_1, \dots, v_k]$ uma matriz cujas colunas são vetores ortonormais $v_i \in V$, $i = 1, \dots, k$. Decorre por simples multiplicação que $s_1 = Pu$, onde $P = AA'$ é uma matriz simétrica idempotente, denominada projetor ortogonal de u no espaço gerado pelas colunas da matriz A ou seja, o espaço gerado por $[v_1, \dots, v_k]$.

v_n] ou ainda o espaço E_1 , o espaço coluna da matriz A . $E_1 = C(A)$.

Então a transformação linear $Pu = s_1$ projeta ortogonalmente os vetores de V no subespaço E_1 . (Projeta ortogonalmente V sobre $C(A)$).

Além disso, a transformação linear $(I - P)u = s_2$, projeta ortogonalmente os vetores de V sobre $C^\perp(A) = E_2$, o espaço complemento ortogonal do espaço coluna da matriz A .

TEOREMA 3.3.2.1 *Seja $E \subseteq \mathbb{R}^m$ tal que $E = C(A) \oplus C^\perp(A)$. Então a matriz que projeta ortogonalmente o espaço E sobre $C(A)$ na direção de $C^\perp(A)$ é dada por $P = XX^+$, onde X^+ é a inversa generalizada de Moore-Penrose. De modo análogo $(I - P)$ é a matriz que projeta ortogonalmente V sobre $C^\perp(A)$ na direção de $C(A)$.*

Desta forma a aplicação de projetores em modelo lineares é imediata:

(i) $\hat{y} = P y = XX^+ y = X\theta^0$, onde θ^0 é qualquer solução das equações normais $X'X \theta = X'y$, é a aproximação de mínimos quadrados para $y \in \mathbb{R}^m$.

(ii) $\hat{\varepsilon} = (I - P)y = y - Py = y - \hat{y}$ é o erro de ajustamento devido à aproximação de mínimos quadrados para o sistema inconsistente $X\theta = y$, $y \in \mathbb{R}^m$.

ciii) $y = \hat{y} + \hat{\varepsilon}$, $y \in \mathbb{R}^m$, $\hat{y} \in C(X)$ e $\hat{\varepsilon} \in C^\perp(X)$.

TEOREMA 3.3.2.2 *Seja $E \subseteq \mathbb{R}^3$ e seja E_1 um subespaço de E . Se y é um vetor de E então a menor distância (melhor aproximação) de y até S é dada por $\hat{\varepsilon} = y - \hat{y}$, onde $\hat{y}$ é a projeção ortogonal de y sobre E_1 .*

Prova:

Seja, para alguma matriz X , $E_1 = C(X)$ e seja x um outro vetor qualquer de E_1 , diferente de $\hat{y}$. Pode-se então escrever:

$$y - x = (y - \hat{y}) + (\hat{y} - x)$$

onde $(\hat{y} - x) \in E_1 = C(X)$ e $(y - \hat{y}) = \hat{\varepsilon} \in E_1^\perp = C^\perp(X)$.

Usando o teorema de Pitágoras, vem

$$\|y - x\|_2^2 = \|\hat{\varepsilon}\|_2^2 + \|\hat{y} - x\|_2^2 \quad (*)$$

Sendo, por hipótese $y \neq x$ e $\hat{y} \neq x$, temos que todos os termos de $(*)$ são estritamente positivos, donde

$$\|y - x\|_2^2 > \|\hat{\varepsilon}\|_2^2$$

ou equivalentemente $\|y - x\|_2 > \hat{\varepsilon}$, ou ainda

$$\|x - y\|_2 > \|y - \hat{y}\|_2 \square.$$

Observa-se então que $\hat{\varepsilon} = y - \hat{y} = y - Py$, onde $y \in E$, $\hat{y} = Py \in E_1 = C(X)$ e $P = XX^+$. Então a menor distância (melhor aproximação) de $y \in E$ até E_1 é dada pelo erro devido à aproximação de mínimos quadrados $\hat{\varepsilon} = y - \hat{y} = y - Py = y - X\theta^0$, $\forall \theta^0$ solução das equações normais.

TEOREMA 3.3.2.3 *Uma condição necessária e suficiente para que θ^0 seja solução aproximada de mínimos quadrados para $X\theta = y$ inconsistente é que $\hat{y} = X\theta^0 = Py$ seja a projeção ortogonal de y em $C(X)$.*

Prova: Análoga à do Teorema 3.3.2.2

TEOREMA 3.3.2.4 *Dado o sistema inconsistente $y = X\theta$ e uma solução aproximada qualquer θ^0 , uma condição necessária e suficiente para que a S.Q erro devido à aproximação seja mínima é que o vetor de erros seja ortogonal ao espaço coluna de X .*

Prova:

$$\begin{aligned} \|\hat{\varepsilon}\|_2^2 \text{ MIN} &\Leftrightarrow X'X\theta^0 = X'y \Leftrightarrow X'(y - X\theta^0) = 0 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow X'(y - \hat{y}) = 0 \Leftrightarrow \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \hat{X\varepsilon} = 0 \Leftrightarrow \hat{\varepsilon} \perp C(X) \quad \square.$$

TEOREMA 3.3.2.5 *Uma condição necessária e suficiente para que a S.Q. do erro devido à solução aproximada θ^0 , seja mínima é $\hat{y} = Py$.*

Prova:

$$\| \hat{\varepsilon} \|^2_{\text{MIN}} \Leftrightarrow X'X\theta^0 = X'y \Leftrightarrow X'\hat{y} = X'y \Leftrightarrow \hat{y} = XX^+y \Leftrightarrow \hat{y} = Py.$$

3.3.3. MODELOS LINEARES E A DVS

Inicialmente será estuda a solução da equação linear $Ax = b$, para então se fazer a leitura de modelos lineares via DVS.

Seja $A \in M_{m,n}$, $b \in \mathbb{R}^n$ e considere a equação linear $Ax = b$. No caso em que o posto de A não é completo, o sistema será indeterminado, com infinitas soluções. Deseja-se encontrar uma solução x^0 , tal que:

$$\| Ax^0 \|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \| Ax - b \|_2$$

TEOREMA 3.3.3.1. *Se $A = USV'$, é a decomposição por valores singulares de A , então a solução por mínimos quadrados da equação linear $AX = b$, é dada por:*

$$x^0 = \sum_{i=1}^r \frac{(u_i' b)}{s_i} v_i$$

onde r é o posto (A).

Prova:

Temos que:

$$\| Ax - b \|_2^2 = \| USV'x - b \|_2^2$$

denotando-se $y = V'x$,

$$\| USy - b \|_2^2 = \| Sy - U'b \|_2^2 =$$

$$= (Sy - U'b)'(Sy - U'b) =$$

$$= \sum_{i=1}^r (s_i y_i - u_i' b)^2 + \sum_{i=r+1}^n (u_i' b)^2$$

onde u_i é a i -ésima coluna da matriz U e y_i é o i -ésimo elemento do vetor y .

Para que esta soma de quadrados seja minimizada com o vetor y^0 de norma mínima, deve-se estabelecer:

$$y^0 = \begin{cases} u_i' b / s_i & \text{para } i = 1, \dots, r \\ 0 & \text{para } i = r+1, \dots, n \end{cases}$$

ou seja,

$$x^0 = Vy^0 = \sum_{i=1}^r y_i v_i = \sum_{i=1}^r \frac{u_i' b}{s_i} v_i$$

onde v_i é a i -ésima coluna de V . $\square$

Considerando agora o modelo linear

$$y = X\beta + \varepsilon$$

com as condições de G-M em ε . Seja

$$X = USV' = U_1 S_1 V_1'$$

a decomposição em valores singulares da matriz X .

O problema da aproximação consiste em calcular algum β que minimize a norma Euclidiana de $y - X\beta$,

Tem-se então:

$$\|y - X\beta\|_2^2 = \|y - USV'\beta\|_2^2 = \|U'y - SV'\beta\|_2^2 =$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} U_1' y \\ U_2' y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} S_1 V_1' \beta \\ S_2 V_2' \beta \end{bmatrix} \right\|_2^2 =$$

$$= \|U_1' y - S_1 V_1' \beta\|_2^2 + \|U_2' y\|_2^2.$$

Foi usado o fato de a norma Euclidiana ser invariante sob transformações ortogonais.

O mínimo é, então, obtido tomando-se

$$S_1 V_1' \hat{\beta} = U_1' y,$$

ou seja,

$$\hat{\beta} = V_1 S_1^{-1} U_1' y = X^+ y$$

Outras quantidades de interesse podem ser determinadas:

Valor ajustado. $\hat{y} = X\hat{\beta} = U_1 S_1 V_1' V_1 S_1^{-1} U_1' y = U_1 U_1' y$

Vetor de resíduos. $\hat{\varepsilon} = y - \hat{y} = (I - U_1 U_1') y = U_2 U_2' y$

Projektor ortogonal de y em $C(X)$. $P_X = U_1 U_1'$

Projektor ortogonal de y em $C(X')$. $P_{X'} = V_1 V_1'$

Projektor ortogonal de y em $C^\perp(X)$. $P_{X^\perp} = I - U_1 U_1' = U_2 U_2'$

Projektor ortogonal de y em $C^\perp(X')$. $P_{(X')^\perp} = I - V_1 V_1' = V_2 V_2'$

Pode-se verificar em cada projetor a simetria e idempotência de cada matriz. Além destas pode-se determinar através da DVS as expressões de somas de quadrados e expressões para as variâncias dos estimadores dos β_i e de $\hat{y}$, que serão mostradas quando da sua utilização no estudo de estimação viciada.

3.4. ESTIMABILIDADE

3.4.1. ESTIMABILIDADE NO MODELO DE GAUSS MARKOV

DEFINIÇÃO 3.4.1.1 O modelo linear $y = X\theta + \varepsilon$, onde:

$y_{n \times 1}$ é um vetor de realizações de variáveis aleatórias,

$X_{n \times p}$ é uma matriz conhecida, de posto $r \leq \min(n, p)$,

$\theta_{p \times 1}$ é um vetor de parâmetros desconhecidos, e

$\varepsilon_{n \times 1}$ é um vetor de variáveis aleatórias não observáveis, tal que $\varepsilon \approx (0, I\sigma^2)$, é definido como o modelo linear de Gauss-Markov (G.M.).

Desta forma, $E(y) = E(X\theta + \varepsilon) = X\theta + 0 = X\theta$, e $VC(y) = V(X\theta + \varepsilon) = VC(X\theta + \varepsilon) = 0 + VC(\varepsilon) = I\sigma^2$. E portanto $y \approx (X\theta, I\sigma^2)$. A matriz de covariâncias pode, no entanto, assumir caracterizações mais complexas que $I\sigma^2$. Se a $VC(\varepsilon)$ é diagonal mas não é a identidade com σ^2 em evidência e, as demais pressuposições permanecem inalteradas então o modelo é referido como modelo linear ponderado de Gauss-Markov. E se a matriz de covariâncias tem estrutura mais geral que as formas diagonais anteriores, então o modelo é referido como modelo linear generalizado de Gauss-Markov.

Dado $y = X\theta + \varepsilon$ (G.M.), se X tem posto coluna

completo como em geral ocorre em problemas de regressão, a menos de colinearidades, então $X'X$ é positiva definida e portanto não singular, e neste caso, a solução única do sistema, é dada por:

$$\hat{\theta} = (X'X)^{-1} X'y$$

Além disto $\hat{\theta}$ é estimador não viciado para θ .

$$E[\hat{\theta}] = E[(X'X)^{-1}X'y] = (X'X)^{-1}X'E[y] = (X'X)^{-1}X'X\theta = \theta$$

Assim, pode-se dizer que se X tem posto coluna completo, a solução única de mínimos quadrados de $\hat{\theta}$ é o estimador de mínimos quadrados para θ .

A matriz de variâncias e covariâncias pode ser obtida por:

$$\begin{aligned} V[\hat{\theta}] &= V[(X'X)^{-1}X'y] = (X'X)^{-1}X'V[y]X(X'X)^{-1} = \\ &= (X'X)^{-1}X'I\sigma^2X(X'X)^{-1} = (X'X)^{-1}\sigma^2 \end{aligned}$$

No caso em que X não tem posto coluna completo, como no caso de delineamentos experimentais, a menos de restrições ou parametrizações ou no caso de multicolinearidade em regressão, $(X'X)^{-1}$ não existe e o sistema de equações normais é indeterminado. Neste caso a solução não é um estimador não viciado de θ .

Agora, serão formalizados alguns conceitos básicos sobre estimação em modelos lineares:

DEFINIÇÃO 3.4.1.2 (RAO, 1945) *Uma função linear paramétrica, $\lambda'\theta$ é dita estimável no modelo $y = X\theta + \varepsilon$, G.M., se e somente se, existe uma combinação linear das observações $a'y$, tal que $E[a'y] = \lambda'\theta$.*

Do ponto de vista prático, esta definição é bem pouco operacional pois depende da dimensão do vetor y das observações.

TEOREMA 3.4.1.1 (RAO, 1945) *Uma condição necessária e suficiente para que a função paramétrica $\lambda'\theta$ seja estimável no modelo $y = X\theta + \varepsilon$ (G.M.) é $\lambda \in C(X')$.*

Prova:

($\Rightarrow$) $\lambda \in C(X') \Rightarrow \lambda'\theta$ é estimável.

$$\lambda \in C(X') \Rightarrow \exists a: X'a = \lambda \Rightarrow \lambda' = a'X$$

pós-multiplicando-se por θ obtém-se.

$$\lambda'\theta = a'X\theta \Rightarrow \lambda'\theta = a' E[y] \Rightarrow \lambda'\theta = E[a'y] \Rightarrow \lambda'\theta \text{ é estimável.}$$

($\Leftarrow$) $\lambda'\theta$ é estimável $\Rightarrow \lambda \in C(X')$

$$\lambda'\theta \text{ estimável} \Rightarrow \lambda \in C(X')$$

□

$$\lambda'\theta \text{ estimável} \Rightarrow \exists a: E[a'y] = \lambda'\theta \Rightarrow a'X\theta = \lambda'\theta \Rightarrow \lambda \in C(X')$$

, $\forall \theta$.

COROLÁRIO 3.4.1.1 Cada condição dada a seguir é necessária e suficiente para que $\lambda' \theta$ seja estimável no G.M.

$$(i) \quad r[X] = r[X' | \lambda]$$

$$(ii) \quad r[X'X] = r[X'X | \lambda]$$

DEFINIÇÃO 3.4.1.3 Dada a função paramétrica $\lambda' \theta$ estimável no G.M., então o sistema consistente $X'X\rho = \lambda$ é definido como sistema de equações normais associados.

O sistema de equações normais associadas preserva propriedades importantes das equações normais, como por exemplo a invariância de $X\rho^0$, $\forall \rho^0$ solução das equações normais associadas.

DEFINIÇÃO 3.4.1.4 Dado o modelo de Gauss-Markov, sejam todas as possíveis combinações $a'y$ tais que $E[a'y] = \lambda' \theta$. Dentre elas, seja a^*y . Então a^*y é definido como o melhor estimador não viciado de $\lambda' \theta$ se e somente se :

$$V[a^*y] = \min V[a'y], \forall a'y : E[a'y] = \lambda' \theta$$

a^*y é conhecido como "BLUE" de $\lambda' \theta$. (Best - Linear Umbiased Estimator). Denota-se igualmente:

"BLUE" de θ de $\lambda'\theta = \hat{\lambda}'\theta$.

TEOREMA 3.4.1.2 Se $\lambda'\theta$ é estimável no G.M. então seu "BLUE" pode ser obtido de:

$$\hat{\lambda}'\theta = \rho X'y \text{ (único)}$$

onde ρ é qualquer solução das equações normais associadas.

TEOREMA 3.4.1.3 (GAUSS-MARKOV) Se $\lambda'\theta$ é estimável no modelo $y = X\theta + \varepsilon$, então $\hat{\lambda}'\theta = \lambda'\theta^0$, qualquer θ^0 solução das equações normais.

3.4.2. LEITURA PELA DVS

Seja o modelo linear GM

$$y = X\theta + \varepsilon$$

que pode ser escrito como $y = U \begin{bmatrix} S \\ V' \end{bmatrix} \theta + \varepsilon$, que pré-multiplicado por U' , torna-se

$$U'y = U'U \begin{bmatrix} S \\ V' \end{bmatrix} \theta + U'\varepsilon \Rightarrow U'y = \begin{bmatrix} S \\ V' \end{bmatrix} \theta + U'\varepsilon.$$

essa expressão pode ser decomposta em

$$U'_1 y = S_1 V'_1 \theta + U'_1 \varepsilon$$

$$U'_2 y = 0 + U'_2 \varepsilon$$

Esta forma mostra que apenas funções $\lambda'\theta$ com λ no espaço $C(X') = C(V_1)$ são identificáveis dos dados. Estas expressões são chamadas de *forma canônica do Modelo Linear*.

De acordo com o Teorema de Gauss-Markov, o melhor estimador linear não tendencioso ("BLUE - Best linear unbiased estimator) de $\lambda'\theta$ é dado por

$$\hat{\lambda'\theta} = \lambda'\theta^0$$

onde θ^0 é qualquer solução do sistema de equações normais do modelo linear de Gauss-Markov,

$$\text{para } \theta^0 = V S^{-1} U' y ,$$

verifica-se que:

$$\begin{aligned} (1) E [\lambda'\theta] &= E [\lambda' V S^{-1} U' y] \\ &= \lambda' V S^{-1} U' E [y] \\ &= \lambda' V S^{-1} U' U S V' \theta \\ &= \lambda' V V' \theta = \lambda' \theta \quad (\text{conforme Teorema 3.4.2.1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2) \text{Var} [\lambda'\theta] &= \lambda' \text{Var} [\theta^0] \lambda \\ &= \lambda' \text{Var} [V S^{-1} U' y] \lambda \\ &= \lambda' V S^{-1} U' \text{Var} [y] U S V' \lambda, \end{aligned}$$

mas $\text{Var} [y] = I \sigma^2$, então

$$\text{Var} [\lambda'\theta] = \lambda' V S^{-1} U' I \sigma^2 U S V' \lambda$$

assim,

$$\text{Var} [\lambda' \theta] = \lambda' V S^{-2} V' \lambda \sigma^2$$

Visto que $\lambda' \theta$ é estimável se $\lambda \in C(X')$, o espaço linha da matriz X é não estimável caso contrário, surge o problema de determinar na prática se $\lambda' \theta$ é estimável para um certo λ .

A DVS fornece modos convenientes de se verificar a estimabilidade:

(a) CARVALHO FILHO E IEMMA (1990)

TEOREMA 3.4.2.1 *A função $\lambda' \theta$ é estimável no modelo linear de Gauss-Markov se e somente se $\lambda' V_1 V_1' = \lambda'$.*

Prova:

($\Rightarrow$) Seja $\lambda' \theta$ estimável. Então existe uma função linear de observações $\alpha' y$ tal que $E(\alpha' y) = \lambda' \theta$, ou seja

$$E(\alpha' y) = \alpha' E(y) = \alpha' X \theta = \lambda' \theta$$

Substituindo X pela sua DVS tem-se que:

$$\alpha' U_1 S_1 V_1' = \lambda', \forall \theta$$

Pós-multiplicando esta expressão por $V_1 V_1'$, tem-se

$$\alpha' U_1 S_1 V_1' V_1 V_1' = \lambda' V_1 V_1'$$

Simplificando-se o primeiro termo, obtém-se

$$\alpha' U_1 S_1 V_1' = \lambda' V_1 V_1'$$

resultando então em $\lambda' V_1 V_1' = \lambda$.

$$(e) \lambda' V_1 V_1' = \lambda'$$

pós-multiplicando por θ tem-se

$$\lambda' \theta = \lambda' V_1 V_1' \theta$$

de $\theta^0 = V_1 S_1^{-1} U_1' y$, obtém-se que

$$E(\theta^0) = E(V_1 S_1^{-1} U_1' y) = V_1 S_1^{-1} U_1' E(y).$$

$$\text{Mas } E(y) = X \theta = U_1 S_1 V_1' \theta,$$

então,

$$E(\theta^0) = V_1 S_1^{-1} U_1' U_1 S_1 V_1' \theta = V_1 V_1' \theta.$$

$$\text{Retomando, } \lambda' \theta = \lambda' V_1 V_1' \theta = \lambda' E(\theta^0) = \lambda' V_1 S_1^{-1} U_1' E(y)$$

tomando-se $\lambda' V_1 S_1^{-1} U_1' = \alpha'$, tem-se que

$$\lambda' \theta = \alpha' E(y) = E(\alpha' y).$$

Desta forma, existe uma função linear das observações, $\alpha' y$, tal que $E(\alpha' y) = \lambda' \theta$.

Então de acordo com RAO (1945), $\lambda' \theta$ é estimável, concluindo a demonstração.

(b) CARVALHO (1982) Determinada uma precisão para o zero, por exemplo $\varepsilon > 0$. Dado um particular λ , calcula-se o vetor $V_2' \lambda$. Se qualquer componente de $V_2' \lambda$ for maior, em módulo, que certo valor pré-estabelecido, então $\lambda' \theta$ é declarado não estimável. Uma função pode ser estimável

segundo esse critério e ainda assim ser tal que $V_1 \lambda$ tenha componente não pequeno associado a pequeno (mas não nulo) s_i , resultando uma variância enorme. Se a variância for muito grande, prefere-se dizer que $\lambda' \theta$ é mal-estimável.

Quando se toma combinações lineares, $\alpha'y$, que não obedecem os pressupostos do Teorema de Gauss-Markov, trabalha-se com o conceito de quase-estimabilidade, conceito que pode ser compreendido como uma grande proximidade de λ do espaço-linha da matriz X do modelo.

3.5. MULTICOLINEARIDADE

3.5.1. REGRESSÃO POR COMPONENTES PRINCIPAIS

3.5.1.1. O MÉTODO

A técnica de componentes principais se utiliza da aplicação da DVS no modelo de regressão, cuja interpretação geométrica deixou clara a utilidade em se fazer a troca de X pela sua DVS no sentido de compreender a estrutura da matriz do modelo. No caso do estudo de multicolinearidade sua utilidade ficará mais evidente, como será visto abaixo:

Seja então o modelo de regressão $y = X\beta + \varepsilon$, no qual será introduzida a DVS de X .

então

$$y = USV'\beta + \varepsilon$$

escrito desta forma o modelo é chamado de "modelo de regressão por componentes principais". A equação acima pode ser escrita como:

$$y = U(SV'\beta)$$

onde $SV'\beta$ é uma matriz de ordem $r \times 1$, que é um vetor de r elementos. Este vetor será chamado de α . Então:

$$\alpha = SY'\beta$$

e

$$y = U\alpha + \varepsilon$$

O vetor y e a matriz U são conhecidos. A solução de mínimos quadrados por os coeficientes desconhecidos α são obtidos pelo sistema de equações normais:

$$\hat{\alpha} = (U'U)^{-1}U'y = U'y, \text{ uma vez que } U'U = I$$

Esta equação é facilmente resolvida, uma vez que $\hat{\alpha}$ é simplesmente o produto interno do vetor y pelo j -ésimo vetor u_j .

Segue das últimas relações que:

$$\hat{\alpha} = U'(U\alpha + \varepsilon) = \alpha + U'\varepsilon$$

ou

$$\hat{\alpha} - \alpha = U'\varepsilon$$

Então

$$E(\hat{\alpha}_j - \alpha_j) = 0 \text{ ou } E(\hat{\alpha}_j) = \alpha_j$$

Ou seja, $\hat{\alpha}_j$ é estimador não viciado de α_j . E além disso a variância de $\hat{\alpha}_j$ é dada por:

$$\text{var}(\hat{\alpha}_j) = E(\hat{\alpha}_j - \alpha_j)^2 = E\left(\sum u_{1j}u_{tj}\varepsilon_1\varepsilon_t\right) = \left(\sum u_{1j}^2\right)\sigma^2$$

então $\text{var}(\hat{\alpha}) = \sigma^2$.

Pode-se mostrar ainda que os $\hat{\alpha}_j$ são mutuamente não correlacionados.

O número de elementos de β é, no entanto p , enquanto o número de elementos de α é r , que pode ser menor que p . Agora, a relação entre β e α dada anteriormente, também ocorrerá para as estimativas de mínimos quadrados de α e β . Ou seja,

$$\hat{\alpha} = SV' \hat{\beta}$$

Na relação acima, SV' tem dimensão $r \times p$. Então, a relação matricial representa r equações com p estimativas do parâmetro β , $\hat{\beta}$. Se $r = p$ (o caso de posto completo), a solução é possível e única.

Neste caso V' é uma matriz ortogonal $p \times p$. Então a solução será dada por:

$$\hat{\beta} = V'^{-1} S^{-1} \hat{\alpha} = V S^{-1} \hat{\alpha}$$

Pode-se observar que $S^{-1} \hat{\alpha}$ é um vetor $p \times 1$, obtido pela divisão de cada $\hat{\alpha}_j$ pelo seu correspondente s_j .

Um importante uso desta expressão, além de determinar as estimativas de β em função de $\hat{\alpha}$, é o pronto-cálculo das variâncias de $\hat{\beta}_j$.

Em notação geral, a última equação obtida pode ser escrita

como:

$$\hat{\beta}_j = \sum_{k=1}^P v_{jk} \frac{\hat{\alpha}_k}{s_k}$$

Uma vez que os $\hat{\alpha}_j$ são mutuamente ortogonais e têm todos a mesma variância σ^2 , então:

$$\text{var}(\hat{\beta}_j) = \left[\sum_{k=1}^P \frac{v_{jk}^2}{s_k^2} \right] \sigma^2.$$

O numerador de cada termo são quadrados dos elementos da primeira linha da matriz V , isto é, são valores entre 0 e 1. Mas os denominadores são quadrados dos valores singulares. Ocorre que quando um dos s_j é considerado pequeno em relação aos outros, ele contribui de forma importante para o aumento do valor da variância das estimativas dos parâmetros. Ver para maiores informações sobre a importância relativa de cada parcela desta variância em (3.5.2.1) número de condição de X e (3.5.2.2) decomposição da variância do coeficiente de regressão.

3.5.1.2. MULTICOLINEARIDADE E SEUS EFEITOS NA REGRESSÃO

Os s 's são as raízes quadradas dos autovalores da matriz $X'X$. Um s igual a zero, implica em um autovalor igual a zero. Isso por sua vez implica que uma

relação linear existe entre pelo menos alguns dos p x -vetores da matriz X . Um valor de s muito próximo de zero implica em uma "aproximada" relação linear entre alguns destes p vetores de X .

Literalmente, duas variáveis são colineares se os vetores de dados que as representam estão em uma mesma reta, isto é estão no mesmo subespaço de dimensão um. Mais genericamente, k variáveis são colineares se os vetores que as representam estão em um subespaço de dimensão menor que k , isto é, se um dos vetores é combinação linear dos outros. Na prática, tal "exata colinearidade" raramente ocorre, e isto certamente não dirá necessariamente que um problema de colinearidade existe.

Para efeitos de estimação estatística, duas variáveis serão consideradas colineares se elas estiverem quase no mesmo subespaço, ou seja, se o ângulo entre elas for pequeno.

Isto equivale a dizer que se o coeficiente de correlação entre elas for grande existirá "colinearidade". Este conceito pode ser estendido a várias variáveis, dizendo-se que "colinearidade" existe se o coeficiente de correlação múltipla entre elas for alto, quando se faz a regressão de uma variável contra as outras.

Outra forma de se referir à colinearidade, diz respeito ao "condicionamento" da matriz de dados X .

Assim, fica claro que a colinearidade tem a

ver com as características específicas da matriz X e não de aspectos estatísticos do modelo linear $y = X\beta + \epsilon$. Então colinearidade é um problema de dados e não um problema estatístico, mas apesar disto têm grande importância na eficácia da estimação de mínimos quadrados.

Em regressão por componentes principais, havendo relação exata entre duas variáveis, então a DVS da matriz X mostrará que um s_k será exatamente igual a zero, e desta forma o posto da matriz não será mais p e sim $r=p-1 < p$. Usando a expressão que estima α

$$\hat{\alpha} = U'y$$

pode-se calcular os valores de $\hat{\alpha}_k$. E neste caso o número de valores de α será menor que o número de valores de β . Se for tentado utilizar a expressão $(SV')\hat{\beta} = \hat{\alpha}$ ocorrerá que o número de equações será menor que o número de parâmetros desconhecidos a serem estimados, e portanto, tem-se um sistema consistente mas indeterminado, e ter-se-ia que expressar $p - 1$ dos p valores de $\hat{\beta}$ em função do outro restante.

Para tratar deste caso MANDEL (1982) sugere que se denote a matriz (SV') por Z . Assim,

$$Z \equiv SV'$$

e particionar Z em Z_A e Z_B , com dimensões $r \times r$ e $r \times (p-r)$ respectivamente. Particionando, então o vetor β correspondentemente em $r \times 1$ e $(p-r) \times 1$, tem-se

$$\begin{pmatrix} Z_A & Z_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\beta}_A \\ \hat{\beta}_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \end{pmatrix}$$

que pode ser escrito como $Z_A \hat{\beta}_A + Z_B \hat{\beta}_B = \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \end{pmatrix}$

pré-multiplicando ambos lados desta expressão por Z_A^{-1} , obtém-se:

$$\hat{\beta}_A + Z_A^{-1} Z_B \hat{\beta}_B = Z_A^{-1} \hat{\alpha}$$

Esta equação mostra que se um valor para $\hat{\beta}_B$ for arbitrado, $\hat{\beta}_A$ será unicamente determinado.

Será agora considerado o caso de predição. Considerando um novo ponto x para o qual se deseja uma estimativa para $\hat{y}$. Tem-se:

$$\hat{y} = x \beta$$

Se for introduzida a partição de $\hat{\beta}$, tal que $\hat{\beta}_A$ tenha a dimensão $r \times 1$ (r , o posto da matriz X) e x for particionado correspondentemente em x_A , de dimensão $1 \times r$ e x_B com dimensões $1 \times (p - r)$.

Então:

$$\hat{y} = (x_A \ x_B) \begin{pmatrix} \hat{\beta}_A \\ \hat{\beta}_B \end{pmatrix}$$

ou

$$\hat{y} = x_A \hat{\beta}_A + x_B \hat{\beta}_B$$

tomando a expressão desenvolvida para $\hat{\beta}_A$ anteriormente, e substituindo-a na expressão acima, tem-se:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= x_A [Z_A^{-1} \hat{\alpha} - Z_A^{-1} Z_B \hat{\beta}_B] + x_B \hat{\beta}_B \\ \text{ou} \\ \hat{y} &= x_A (Z_A^{-1} \hat{\alpha}) + (x_B - x_A Z_A^{-1} Z_B) \hat{\beta}_B \quad (*) \end{aligned}$$

Para que a expressão acima faça sentido, deve-se observar que o valor de $\hat{y}$ não muda para qualquer valor arbitrário de $\hat{\beta}_B$. Isto implica que

$$x_B - x_A Z_A^{-1} Z_B = 0$$

e a solução para o valor estimado será:

$$\hat{y} = x_A (Z_A^{-1} \hat{\alpha})$$

A expressão em (*) produz duas relações: a primeira parcela é a solução e a segunda parcela uma condição. Mas a solução é válida somente quando a condição é satisfeita.

Em resumo: Se $r < p$, não existe solução única para $\hat{y}$ para um ponto x , exceto no caso em que este x obedeça a condição de colinearidade resultante de um valor zero para s .

3.5.1.3. QUASE-MULTICOLINEARIDADE

Dada uma matriz X de posto completo mas que tem um autovalor muito pequeno. Neste caso, o lugar geométrico L_x discutido na seção anterior de fato não existe, mas todos os pontos da matriz estarão muito próximos dele. Neste caso o hiper-plano estimado não rotaciona livremente em torno deste lugar geométrico, e as estimativas de $\hat{y}$ podem ser obtidas para qualquer ponto futuro x .

No entanto, pela escolha dos pontos da matriz X , a exata posição deste hiper-plano é pobremente conhecida, exceto nas vizinhanças de sua intersecção com a projeção do lugar geométrico L_x .

Considere, então um "novo" ponto x ($1 \times p$). Sua representação através da DVS será.

$$x = u S V'$$

onde x e u são vetores com p elementos. Da expressão acima pode-se derivar

$$u = x V S^{-1}$$

uma vez que $V^{-1} = V'$.

Esta relação voltará a ser discutida abaixo.

Antes, no entanto, será estudada a predição de $\hat{y}$ para o ponto x . Expressando este ponto em coordenadas da DVS, tem-se:

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

e conseqüentemente,

$$\text{var}(\hat{y}) = \sigma^2 \sum_j u_j^2$$

Esta equação mostra que um componente grande do vetor u pode fazer com que a variância cresça substancialmente.

Será investigado agora em que circunstâncias o vetor u pode ter grandes componentes.

Da relação básica $X = USV'$ obtém-se:

$$US = XV$$

S pode ser particionado em dois grupos, S_A e S_B , de tal forma que o segundo grupo contenha todos os valores singulares considerados bem menores que os outros.

Neste caso, S_B conterà, por exemplo, 1 valores. Assim S_A é uma matriz diagonal com $p - 1$ valores. Seja $p - 1 = t$.

Então S_A é uma matriz, quadrada, diagonal com dimensão $t \times t$ e S_B diagonal 1×1 . Particionando S e V em $US = XV$, obtém-se:

$$U \begin{pmatrix} S_A & 0 \\ 0 & S_B \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} V_A & V_B \end{pmatrix}$$

onde V_A é pxt e V_B é pxl. Esta equação pode ser escrita como:

$$\left[U \begin{pmatrix} S_A \\ 0 \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} 0 \\ S_B \end{pmatrix} \right] = (XV_A \quad XV_B)$$

Agora, que todos os valores singulares do grupo B são pequenos, as colunas representadas por $U \begin{pmatrix} 0 \\ S_B \end{pmatrix}$ contém elementos que são muito pequenos. O mesmo é necessariamente verdade para todos os elementos de XV_B . Então este fato implica que:

$$XV_B \cong 0$$

onde $\cong$ representa aproximadamente igual. Esta equação é a *condição* imposta à matriz X pela grandeza dos valores singulares do grupo B, e representa uma ou mais relações lineares entre as colunas de X .

Retornando agora ao problema de prever y para um novo ponto x , a equação $u = xVS^{-1}$ pode ser reescrita como:

$$u = (xV_A \quad xV_B^{-1})S^{-1} = (xV_A \quad xV_B^{-1}) \begin{pmatrix} S_A^{-1} & 0 \\ 0 & S_B^{-1} \end{pmatrix}$$

Os últimos l elementos de u provêm do

produto

$$(xV_B)(S_B^{-1})$$

Como cada valor singular em S_B é muito pequeno e consequentemente os seus recíprocos muito grandes, estes elementos de u serão muito grandes, causando uma variância para $\hat{y}$ muito grande, a menos que $XV_B \cong 0$, ou seja, a menos que o novo ponto x satisfaça a condição de quase-colinearidade da matriz X . Quanto mais longe estiver o ponto x da equação da condição de multicolinearidade, maior será a variância de y , isto é, mais pobre será a precisão do valor predito. Este é o coração do problema de colinearidade, quando visto do ponto de vista da utilidade da regressão estimada para propósitos de previsão.

Uma importante observação deve ser feita neste ponto. Se os valores singulares no grupo B são muito pequenos, a correspondente porção da matriz V , V_B , é conhecida com precisão numérica muito pequena e $XV_B \cong 0$ pode então conter erros de arredondamento muito grandes. Neste caso, é melhor agir como se estes valores fossem exatamente iguais a zero, e expressar a condição de quase-colinearidade através de $x_B - x_A Z_A^{-1} Z_B = 0$.

3.5.2. DIAGNÓSTICO

3.5.2.1.0 NÚMERO DE CONDIÇÃO

O número de condição é uma medida de

sensibilidade do vetor solução x do sistema linear $Ax = b$ para pequenas mudanças de b e de A . Seguindo o procedimento de FORSYTHE E MOLER (1967) esta seção será dividida em duas partes, sendo que na primeira parte será suposto que o vetor b esteja sujeito à incerteza e na segunda parte será suposto que a matriz A esteja sujeita à incerteza e assim será visto o efeito desta incerteza, em b e em A no vetor de solução x .

(i) Supondo que o vetor b esteja sujeito a uma incerteza. Seja $b + \delta b$ um vetor "próximo" de b e que $A(x + \delta x) = b + \delta b$. Como $Ax = b$, tem-se que $\delta x = A^{-1}\delta b$ e portanto:

$$\| \delta x \| \leq \| A^{-1} \| \| \delta b \|$$

e

$$\| b \| \leq \| A \| \| x \|$$

assim,

$$\| \delta x \| \| b \| \leq \| A \| \| A^{-1} \| \| x \| \| \delta b \|$$

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \| A \| \| A^{-1} \| \frac{\| \delta b \|}{\| b \|}$$

Define-se como número de condição de uma matriz não singular A o número $\|A\| \|A^{-1}\| = k(A)$, então:

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq k(A) \frac{\| \delta b \|}{\| b \|} \quad (3.5.2.1.1)$$

onde $\frac{|| \delta b ||}{|| b ||}$ pode ser interpretado como a medida de incerteza relativa no vetor b e $\frac{|| \delta x ||}{|| x ||}$ pode ser interpretado como a medida de incerteza relativa no vetor x devido à incerteza em b . A equação (3.5.2.1.1) mostra que o número de condição $k(A)$ fornece um limite para a medida de incerteza relativa no vetor de solução x ($|| \delta x || / || x ||$) dada a medida de incerteza de b .

(ii) Supondo que a matriz A esteja sujeita à incerteza. Então:

$$x + \delta x = (A + \delta A)^{-1} b$$

e

$$\begin{aligned} \delta x &= (A + \delta A)^{-1} b - A^{-1} b = [(A + \delta A)^{-1} - A^{-1}] b = \\ &= [A^{-1} A (A + \delta A)^{-1} - A^{-1} (A + \delta A) (A + \delta A)^{-1}] b = \\ &= [A^{-1} (A (A + \delta A)^{-1} - (A + \delta A) (A + \delta A)^{-1})] b = \\ &= -A^{-1} \delta A (A + \delta A)^{-1} b = \\ &= -A^{-1} \delta A (x + \delta x) \end{aligned}$$

e portanto,

$$|| \delta x || \leq || A^{-1} || || A || \frac{|| \delta A ||}{|| A ||} || x + \delta x ||$$

$$\frac{|| \delta x ||}{|| x + \delta x ||} \leq k(A) \frac{|| A ||}{|| \delta A ||}$$

e a incerteza de x em relação à $x + \delta x$ é limitada pela incerteza relativa de A multiplicada pelo número de condição de A .

Assim o número de condição depende da norma usada, e no caso da norma definida por $||| A ||| = \max_{||x||=1} || Ax ||$

$$||| A ||| = ||| USV' ||| = || S || = (s_{\max}^2)^{1/2} = s_{\max}$$

e

$$||| A^{-1} ||| = ||| VS^{-1}U' ||| = || S^{-1} || = (s_{\min}^{-2})^{1/2} = s_{\min}$$

e portanto, o número de condição $k(A)$ será dado por:

$$k(A) = \frac{s_{\max}}{s_{\min}} \geq 1 \quad (3.5.2.1.2)$$

e assim, se a matriz $X'X$ é singular, o valor de $s_{\min}^2 = 0$ e $k(X) \rightarrow \infty$. E se as variáveis preditoras $X = [x_1 \dots x_p]$ vistas como vetores forem ortonormais, ou seja, $X'X = I$, então todos os auto-valores de $X'X$ serão iguais a um e $k(X) = 1$. Então, a variação do número de condição é de $[1, \infty)$, observando-se que quanto maior for o número de condição $k(X)$, mais a matriz X será mal condicionada.

3.5.2.2. DECOMPOSIÇÃO DA VARIÂNCIA DO COEFICIENTE DE REGRESSÃO

Cada beta estimado pode ser decomposto em elementos da matriz de auto-vetores ortonormais de $X'X$ e de auto-valores de $X'X$ para uma melhor visão e compreensão sobre a magnitude desta variância.

Cosiderando o modelo de regressão

$$y = X\beta + \varepsilon$$

Seja $\hat{\beta}$ o estimador de mínimos quadrados de β . Então $VC(\hat{\beta}) = \sigma^2(X'X)^{-1}$. Usando a decomposição em valores singulares da matriz X , obtém-se:

$$VC(\hat{\beta}) = \sigma^2(X'X)^{-1} = \sigma^2(V' S' U' U' S^{-1} V) = \sigma^2 V' S^{-2} V$$

e portanto o k -ésimo componente de $\hat{\beta}$ será:

$$VC(\hat{\beta}_k) = \sigma^2 \sum_j \frac{v_{kj}^2}{s_j^2} \quad (3.5.2.2.1)$$

ou seja, $VC(\hat{\beta}_k)$ se decompõe em soma de componentes, onde cada componente é associado a um dos p autovalores de $X'X$. Na equação (3.5.2.2.1) mesmo que a matriz $X'X$ tenha um autovalor pequeno em relação ao maior autovalor, o que implica em um valor grande para o número de condição da matriz, não necessariamente o valor de $VC(\hat{\beta}_k)$ será grande, pois se o valor de v_{kj}^2 for pequeno ou próximo de s_j^2 esta

variância não será afetada.

-Define-se (BELSLEY, KUH E WELSCH, 1980) π_{kj} a k,j -ésima proporção da decomposição da variância (π_{kj}) como a proporção da variância do k -ésimo componente da sua decomposição em (3.5.2.2.1). Ou seja:

$$\pi_{kj} = \frac{\phi_{kj}}{\phi_k}, \quad k = 1, \dots, p$$

$$\text{onde } \phi_{kj} = \frac{v_{kj}^2}{s_j^2} \quad \text{e} \quad \phi_k = \sum_{j=1}^p \phi_{kj}, \quad k = 1, \dots, p$$

Então, a proporção da decomposição da variância será:

$$\pi_{jk} = \frac{\phi_{kj}}{\phi_k} \quad k, j = 1, \dots, p$$

Para se ter padrões de comparação de altas proporções da decomposição da variância, a tabela abaixo sumariza os resultados encontrados.

Valor singular Associado	Proporção da			
	$\text{var}(\hat{\beta}_1)$	$\text{var}(\hat{\beta}_2)$	...	$\text{var}(\hat{\beta}_p)$
S_1	π_{11}	π_{12}	...	π_{1p}
S_2	π_{21}	π_{22}	...	π_{2p}
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.

$$S_p \quad \Pi_{p1} \quad \Pi_{p2} \quad \dots \quad \Pi_{pp}$$

Π_{jk} usa as informações da DVS para quase - dependência de uma forma que é diretamente aplicável para examinar seus efeitos nas estimativas da regressão.

A concentração da variância de qualquer coeficiente de regressão poderá ser associada a problemas de colinearidade se pelo menos duas das variâncias do coeficiente de regressão tenham alta proporção na decomposição da variância associada com um dos s_i , e que este esteja associado a um número de condição elevado. BELSLEY, KUH E WELSCH (1980) sugerem que este valor esteja pelo menos entre 30 e 100. MONTEGOMERY E PECK (1982) sugerem que este número possa ser em torno de 10.

3.6. ESTIMAÇÃO VICIADA

No caso de quase-colinearidade, foi verificado que a variância de $\hat{y}$ cresce drasticamente quando os pontos x estão apreciavelmente removidos do subespaço de X no qual os ponto da matriz de delineamento estão (o subespaço definido pela condição de colinearidade).

Esta condição propicia estimativas mais precisas sacrificando a condição de não tendenciosidade do estimador de $\hat{y}$. Este procedimento é conhecido como "estimação viciada". Será analisado em detalhes somente um

dos métodos de estimação viciada que está associado diretamente com a técnica de regressão por componentes principais. A discussão no entanto servirá para revelar a natureza básica do problema e propor uma solução.

3.6.1. AVALIAÇÃO DO ERRO NA ESTIMAÇÃO VICIADA

Seja X uma matriz mal condicionada, ou seja, X é uma matriz com quase-colinearidade em algumas de suas colunas.

Então se x satisfaz a condição $xV_B = 0$, a estimativa de y correspondente a este ponto é dada pelos t primeiros termos de $\hat{y} = \sum_j u_j \hat{\alpha}_j$ onde

$$u = xVS^{-1}$$

Enquanto esta estimativa de y produz a correta solução de mínimos quadrados para pontos satisfazendo $xV_B = 0$, ela não é a solução de mínimos quadrados par pontos x que não satisfaçam esta condição, isto é, para pontos que não estão no subespaço definido pela condição de colinearidade.

Será denotada por $\hat{y}$, a expressão

$$\hat{y} = \sum_{j=1}^t u_j \hat{\alpha}_j$$

sem haver a preocupação de que a condição $xV_B = 0$ seja satisfeita ou não. A equação acima é freqüentemente chamada de "equação de predição viciada de componentes principais". A razão de considerar tal equação uma estimativa é pela redução da variância que a acompanha. Tem-se.

$$\text{var}(\hat{y}) = \text{var}\left(\sum_{j=1}^p u_j \hat{\alpha}_j\right) = \sigma^2 \sum_{j=1}^p u_j^2$$

$$\text{var}(\tilde{y}) = \text{var}\left(\sum_{j=1}^t u_j \hat{\alpha}_j\right) = \sigma^2 \sum_{j=1}^t u_j^2$$

Considerando que $p = t + 1$, e que os últimos 1 valores acarretarão em grande aumento da variância das estimativas, deseja-se avaliar qual é o estimador preferível.

O estimador $\hat{y}$ é não viciado, enquanto o estimador $\tilde{y}$ é um estimador viciado. Tem-se:

$$E(\hat{y}) = y, \text{ e } E(\tilde{y}) = E(y) + \sum_{j=t+1}^p u_j \alpha_j$$

então:

$$\text{Vício}(\tilde{y}) = E(\tilde{y}) - E(y) = - \sum_{j=t+1}^p u_j \alpha_j$$

Denotando por EMQ o erro médio quadrático, definido por $\text{EMQ} = \text{Variância} + (\text{vício})^2$, tem-se.

$$\text{EMQ}(\hat{y}) = \sigma^2 \sum_{j=1}^p u_j^2$$

$$EMQ(\tilde{y}) = \sigma^2 \sum_{j=1}^t u_j^2 + \left(- \sum_{j=t+1}^p u_j \alpha_j \right)^2$$

Usando $\tilde{y}$ no lugar de $\hat{y}$, se "negocia" a redução da variância pela introdução do (vício)².

Examinando o caso onde $t = p - 1$. Então a redução na variância será $\sigma^2 u_p^2$ e o (vício)² = $u_p^2 \alpha_p^2$. Então $\tilde{y}$ terá menor EMQ que $\hat{y}$ se e somente se o (vício)² for menor que a redução da variância, ou seja se

$$u_p^2 \alpha_p^2 < \sigma^2 u_p^2 \quad \text{ou} \quad \alpha_p^2 < \sigma^2$$

Infelizmente, α_p e σ^2 são parâmetros desconhecidos, para os quais somente estimativas são disponíveis. A estimativa para α_p é $\hat{\alpha}_p$, e a estimativa para σ^2 e a variância residual após o ajuste dos $\hat{\alpha}_p$. Tem-se da teoria de mínimos quadrados que:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - p}$$

que, quando se utiliza os estimadores $\hat{\alpha}$, resulta:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - p} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i^2}{N - p}$$

Se $\hat{\alpha}_p$ é de mesma ordem de magnitude que σ

então a escolha é de difícil decisão, no entanto, se a magnitude destas medidas forem diferentes o método auxilia na escolha do estimador a ser utilizado. No caso de mesma magnitude das medidas outras suposições devem ser feitas, como por exemplo que $\alpha_p = 0$, e neste caso deve-se utilizar o estimador viciado. Por outro lado a hipótese $\alpha_p = 0$ pode ser testada na análise de regressão por componentes principais através do teste "t" de Student, tomando-se:

$$t = \frac{\hat{\alpha}_p - \alpha_p}{S_{\hat{\alpha}_p}} = \frac{\hat{\alpha}_p}{\hat{\sigma}}$$

Mas ainda que a hipótese não possa ser rejeitada não significa que a escolha do estimador viciado seja a mais apropriada.

3.7 UM EXEMPLO

3.7.1. DELIMITAÇÃO DO PROBLEMA

A ocorrência de mal condicionamento da matriz de regressão é comum em trabalhos não experimentais na área biomédica. O pesquisador aponta no prontuário dos pacientes todas as informações que possam de alguma forma auxiliá-lo na construção de experiência pessoal para determinar futuros prognósticos, e muitas vezes duas ou mais variáveis explicam o mesmo fenômeno, podendo acarretar em multicolinearidade.

O presente conjunto de dados são provenientes dos exames clínicos, antropométricos e laboratoriais realizados em 311 gestantes com idades superiores a 20 anos e com idade gestacional entre 21 e 28 semanas. As pacientes foram acompanhadas no pré-natal geral do Hospital Escola da UFPR e foram submetidas ao teste de tolerância à glicose (TTG) com 75 gramas de glicose como preconizado pela Organização Mundial de Saúde para o diagnóstico de diabetes gestacional.

Os pesquisadores desejavam avaliar fatores associados à glicemia de 2 horas, principal exame diagnóstico da diabetes gestacional, como (a) a idade da gestante, (b) o número de gestações anteriores, (c) o índice de massa corporal, definido como o peso pré-gravídico dividido pelo quadrado da altura, (d) a soma

das pregas cutâneas, que é o resultado do somatório das medidas das pregas cutâneas tricipital, bicipital, subescapular e supra-iliaca e (e) a relação cintura-quadril, que é a razão entre a circunferência da cintura dividida pela circunferência do quadril.

A somatória das pregas é uma medida do grau de obesidade das pacientes, enquanto o índice de massa corporal (IMC) e a razão cintura-quadril são medidas da distribuição da gordura corporal. Verificou-se que estas duas últimas medidas eram correlacionadas por medirem a mesma variável de interesse. Portanto, elas poderiam ser úteis na ilustração de um problema de multicolinearidade. Selecionou-se então, para o presente estudo, 60 pacientes que tinham maior grau de correlação destas medidas, a fim de evidenciar o problema. Assim, o presente conjunto de dados deve ser compreendido como dados simulados de um problema real, cujos resultados não tem validade clínica.

Os dados estão apresentados no apêndice I. Todos os cálculos foram realizados no "software" MATLAB.

3.7.2. O ESTUDO DA MULTICOLINEARIDADE

A matriz $X_{60 \times 6}$ foi decomposta em valores singulares nas matrizes $U_{60 \times 60}$, $S_{60 \times 6}$ e $V'_{6 \times 6}$. Para efeito do presente estudo tomou-se a seguinte decomposição:

$$X_{60 \times 6} = U_{60 \times 6} S_{6 \times 6} V_1'_{6 \times 6}$$

Por simplicidade estas matrizes serão denominadas simplesmente U, S e V. A matriz U de autovetores ortonormais está apresentada no apêndice 2. As matrizes S e V são as que seguem:

$$S = \begin{bmatrix} 491.1573 & & & & & \\ & 87.1287 & & & & \\ & & 19.0033 & & & \\ & & & 10.3767 & & \\ & \phi & & & 0.4508 & \\ & & & & & .1327 \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} .0155 & -.0178 & .0297 & -.0013 & .9965 & -.0739 \\ .3972 & -.7150 & -.5462 & -.1808 & -.0029 & .0000 \\ .0223 & -.0750 & -.2081 & .9750 & .0058 & -.0000 \\ .3408 & -.4602 & .8077 & .1294 & -.0400 & -.0354 \\ .8516 & .5203 & -.0641 & .0069 & -.0020 & .0002 \\ .0131 & -.0177 & .0309 & .0045 & .0725 & .9986 \end{bmatrix}$$

A DVS da matriz X fornece em primeira análise o número de condição. Quanto maior for o número de condição mais mal condicionada será a matriz. Para o exemplo em questão:

$$\eta = \frac{s_{\max}}{s_{\min}} = \frac{491.1573}{0.1327} = 3.701,26 = 3,7 \times 10^3$$

Se houvesse exata dependência linear entre

colunas de X haveria pelo menos um valor singular igual a zero. O grau de mal condicionamento depende, no entanto, de quanto é pequeno o menor valor singular em relação ao maior. E ainda, determinar o que pode ser considerado um número de condição grande, que degrade as estimativas da regressão depende da experiência empírica do pesquisador.

Pode-se, ainda, definir-se números de condição intermediários:

$$\eta = \frac{s_{\max}}{s_k}$$

onde k indica o k-ésimo valor singular da matriz.

E assim, se mais do que um número de condição for considerado alto, haverá então, mais do que uma dependência linear ou de uma "quase" dependência linear.

Uma forma de complementar esta informação, como indicativo de quase dependência é através da observação de como a variância estimada de cada coeficiente de regressão pode ser decomposto em uma soma de termos cada um associado com um valor singular, fornecendo significado para a determinação de qual quase dependência degrada cada variância.

A variância do estimador K é dada por:

$$\text{Var}(\hat{\beta}_k) = \sigma^2 \sum_j \frac{v_{kj}^2}{s_j^2}$$

A k_{ij} -ésima proporção da decomposição da variância é a proporção da variância do k - ésimo coeficiente de regressão associado com o j - ésimo componente de sua decomposição. Esta proporção é calculada como segue:

$$\phi_{kj} = \frac{v_{kj}^2}{s_j^2} \quad e \quad \phi_k = \sum_{j=1}^p \phi_{kj}$$

Então, as proporções da decomposição da variância são dadas por:

$$\pi_{jk} = \frac{\phi_{kj}}{\phi_k}, \quad k, j = 1, \dots, p$$

As proporções da decomposição da variância para o exemplo são dadas abaixo:

V.Singular associado	Proporções das variâncias de						Número de Condição
	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\beta}_5$	$\hat{\beta}_6$	
s_1	.00	.00	.00	.00	.03	.00	1.00
s_2	.00	.09	.00	.00	.62	.00	7.32
s_3	.00	.64	.01	.02	.12	.00	25.85
s_4	.00	.24	.97	.00	.00	.00	47.33
s_5	.94	.03	.02	.10	.20	.00	1089.52
s_6	.06	.00	.00	.88	.02	1.00	3701.26

Esperava-se que o menor valor singular s_0 associado com a dependência linear entre X_4 e X_0 deva dominar várias variâncias, pelo menos aquelas das duas variáveis envolvidas. E este é o caso, o componente associado com s_0 é responsável por virtualmente toda variância de $\hat{\beta}_0$ e grande parte de $\hat{\beta}_4$.

A ortogonalidade das outras quatro colunas de X , para as duas variáveis envolvidas na quase dependência, isolaram seus coeficientes estimados do efeito da colinearidade. Observa-se, que os componentes dessas quatro variâncias associados com s_0 são bastante pequenos, 0.06, 0.00, 0.00 e 0.02. Em teoria esses componentes deveriam ser iguais a zero.

A análise ajuda a determinar quais estimadores da regressão são degradados pela presença de colinearidade, mas também, quais não são afetados adversamente.

Em síntese, a detecção de multicolinearidade pode ser avaliada através da verificação da dupla condição:

- 1*) um valor singular que se julga ter alto número de condição, o qual é associado com
- 2*) altas proporções da decomposição da variância para dois ou mais coeficientes das variâncias de regressão.

Foi visto que um valor singular igual a zero implica em colinearidade perfeita entre colunas de X . Neste exemplo, a condição de colinearidade não é definida

exatamente. Aqui o hiper-plano a ser determinado pelo modelo de regressão, não rotaciona livremente em torno do lugar geométrico descritor da condição de colinearidade e a estimativa de $\hat{y}$, pode ser determinada para qualquer novo ponto x . No entanto, a exata posição do hiperplano é conhecida de forma pobre, exceto na exata vizinhança da intersecção do hiperplano com a projeção vertical do lugar geométrico determinado pela condição de multicolinearidade.

O novo ponto pode ser expresso pela sua DVS

$$x = u S V'$$

onde x e u são vetores de p elementos. Da equação acima deriva-se,

$$u = x V S^{-1}, \text{ e então}$$

$$\hat{y} = u \hat{\alpha} \Rightarrow \text{Var}(\hat{y}) = \sigma^2 \sum_{j=1}^p u_j^2$$

Esta equação mostra que um grande componente do vetor u pode fazer crescer substancialmente a variância de $\hat{y}$.

Investigar-se-á agora sob quais circunstâncias o vetor u pode ter grandes componentes.

De $X = USV'$ obtém-se $US = XV$, e S será dividida em duas sub-matrizes, S_A e S_B , S_B o autovalor considerado menor que os outros.

Apesar de S_B ser pequeno e próximo de s_0 , ele pertencerá à matriz S_A por não ter apresentado problema na

análise da matriz da decomposição da proporção das variâncias.

$S_A = \text{diag} (491,1573 \ 67.1267 \ 19.0033 \ 0.37676 \ 0.4508)$ e

$S_B = 0.1327$

A equação $US = XV$ pode ser decomposta em

$$\left[U \begin{bmatrix} S_A \\ 0 \end{bmatrix} \quad U \begin{bmatrix} 0 \\ S_B \end{bmatrix} \right] = \begin{bmatrix} XV_A & XV_B \end{bmatrix}$$

os valores pequenos em XV_B implicam que $XV_B \cong 0$.

Esta é a condição imposta à matriz X , que representa uma relação linear entre as colunas de X .

$$XV_B = X \begin{bmatrix} -.0739 \\ .0000 \\ -.0000 \\ -.0354 \\ .0002 \\ .9966 \end{bmatrix} \cong 0$$

$$-.0739 - 0.0354 x_4 + .0002 x_5 + .9966 x_6 \cong 0$$

Esta é a equação do hiper-plano em torno do qual se define a multicolinearidade.

Retornando ao problema de predição para um novo ponto, então

$u = (x \ V_A \ x \ V_B) S^{-1}$ onde o último elemento de u provém do produto $x \ V_B \ S_B^{-1}$.

Como s_e é muito pequeno, o seu recíproco s_e^{-1} é muito grande, ocasionando inflação na variância de $\hat{y}$, porque o valor de u também será muito grande, a menos de pontos de x que satisfaçam a condição de quase-colinearidade da matriz X .

O problema central da multicolinearidade, quando visto do ponto de vista da predição é observar que quanto mais longe o novo ponto estiver da condição de multicolinearidade, maior será a variância de $\hat{y}$, ou seja, pior será a precisão do valor predito.

Para o exemplo em questão

$$\hat{y} = u \hat{\alpha} = x (V_A)(S_A^{-1})(\hat{\alpha})$$

$$\hat{y} = x \begin{bmatrix} 170.4759 \\ 2.3887 \\ -1.6278 \\ 1.2610 \\ .8305 \\ -212.3061 \end{bmatrix}$$

No caso de "quase-colinearidade" a variância de $\hat{y}$ cresce drasticamente para pontos fora do sub-espço de X definido pela condição de multicolinearidade. Pode-se então, pensar na obtenção de estimadores mais precisos com o sacrifício da condição de não-vício do estimador $\hat{y}$, o que é conhecido como estimação viciada. O método diretamente

associado com a DVS é a técnica de regressão por componentes principais.

Seja $\tilde{y} = \sum_{j=1}^{p-1} u_j \hat{\alpha}_j$ o estimador viciado de y sem a

preocupação se a condição $xV_B = 0$ é satisfeita ou não. Esta equação é chamada de "equação de predição viciada por componentes principais".

A razão para considerar tal estimativa é a redução da variância da estimativa que a acompanha.

Tem-se,

$$\text{Var}(\hat{y}) = \text{Var}\left(\sum_{j=1}^p u_j \hat{\alpha}_j\right) = \sigma^2 \sum_{j=1}^p u_j^2$$

e,

$$\text{Var}(\tilde{y}) = \text{Var}\left(\sum_{j=1}^{p-1} u_j \hat{\alpha}_j\right) = \sigma^2 \sum_{j=1}^{p-1} u_j^2$$

e seja o novo ponto $x = (1 \ 40 \ 1 \ 20 \ 70 \ 1)$ distante da condição de colinearidade.

Para este ponto

$$\begin{aligned} u &= x (V S^{-1}) = \\ &= (.1336 \quad -.0523 \quad -.0785 \quad -.1018 \quad -.1328 \quad -.6028) \end{aligned}$$

As variância das estimativas são

$$\text{Var}(\hat{y}) = 3.3810 \sigma^2 \text{ e } \text{Var}(\tilde{y}) = 0.4160 \sigma^2$$

Observa-se então que a variância do estimador viciado é cerca de oito vezes menor que a variância do estimador não viciado. A forma de decisão de qual estimador é melhor, deve ser feita através da avaliação dos erros médios quadráticos das estimativas. Para tanto conforme MANDEL (1982), basta comparar o valor de $\hat{\alpha}_\sigma^2$ com o valor de $\hat{\sigma}$.

Para o exemplo $\hat{\alpha}_\sigma^2 = 884,8662$ enquanto $\hat{\sigma} = 5.6961$, o que implica que $\hat{y}$ tem menor erro médio quadrático que $\tilde{y}$, apesar de ter maior variância. Isto significa que o vício para esta estimativa é muito grande o que não recomenda o uso do estimador viciado.

4. CONCLUSÕES

Dentro dos objetivos do presente estudo, as conclusões são apresentadas com base na revisão de literatura realizada e na aplicação das técnicas ao problema real proposto, considerando suas limitações:

a) A decomposição em valores singulares da matriz do modelo propicia algoritmos estáveis para a leitura de um problema em modelos lineares e além disso, auxilia a compreender toda a natureza do problema.

b) A avaliação de um problema do particular modelo de regressão com mal-condicionamento da matriz do modelo deve ser feita através da avaliação da origem do problema, das suas conseqüências, das formas de diagnóstico e da análise das possíveis soluções de contorno.

c) O problema de mal-condicionamento da matriz é essencialmente um problema numérico, e daí a necessidade de algoritmos estáveis para seu estudo.

d) A detecção do problema de mal-condicionamento da matriz X é fundamental para o estudo

da regressão, mas mais importante é a avaliação da extensão do problema e de suas conseqüências.

e) A análise por componentes principais pode sugerir a utilização de um estimador viciado, por ter menor variância que um estimador não viciado. "Negociar" o vício com a inflação da variância é o ponto central na escolha do melhor estimador.

f) A análise por componentes principais não elimina completamente o problema da seleção de variáveis explicativas e portanto do modelo a ser utilizado.

g) O número de condição associado à decomposição das proporções das variâncias, são formas importantes para o diagnóstico da multicolinearidade.

h) A presença de multicolinearidade pode não ser importante na estimação de novas observações que estejam próximas à condição de colinearidade.

i) A avaliação da estimabilidade se dá no espaço linha da matriz de delineamento, e se pode pensar em quase-estimabilidade, quando λ estiver próximo deste espaço.

j) Mesmo se o número de condição for grande, por exemplo, na ordem de 10^3 , isto não implica necessariamente em problemas para a estimação.

h) Ainda que a proporção da variância de um coeficiente, associado a um valor singular pequeno,

domine a variância daquele coeficiente, como em $\hat{\beta}_1$ e s_5 , a variância do estimador pode não ser grande e o problema de multicolinearidade pode não ser importante.

i) As variáveis IMC e relação cintura-quadril são variáveis que explicam a distribuição da gordura corporal. A colinearidade entre elas indica a fidedignidade das medidas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AOKI, R. Uma possível solução para o problema de mal condicionamento da matriz do modelo de regressão. Campinas, 1992. 85 p. (Mestrado - Instituto de Matemática, Estatística e Ciências da Computação/ UNICAMP).

BELSLEY, D. A. ; KUH, E. ; WELSCH, R. E. Regression diagnostics: Identifying influential data and sources off collinearity. New York, John Wiley & Sons, 1980. 292p.

BEN-ISRAEL, A. & GREVILLE, T. N. E. Generalized inverses : theory and applications. New York, John Wiley & Sons, 1974.

CARVALHO, J. F. Modelos lineares e sua avaliação. São Carlos, 1982. 95p. (Livre Docência - Universidade de São Paulo).

CARVALHO FILHO, A.A. A decomposição da matriz de planejamento por valores singulares em modelos de posto incompleto. Piracicaba, 1987. 116p. (Doutorado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP).

CARVALHO FILHO, A.A. & IEMMA, A.F. A aplicação da decomposição pelo valor singular no estudo da estimabilidade de funções lineares em modelos de Gauss-Markov. Revista de Matemática e Estatística, São Paulo, 8: 37-44, 1990.

CHATTERJEE, S. & PRICE, B. Regression analysis by example. New York, John Wiley & Sons, 1977. 228 p.

CHURCHILL, G.A. A regression estimation method for collinear predictors. Decision Sciences, 6: 671-87, 1975.

DRAPPER, N.R. & SMITH, H. Applied regression analysis, 2 ed., New York, John Wiley & Sons, 1981. 710 p.

DRYGAS, H. The coordinate-free approach to Gauss-Markov estimation. Springer-Verlag. Berlin, 1970. 113 p.

ECKART, C. & YOUNG, G. The approximation of a matrix by another of lower rank. Psychometrika, 1: 211-18. 1936.

EUBANK, R.L. & WEBSTER, J.T. The singular-value decomposition as a tool for solving estimability problems. The American Statistician, Alexandria, 39(1):64-66. 1985.

FARRAR, D.E. & GLAUBER, R.R. Multicollinearity in regression analysis: the problem revisited. Review of Economics Statistics, 49:92-107, 1967.

FERRARI, F. Estimadores viesados para modelos de regressão em presença de multicolinearidade. Piracicaba, 1989. 127p. (Doutorado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz" / USP)

FERRARI, F. & IEMMA, A.F. Um critério para a seleção de variáveis na regressão em componentes principais. Revista de Matemática e Estatística, São Paulo, 8:101-113, 1990.

FORSYTHE, G. & MOLER, C.B. Computer solution of linear algebraic systems. Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1967.

FOX, J. Linear statistical models and related methods with applications to social research. New York, John Wiley & Sons 1984. 449 p.

GOLUB, G.H. Matrix decompositions and statistical calculations. - In: Statistical computation. R.C. Milton, et alii. Eds Academic Press, New York. 1969.

GOLUB, G.H. & REINSCH, C. Singular value decomposition and least squares solutions. Numeric Mathematics, Stantfort, 14: 403-20, 1970.

GOOD, I.J. Some applications of the singular decomposition of a matrix. Technometrics, Richmond, 11(4): 823:31, 1969.

GRAYBILL, F.A. Introduction to matrices with application in statistics. Belmont, Wadsworth Publishing Company, 1983. 372 p.

GREENBERG, E. Minimum variance properties of principal components regression. Journal of the American Statistical Association, Whashington, 70(349): 194-7, 1975.

GUNST, R.F. & MASON, R.L. Advantages of examining multicollinearities in regression analysis. Biometrics, Raleigh, 33: 249-60, 1977a.

GUNST, R.F. & MASON, R.L. Biased estimation in regression:

- An evaluation using mean squared error. Journal of the American Statistical Association, Washington, 72(359): 616-28, 1977b.
- HALMOS, P.R. Espaços vetoriais de dimensão finita. Rio de Janeiro, Editora Campus, 1978. 199 p.
- HAWKINS, D.M. On the investigation of alternative regression by principal component analysis. Applied Statistics, London, 22:275-86, 1973.
- HOCKING, R.R.; SPEED, F.M. ; LYNN, M.J. A class of biased estimators in linear regression. Technometrics, Richmond, 18(4):425-37, 1976.
- HOERL, A.E. & KENNARD, R.W. Ridge regression: Biased estimation for nonorthogonal problems. Technometrics, Richmond, 12(1):55-68, 1970a.
- HOERL, A.E. & KENNARD, R.W. Ridge regression: Applications to nonorthogonal problems. Technometrics, Richmond, 12(1):69-82, 1970b.
- IEMMA, A.F. Modelos lineares. Uma introdução para profissionais da pesquisa agropecuária. 2º Simpósio de Estatística Aplicada à Experimentação Agronômica e 32ª

Reunião da Sociedade Brasileira de Biometria. Londrina
1987, 263 p.

IEMMA, A.F. & CARVALHO FILHO, A.A. O uso da DVS na
estimabilidade no modelo linear de Gauss-Markov. Atas
da 1ª Escola de Modelos Lineares. São Paulo, 1989.
p.66-74.

JAMES, W & STEIN, C. Estimation with quadratic loss. In:
Neyman, J. Proceedings of the fourth Berkeley Symposium
vol.1. Berkeley, University of California Press, 361-79.
1961.

KENDALL, M.G. A course in multivariate analysis. London.
Griffin, 1957.

LANCASTER, P. & JOHNSON, C.R. The theory of matrices,
New York, Academic Press, 1985.

LAWSON, C.L. & HANSON, R.J. Solving Least Square Problems,
Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1974. 340p.

LIMA FILHO, E.C. Planejamento de observações adicionais em
modelos lineares: a decomposição em valores singulares
da matriz de planejamento e sua utilização. São Carlos,
1981. 60p. (Livre-docência - Universidade de São Paulo).

MANDEL, J. Use of the singular value decomposition in regression analysis. The American Statistician, Alexandria, 36(1):15-24, 1982.

MARQUARDT, D.W. Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation and nonlinear estimation. Technometrics, Richmond, 12(3):591-612, 1970.

MARQUARDT, D.W. & SNEE, R.D. Ridge regression in practice. The American Statistician. Alexandria, 29: 3-20, 1975.

MARTENS, H. & NAES, T. Multivariate calibration, New York, John Wiley & Sons, 1989. 419 p.

MASON, R.L.; GUNST, R.F. & WEBSTER, J.T. Regression Analysis and problems of multicollinearity. Communications in Statistics. New York, A3:277-92, 1975.

MATLAB- 386 Based MS-DOS Personal Computers. The Mathworks Inc. Natick. 1990.

MATSUO, T. O uso da regressão de cumeieira em experimentos agronômicos. Piracicaba, 1986. 89p. (Mestrado - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz" / USP).

MAYER, L.S. & WILKE, T.A. On biased estimation in linear models. Technometrics, Richmond, 15: 497-508. 1973.

MONTGOMERY, D.C. & PECK, E.A. Introduction to linear regression analysis, New York, John Wiley & Sons, 1981.
504 p. .

MOTA, R.M.S. Caracterização dos melhores estimadores lineares não tendencioso no modelo linear geral. São Paulo, 1982. 147 p. (Mestrado - Instituto de Matemática e Estatística / USP)

NELDER, J. An alternative interpretation of the singular value decomposition in regression. The american statistician, Alexandria, 39(1):63-4, 1985.

NETER, J.; WASSERMAN, W. ; KUTNER, M.H. Applied linear regression models, Homewood, Richard D. Irwin, 1983.
547 p.

NOBLE, B. Applied linear algebra, Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1969. 523 p.

ORTEGA, J.M. Matrix theory: a second course, New York, Plenum Press, 1987.

PALM, R. & IEMMA, A.F. Quelques alternatives à la régression classique dans le cas de la colinéarité. Revue de Statistique appliquée. Gembloux, 2/94: 27p., 1994.

RAO, C.R. Generalization of Markoff's theorem and tests of linear hypotheses. Sankhyā, 7:9-16, 1945.

RAO, C.R. Linear statistical inference and its applications. New York, John Wiley & Sons, 1965. 522 p.

SEARLE, S.R. Linear models, New York, John Wiley & Sons, 1971. 552 p.

SEARLE, S.R. Matrix algebra useful for statistics, New York, John Wiley & Sons, 1982. 438 p.

SILVEY, S.D. Multicollinearity and imprecise estimation. Journal of the Royal Society, série B. London, 31:539-52, 1969.

SWINDEL, B.F. & BENEE, F. Instability of regression coefficients illustrated. The american statistician. Alexandria, 28(2):63-5, 1974.

VAN LOAN, C. Lectures in least squares. Departament of

Computer Science Cornell University. New York, 1976.

61p.

WEBSTER, J.T.; GUNST, R.F. ; MASON, R.L. Latent root
regression analysis. Technometrics. Richmond,
16(4):513-22, 1974.

6. APÉNDICE 1

MATRIZ XIY

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	Y
1	21	0	22.70	47.0	0.86	108
1	26	0	24.40	81.0	0.93	118
1	33	6	22.70	74.5	0.88	146
1	32	3	22.76	36.5	0.88	110
1	23	2	24.40	47.0	0.92	99
1	23	0	24.70	41.0	0.96	88
1	21	1	21.50	33.0	0.86	87
1	26	0	19.20	49.5	0.75	130
1	22	0	20.00	63.5	0.78	138
1	33	1	24.30	37.0	0.92	115
1	24	3	22.30	43.5	0.88	101
1	22	0	24.80	43.0	0.97	85
1	30	3	25.60	36.0	0.99	83
1	28	0	22.80	34.0	0.86	110
1	21	1	21.64	64.0	0.85	125
1	24	0	22.00	39.0	0.83	113
1	21	3	21.92	54.0	0.83	95
1	33	4	26.00	35.0	0.99	96
1	22	1	22.48	27.0	0.85	92
1	27	2	22.65	50.0	0.85	120
1	40	4	23.55	28.5	0.91	125
1	23	3	20.41	59.5	0.81	123
1	24	0	20.75	49.5	0.78	132
1	25	0	22.08	46.0	0.87	110
1	27	3	21.70	60.5	0.81	130
1	28	2	23.11	32.5	0.89	101
1	22	1	21.28	35.5	0.79	111
1	23	1	21.73	59.5	0.84	125
1	30	0	20.69	38.0	0.80	126
1	21	1	22.30	70.5	0.84	130
1	23	1	21.70	77.5	0.85	120
1	28	1	23.24	40.0	0.88	112
1	25	1	20.94	34.5	0.83	106
1	22	1	22.90	60.0	0.88	115
1	30	0	22.10	67.6	0.82	140
1	28	3	20.10	63.7	0.75	138
1	20	0	21.60	62.0	0.86	115
1	23	1	21.90	60.0	0.87	118
1	27	1	19.50	59.4	0.77	146
1	27	0	21.40	60.5	0.81	144
1	29	1	20.50	59.5	0.81	144
1	22	3	22.20	59.6	0.83	124
1	20	0	20.00	65.0	0.78	135
1	28	1	22.60	80.0	0.86	156
1	25	0	21.60	70.5	0.83	145
1	27	1	22.29	68.0	0.85	143
1	25	5	20.00	41.5	0.80	111

MATRIZ XIY

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	Y
1	23	2	20.40	51.0	0.76	142
1	21	0	20.80	48.0	0.79	120
1	22	1	21.33	47.0	0.82	114
1	31	3	20.96	56.0	0.79	160
1	22	0	21.09	70.0	0.79	146
1	28	3	20.54	46.0	0.81	125
1	22	2	21.62	41.0	0.81	110
1	28	0	20.23	45.0	0.79	133
1	25	1	22.03	72.5	0.84	144
1	30	6	23.19	44.0	0.87	117
1	35	2	24.40	50.0	0.95	124
1	21	1	22.14	53.0	0.84	115
1	26	1	21.22	56.0	0.84	127

X_1 - Vetor de un's

X_2 - Idade da gestante

X_3 - Número de gestações anteriores

X_4 - Índice de Massa Corporal

X_5 - Somatória das Pregas

X_6 - Razão Cintura-quadril

Y - Teste de Tolerância à Glicose (TTG)

7. APÊNDICE 2

MATRIZ U

.1143	-.0155	.2058	-.0509	-.0153	-.0856
.1785	.1831	.0198	-.0941	-.3407	.0327
.1719	.0631	-.2975	.3223	-.1366	.1031
.1051	-.2178	-.1053	.0333	-.0027	.0374
.1172	-.0507	.1987	.1235	-.1439	-.0881
.1069	-.0971	.2537	-.0647	-.1627	.1248
.0892	-.1169	.1910	.0188	.1673	.2181
.1202	-.0254	-.0953	-.1799	.2343	.0265
.1418	.1202	.0065	-.0910	.1308	.0557
.1078	-.2330	-.0483	-.1525	-.1674	-.0717
.1105	-.0752	.0815	.1715	.0584	.1672
.1096	-.0716	.2799	-.0447	-.1726	.1756
.1046	-.2199	.0748	.1033	-.2220	.1049
.0975	-.1915	.0526	-.1801	-.0108	-.1274
.1431	.1224	.0924	.0412	.0134	.1443
.1023	-.1047	.1167	-.1172	.0587	-.1339
.1260	.0407	.1161	.2259	.0561	-.0941
.1057	-.2635	-.0020	.1493	-.2596	-.0025
.0803	-.1808	.2241	.0096	.0992	-.1281
.1244	-.0581	-.0008	.0340	-.0391	-.1421
.0983	-.3716	-.2856	-.0074	-.0708	.0435
.1361	.0724	-.0241	.1759	.1493	.1663
.1197	-.0147	.0281	-.1258	.1144	-.1622
.1153	-.0616	.0678	-.1289	.0200	.1548
.1420	.0287	-.0876	.1230	.0043	-.1755
.0952	-.2075	.0490	.0107	-.0011	.0130
.0942	-.1067	.1444	.0003	.1578	-.2476
.1369	.0656	.0539	.0045	.0112	.0398
.1046	-.1673	-.1081	-.2386	.1360	-.0094
.1548	.1682	.0986	.0537	-.0761	-.0984
.1681	.2053	-.0080	.0161	-.0657	.1465
.1082	-.1492	.0402	-.0767	-.0609	-.0868
.0947	-.1441	.0471	-.0568	.1796	.1432
.1378	.0721	.1308	.0368	-.0821	.0285
.1569	.0524	-.1479	-.2013	-.1195	-.1965
.1472	.0539	-.1953	.0878	.1159	-.1949
.1387	.1189	.1372	-.0372	.0212	.2274
.1379	.0683	.0595	.0069	-.0013	.2205
.1385	.0375	-.1556	-.0931	.1726	.1098
.1416	.0341	-.0675	-.1626	-.0075	-.0950
.1409	.0101	-.1709	-.1153	.0768	.1442
.1367	.0716	.0804	.2157	-.0005	-.1612
.1428	.1532	.0589	-.0552	.1370	.0572
.1771	.1653	-.1219	-.0581	-.1876	-.0138
.1575	.1316	-.0352	-.1186	-.0542	.0145
.1553	.0850	-.0659	-.0525	-.1011	-.0223
.1063	-.0878	-.0603	.3119	.2780	.1771
.1387	.0852	-.0187	.0828	.1225	-.2046
.1147	.0053	.1215	-.0739	.1377	-.1032
.1142	-.0179	.1078	.0086	.1063	-.0204

MATRIZ U

.1542	.0338	-.2526	.0478	.0162	-.1200
.1538	.1631	.0309	-.0731	.0063	-.1514
.1168	-.0864	-.1168	.0815	.1663	.1152
.1040	-.0675	.1294	.1021	.1189	-.1810
.1148	-.0886	-.0938	-.2049	.1566	.0468
.1613	.1430	-.0346	-.0179	-.0870	-.0227
.1170	-.1447	-.0877	.3603	-.0248	-.1436
.1321	-.1553	-.1563	-.0834	-.2302	.1444
.1243	.0337	.1508	.0401	.0170	-.0787
.1329	.0100	-.0422	-.0564	.0529	.1721