

Introdução à Ciência de Dados

Fundamentos e Aplicações

Versão parcial preliminar

agosto 2019

Pedro A. Morettin

Julio M. Singer

Departamento de Estatística
Universidade de São Paulo
Rua do Matão, 1010
São Paulo, SP 05508-090
Brasil

Conteúdo

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Estatística, Ciência de Dados e Megadados | 1 |
| 1.1 | Introdução | 1 |
| 1.2 | Aprendizado com Estatística | 3 |
| 1.3 | Aprendizado automático | 4 |
| 1.4 | Redes neurais | 5 |
| 1.5 | Este livro | 7 |
| 1.6 | Conjuntos de dados | 9 |
| 1.7 | Notas do Capítulo | 10 |
| | PARTE I: ANÁLISE EXPLORATÓRIA DE DADOS | 13 |
| 2 | Preparação dos dados | 15 |
| 2.1 | Considerações preliminares | 15 |
| 2.2 | Planilhas de Dados | 19 |
| 2.3 | Construção de tabelas | 22 |
| 2.4 | Construção de gráficos | 24 |
| 2.5 | Notas de capítulo | 24 |
| 2.6 | Exercícios | 28 |
| 3 | Análise de dados de uma variável | 33 |
| 3.1 | Introdução | 33 |
| 3.2 | Distribuições de frequências | 34 |
| 3.2.1 | Variáveis qualitativas | 34 |
| 3.2.2 | Variáveis quantitativas | 36 |
| 3.3 | Medidas resumo | 44 |
| 3.3.1 | Medidas de posição | 44 |
| 3.3.2 | Medidas de dispersão | 46 |
| 3.3.3 | Medidas de assimetria | 49 |
| 3.4 | <i>Boxplots</i> | 52 |
| 3.5 | Modelos probabilísticos | 54 |
| 3.6 | Dados amostrais | 55 |
| 3.7 | Gráficos QQ | 57 |
| 3.8 | Transformação de variáveis | 62 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.9 | Desvio padrão e Erro padrão | 65 |
| 3.10 | Intervalo de confiança | 65 |
| 3.11 | Notas de capítulo | 67 |
| 3.12 | Exercícios | 69 |
| 4 | Análise de dados de duas variáveis | 79 |
| 4.1 | Introdução | 79 |
| 4.2 | Duas variáveis qualitativas | 80 |
| 4.3 | Duas variáveis quantitativas | 92 |
| 4.4 | Uma variável qualitativa e outra quantitativa | 101 |
| 4.5 | Notas de capítulo | 106 |
| 4.6 | Exercícios | 112 |
| 5 | Análise de dados de várias variáveis | 121 |
| 5.1 | Introdução | 121 |
| 5.2 | Gráficos para três variáveis | 122 |
| 5.3 | Gráficos para quatro ou mais variáveis | 132 |
| 5.4 | Medidas resumo multivariadas | 133 |
| 5.5 | Notas de capítulo | 135 |
| 5.6 | Exercícios | 142 |
| 6 | Análise de Regressão | 147 |
| 6.1 | Introdução | 147 |
| 6.2 | Regressão Linear Simples | 149 |
| 6.3 | Regressão Linear Múltipla | 169 |
| 6.4 | Regressão para dados longitudinais | 178 |
| 6.5 | Regressão Logística | 181 |
| 6.6 | Notas de capítulo | 187 |
| 6.7 | Exercícios | 195 |
| 7 | Análise de Sobrevivência | 205 |
| 7.1 | Introdução | 205 |
| 7.2 | Estimação da função de sobrevivência | 210 |
| 7.3 | Comparação de curvas de sobrevivência | 214 |
| 7.4 | Regressão para dados de sobrevivência | 214 |
| 7.5 | Notas de Capítulo | 215 |
| 7.6 | Exercícios | 216 |
| | PARTE II: APRENDIZADO SUPERVISIONADO | 221 |
| 8 | Classificação por meio de técnicas clássicas | 223 |
| 8.1 | Introdução | 223 |
| 8.2 | Classificação por regressão logística | 224 |
| 8.3 | Função discriminante linear de Fisher | 229 |
| 8.4 | Classificador bayesiano e vizinho mais próximo | 232 |
| 8.5 | Notas de capítulo | 233 |
| 8.6 | Exercícios | 233 |

Estatística, Ciência de Dados e Megadados

1.1 Introdução

Atualmente, os termos *Data Science* (Ciência de Dados) e *Big Data* (Megadados)¹ são utilizados em profusão, como se fossem conceitos novos, distintos daqueles com que os estatísticos lidam há cerca de dois séculos. Na década de 1980, numa palestra na Universidade de Michigan, EUA, C.F. Jeff Wu já sugeria que se adotassem os rótulos *Statistical Data Science*, ou simplesmente, *Data Science*, em lugar de *Statistics*, para dar maior visibilidade ao trabalho dos estatísticos. Talvez seja Tukey (1962, 1977), sob a denominação *Exploratory Data Analysis* (Análise Exploratória de Dados), o primeiro a dar importância ao que hoje se chama Ciência de Dados, sugerindo que se desse mais ênfase ao uso de tabelas, gráficos e outros dispositivos para uma análise preliminar de dados, antes que se passasse a uma **análise confirmatória**, que seria a **inferência estatística**. Outros autores, como Chambers (1993), Breiman (2001) e Cleveland (1985, 1993, 2001), também enfatizaram a preparação, apresentação e descrição dos dados como atividades preparatórias para inferência ou modelagem.

Basta uma procura simples na Internet para identificar novos centros de Ciências de Dados (CD) em várias universidades ao redor do mundo, com programas de mestrado, doutorado e mesmo graduação. O interessante é que muitos desses programas estão alojados em escolas de Engenharia, Bioestatística, Ciência da Computação, Administração, Economia etc., e não em departamentos de Estatística. Paradoxalmente, há estatísticos que acham que Estatística é a parte menos importante de CD! Certamente isso é um equívoco. Como ressalta Donoho (2017), se uma das principais características de CD é analisar grandes conjuntos de dados (Megadados), há mais de 200 anos os estatísticos têm se preocupado com a análise de vastos

¹Para esclarecimento do significado dos termos cunhados em inglês, optamos pela tradução oriunda do **Glossário Inglês-Português de Estatística** produzido pela Associação Brasileira de Estatística e Sociedade Portuguesa de Estatística, disponível em <http://glossario.spestatistica.pt/>.

conjuntos de dados provenientes de censos, coleta de informações meteorológicas, observação de séries de índices financeiros etc., que têm essa característica. Outro equívoco consiste em imaginar que a Estatística Clássica (frequentista, bayesiana etc.) trata somente de pequenos volumes de dados, conhecidos como *Small Data*. Essa interpretação errônea vem do fato de que muitos livros didáticos apresentam conjuntos de dados, em geral de pequeno ou médio porte, para que as metodologias apresentadas possam ser aplicadas pelos leitores, mesmo utilizando calculadoras ou aplicativos estatísticos (pacotes). Nada impede que essas metodologias sejam aplicadas a grandes volumes de dados a não ser pelas dificuldades computacionais inerentes. Talvez seja este aspecto computacional, aquele que mascara os demais componentes daquilo que se entende por CD, pois em muitos casos, o interesse é dirigido apenas para o desenvolvimento de algoritmos cuja finalidade é aprender a partir dos dados, omitindo-se características estatísticas.

Em particular, Efron e Hastie (2016) ressaltam que tanto a teoria bayesiana quanto a frequentista têm em comum duas características: a **algorítmica** e a **inferencial**. Como exemplo, citam o caso da média amostral de um conjunto de dados x_1, \dots, x_n , como estimador da média μ de uma população da qual se supõe que a amostra tenha sido obtida. O algoritmo para cálculo é

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (1.1)$$

Resta saber quão acurado e preciso é este estimador. Como sabemos, admitindo-se que a amostra tenha sido colhida segundo um procedimento adequado, $E(\bar{x}) = \mu$, ou seja, o estimador \bar{x} é não enviesado e o seu erro padrão é

$$\hat{\text{ep}} = \left[\frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \right]^{1/2}, \quad (1.2)$$

que mostra a sua consistência e estabelece as bases para uma inferência estatística (frequentista!) adequada. Mais adiante, esses autores mencionam que:

Optimality theory, both for estimating and for testing, anchored statistical practice in the twentieth century. The larger datasets and more complicated inferential questions of the current era have strained the capabilities of that theory. Computer-age statistical inference, as we will see, often displays an unsettling ad hoc character. Perhaps some contemporary Fishers and Neymans will provide us with a more capacious optimality theory equal to the challenges of current practice, but for now that is only a hope.

Blei e Smyth (2017) discutem Estatística e CD sob três perspectivas: estatística, computacional e humana. Segundo os autores, CD é uma filha da estatística e da ciência da computação. A estatística serviria à CD guiando a coleta e análise de dados complexos. A computação, desenvolvendo algoritmos que distribuem conjuntos enormes de dados por múltiplos

processadores (proporcionando velocidade de cálculo) e equipamentos com grande capacidade de memória (permitindo seu armazenamento). Sob a perspectiva humana, a CD contempla modelos estatísticos e métodos computacionais para resolver problemas específicos de outras disciplinas, entender o domínio desses problemas, decidir quais dados obter, como processá-los, explorá-los e visualizá-los, selecionar um modelo estatístico e métodos computacionais apropriados, além de comunicar os resultados da análise de uma forma inteligível para aqueles que propuseram os problemas.

Donoho (2017) discute várias **memes** (uma ideia ou símbolo transmitido pelas chamadas **mídias sociais**) sobre Megadados (MD) e CD. Algumas **memes** são vídeos ou expressões verbais, outras, como MD e CD, são providas de um conteúdo filosófico mais profundo. Por exemplo, sobre a *Big Data Meme*, diz que se pode rejeitar o termo MD como um critério para uma distinção séria entre Estatística e CD, para isso evocando o que dissemos acima sobre análise de dados de censos e o fato de pesquisadores na área de inferência estatística terem buscado o entendimento científico de MD por décadas.

Um dos aspectos tradicionalmente negligenciados por estatísticos é aquele em que os dados têm natureza não ortodoxas como imagens, sons etc. Nesse caso, algoritmos computacionais são essenciais para seu tratamento que, por sua vez, não pode prescindir do apoio de um estatístico.

1.2 Aprendizado com Estatística

Outros termos muito utilizados hoje em dia são *Statistical Learning* (**Aprendizado com Estatística**) e *Machine Learning* (**Aprendizado automático**) e consistem na utilização de modelos estatísticos acoplados a algoritmos computacionais desenvolvidos para extrair informação de conjuntos de dados contendo, em geral, muitas unidades amostrais e muitas variáveis.

O Aprendizado com Estatística (AE) pode ser **supervisionado** ou **não supervisionado**. No AE supervisionado, o objetivo é prever o valor de uma variável resposta (*outcome*) a partir de variáveis preditoras (*inputs*).

A variável resposta pode ser quantitativa ou qualitativa (ver Capítulo 3). No caso de variáveis respostas quantitativas, um dos modelos estatísticos mais utilizados é o de **regressão**; quando a variável resposta é qualitativa, utilizam-se geralmente modelos de **regressão logística** para a análise (ver Capítulo 6. Adicionalmente, para variáveis qualitativas (categóricas ou discretas), com valores em um conjunto finito, os modelos mais comuns são os de classificação, em que a partir de um conjunto $(x_i, y_i), i = 1 \dots, N$ de dados, chamado de **conjunto de treinamento**, obtemos, por exemplo, previsões para a variável resposta, y_i , ou uma regra de classificação, dependendo de ela ser quantitativa ou qualitativa (ver Capítulo 10). Outros problemas em AE supervisionado envolvem expansões em bases de funções, como polinômios, *splines*, ondaletas, regressão logística não linear, modelos aditivos generalizados (MAG), modelos de regressão por suporte vetorial

support vector regression, redes neuronais etc.

No caso de AE não supervisionado, temos apenas um conjunto de variáveis preditoras (*inputs*) e o objetivo é descrever associações e padrões entre essas variáveis. Nesse caso, não há uma variável resposta. Dentre as técnicas mais utilizadas nesta situação temos a **análise de conglomerados**, a **análise de componentes principais** e a **análise de componentes independentes** (ambas proporcionando a redução da dimensionalidade dos dados), *self-organizing methods*, **escalamento multidimensional** etc.

1.3 Aprendizado automático

Inteligência Artificial (IA) é um tópico de extremo interesse e que aparece frequentemente nas mídias escritas e faladas. Normalmente o termo suscita questões do tipo: computadores no futuro vão se tornar inteligentes e a raça humana será substituída por eles? Ou que todos perderemos nossos empregos, por que seremos substituídos por robôs inteligentes? Pelo menos até o presente esses receios são infundados.

Acredita-se que o artigo de Turing (1950) seja o primeiro a tratar do tema. A primeira frase do artigo diz:

I propose to consider the question, “Can machines think?”

Segue-se discussão sobre o que se entende por “máquina”, por “pensar” e por um jogo, chamado o “jogo da imitação”. Turing também discute condições para considerar uma máquina inteligente, que passaram a ser chamadas de *Turing test*. A primeira página do artigo está na Nota de Capítulo 1.

O tópico de IA foi tratado a seguir por McCarthy et al. (1955), na forma de uma proposta para um projeto de pesquisa no Dartmouth College, sobre IA. Cópia da primeira página do original encontra-se na Nota de Capítulo 2. Entre os signatários, encontra-se Shannon, precursor da Teoria da Informação.

De modo informal, a IA é um esforço para automatizar tarefas intelectuais usualmente realizadas por seres humanos (Chollet, 2018).

A IA está intimamente ligada ao desenvolvimento da computação (ou programação de computadores) e até a década de 1980, a IA era entendida como na programação clássica: temos um sistema computacional (SC) (um computador ou um *cluster* de computadores ou nuvem etc.) no qual se alimentam dados e uma regra de cálculo e se obtém uma resposta. Por exemplo, num problema de regressão, usando-se mínimos quadrados para se obter os estimadores dos parâmetros, por regra de cálculo, queremos dizer um algoritmo que resolve o problema e pode ser programado em alguma linguagem (Fortran, C, S etc). A maioria dos pacotes computacionais existentes funcionam dessa maneira.

A partir da década de 1990, o aprendizado automático (AA) criou um novo paradigma. A programação clássica não resolve problemas mais complicados, como reconhecimento de imagens, voz, escrita etc. Então a ideia

é **treinar** um SC no lugar de programá-lo. Isso significa que se apresentam muitos exemplos relevantes a determinada tarefa (**dados de treinamento**) ao SC, de modo que esse encontre uma estrutura estatística nesses exemplos, produzindo uma regra automatizada. Ou seja, no AA, a entrada é constituída de dados e respostas, e a saída é uma regra de cálculo. Com um novo conjunto de observações (**dados de teste**) procura-se obter a eficácia do método segundo algum critério.

Existem atualmente, muitos procedimentos que são usados em AA (ou em AE): SVM (*support vector machines*), métodos baseados em árvores de decisão (árvores, florestas, *bagging*, *boosting*), redes neurais etc. O objetivo é obter algoritmos que tenham um alto valor preditivo em problemas de regressão, agrupamento, classificação e previsão. Em capítulos seguintes iremos tratar de alguns desses métodos.

Os métodos de aprendizado automático são implementados por meios de redes neurais, e na seção seguinte iremos dar algumas ideias sobre elas.

1.4 Redes neurais

As contribuições pioneiras para a área de Redes Neurais (RN) ² foram as de McCulloch e Pitts (1943), que introduziram a ideia de RN como máquinas computacionais, de Hebb (1949), por postular a primeira regra para aprendizado organizado e Rosenblatt (1958), que introduziu o *perceptron*, como o primeiro modelo de aprendizado supervisionado. Veja a Figura 1.1.

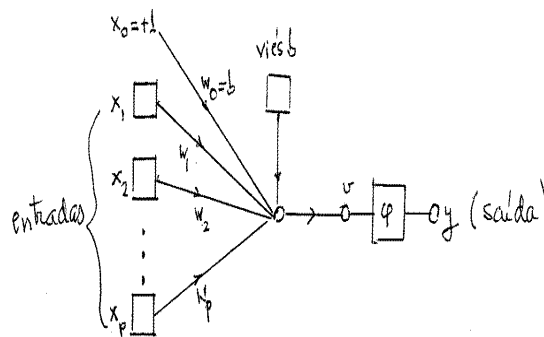


Figura 1.1. Diagrama de um perceptron.

O algoritmo do perceptron (programado para o IBM 704) foi implementado por uma máquina, chamada Mark I, planejada para reconhecimento de

²também denominadas redes neurais

imagens (veja a Nota de Capítulo 3). O modelo consiste de uma combinação linear das entradas, incorporando um viés externo. A soma resultante é aplicada a um limitador, na forma de uma função degrau (ou uma sigmóide).

Se $\mathbf{x} = (+1, x_1, x_2, \dots, x_p)^\top$ contém as entradas, $\mathbf{w} = (b, w_1, w_2, \dots, w_p)^\top$ são os pesos, a saída é dada por

$$v = \sum_{i=0}^p w_i x_i = \mathbf{w}^\top \mathbf{x}.$$

Atualmente, a RN mais simples consiste de entradas, de uma camada intermediária escondida e das saídas. Na Figura 1.2, se $K = 1$ temos o caso de regressão e, no caso de classificação, teremos K classes, sendo que $Z_i = -1$ ou $Z_i = +1$.

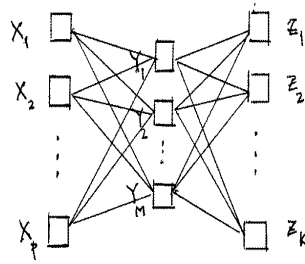


Figura 1.2. Rede neural com uma camada escondida.

Consideremos os seguintes vetores de variáveis, $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)^\top$, $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_M)^\top$ e $\mathbf{W} = (W_1, \dots, W_K)^\top$ e sejam, os vetores de pesos α_j , $j = 1, \dots, M$, β_k , $k = 1, \dots, K$, de ordens $p \times 1$ e $M \times 1$, respectivamente.

A RN da Figura 1.2 pode ser representada pelas equações:

$$Y_j = f(\alpha_{0j} + \alpha_j^\top \mathbf{X}), \quad j = 1, \dots, M, \quad (1.3)$$

$$W_k = \beta_{0k} + \beta_k^\top \mathbf{Y}, \quad k = 1, \dots, K, \quad (1.4)$$

$$f_k(\mathbf{X}) = g_k(\mathbf{W}), \quad k = 1, \dots, K. \quad (1.5)$$

A função f é chamada **função de ativação** e geralmente é usada a sigmóide

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}.$$

Os pesos α_{0j} e β_{0k} têm o mesmo papel de b no perceptron e representam vieses. A saída final é $g_k(\mathbf{W})$. Em problemas de regressão, $g_k(\mathbf{W}) = W_k$ e em problemas de classificação, $g_k(\mathbf{W}) = e^{W_k} / \sum_i e^{W_i}$, que corresponde a uma logística multidimensional.

Os Y_j constituem a camada escondida e não são observáveis.

O ajuste de modelos de RN é feito minimizando a soma dos quadrados dos resíduos, no caso de regressão, onde a minimização é sobre os pesos. No caso de classificação, usamos a entropia. Nos dois casos é usado um algoritmo chamado de **backpropagation**. É necessário escolher valores iniciais e regularização (usando uma função penalizadora), porque o algoritmo de otimização é não convexo e instável.

No caso de termos várias camadas intermediárias obtém-se o que é chamado aprendizado profundo (*deep learning*). A complexidade do algoritmo é proporcional ao número de observações, número de preditores, número de camadas e número de épocas de treinamento. Para detalhes sobre esses tópicos, veja Hastie et al. (2017) e Cholet (2018).

1.5 Este livro

Um dos maiores problemas oriundos da disseminação indiscriminada das técnicas utilizadas em CD é a confiança exagerada nos resultados obtidos da aplicação de algoritmos computacionais. Embora sejam essenciais em muitas situações, especialmente com megadados, sua utilização sem o concurso dos princípios do pensamento estatístico, fundamentado nas características de aleatoriedade e variabilidade inerentes a muitos fenômenos, pode gerar conclusões erradas ou não sustentáveis. Também lembramos que CD só faz sentido a partir de um problema em que as questões a serem respondidas estejam claramente especificadas.

Independentemente do volume de dados disponíveis para análise, Ciência de Dados é uma atividade multidisciplinar que envolve

- i) um problema a ser resolvido com questões claramente especificadas;
- ii) um conjunto de dados (seja ele volumoso ou não);
- iii) os meios para sua obtenção;
- iv) sua organização;
- v) a especificação do problema original em termos das variáveis desse conjunto de dados;
- vi) a descrição e resumo dos dados à luz do problema a ser resolvido;
- vii) a escolha das técnicas estatísticas apropriadas para a resolução desse problema;
- viii) os algoritmos computacionais necessários para a implementação dessas técnicas;
- ix) a apresentação dos resultados.

Obviamente, a análise de problemas mais simples pode ser conduzida por um estatístico (sempre em interação com investigadores da área em que o

problema se insere). Em problemas mais complexos, especialmente aqueles com grandes conjuntos de dados que possivelmente contenham imagens, sons etc., só **uma equipe** com profissionais de diferentes áreas poderá atacá-los adequadamente. Em particular, essa equipe deve ser formada, pelo menos, por um profissional de alguma área do conhecimento em que o problema a ser resolvido se situa, por um estatístico, por um especialista em banco de dados, por um especialista em algoritmos computacionais e possivelmente por um profissional da área de comunicação. Se por um lado os aspectos computacionais são imprescindíveis nesse contexto, por outro, uma compreensão dos conceitos básicos de Estatística deve constar da formação de todos os membros da equipe.

Embora todos os aspectos envolvidos em Ciência dos Dados sejam abordados neste livro, o foco será na metodologia estatística necessária em qualquer análise, envolvendo a coleta, organização, resumo e análise dos dados. Para um melhor entendimento das técnicas apresentadas, em geral, usamos conjuntos de dados não muito volumosos, de modo que os leitores poderão re-analisá-los usando desde uma calculadora até programas sofisticados. Desde que tenham acesso e aptidão para lidar com *software* adequado, os leitores não terão dificuldades em analisar grandes conjuntos de dados sob as mesmas perspectivas apresentadas no texto.

A (bem-vinda) popularização das técnicas utilizadas naquilo que se chama Ciência de Dados não está isenta de problemas. Nem sempre os profissionais que se aventuram por essa seara têm o conhecimento básico dos métodos estatísticos que fundamentam os algoritmos mais empregados na análise de dados. Nosso objetivo é preencher essa lacuna, apresentando conceitos e métodos da Análise Exploratória de Dados necessários para a análise de dados e indicando como são empregados nos problemas práticos com que “cientistas de dados” são usualmente desafiados. O Capítulo 2 é dedicado à preparação dos dados, geralmente obtidos de forma inadequada para análise. Os conceitos subjacentes a esses métodos são detalhados nos Capítulos 3 a 5. A utilização desses métodos no aprendizado estatístico supervisionado ou não é apresentada nos Capítulos 6 a 12. *A utilização de software (com menção especial para os pacotes do repositório R) para a extração e tratamento de dados de diferentes fontes disponíveis na internet é discutida no Capítulo 13.*

O texto poderá ser utilizado em programas de bacharelado em Estatística (especialmente na disciplina de Estatística Descritiva com os capítulos 1 a 7 e na disciplina de Estatística Aplicada, com a inclusão dos capítulos restantes). Além disso, servirá para “cientistas de dados” que tenham interesse nos aspectos que fundamentam quaisquer análises de dados.

Embora muitos cálculos necessários para uma análise estatística possam ser concretizados por meio de calculadoras, o recurso a pacotes computacionais é necessário tanto para as análises mais sofisticadas quanto para análises extensas. Neste livro usaremos preferencialmente o repositório de pacotes estatísticos R, obtido livremente em *Comprehensive R Archive Network*, CRAN, no sítio

<http://CRAN.R-project.org>.

Dentre os pacotes estatísticos disponíveis na linguagem R, aqueles mais utilizados neste texto são: `adabag`, `caret`, `cluster`, `e1071`, `forecast`, `ggplot2`, `MASS`, `mgcv`, `nlme`, `randomForests`, `xgboost`. As funções de cada pacote necessárias para a realização das análises serão indicadas ao longo do texto.

Pacotes comerciais alternativos incluem SPlus, Minitab, SAS, MatLab etc.

1.6 Conjuntos de dados

Alguns conjuntos de dados analisados são dispostos ao longo do texto; outros são apresentados em formato Excel em arquivos disponíveis no formato

<http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/arquivo.xls>

Por exemplo, no sitio

<http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/coronarias.xls> encontramos uma planilha com dados de um estudo sobre obstrução coronariana; quando pertinentes, detalhes sobre as variáveis observadas no estudo estarão na aba intitulada “descricao”; os dados estão dispostos na aba intitulada “dados”. Conjuntos de dados também poderão ser referidos no formato CD-arquivo (por exemplo, CD-coronarias). Quando necessário, indicaremos outros sítios em que se podem obter os dados utilizados nas análises.

Na Tabela 1.1 listamos os principais conjuntos de dados e uma breve descrição de cada um deles.

Tabela 1.1: Conjuntos de dados para os exemplos e exercícios do livro

| Rótulo | Descrição |
|--------------|---|
| arvores | Concentração de elementos químicos em cascas de árvores |
| cifose | Dados de crianças submetidas a cirurgia de coluna |
| distancia | Distância para distinguir objeto em função da idade |
| endometriose | Dados de um estudo sobre prognóstico de endometriose |
| esteira | Medidas obtidas em testes ergométricos |
| ceagFGV | Questionário respondido por 50 alunos da FGV-SP |
| morfina | Dados de um estudo sobre concentração de morfina em cabelos |
| municipios | Populações dos 30 maiores municípios do Brasil |
| poluicao | Concentração de poluentes em São Paulo |
| precipitacao | Precipitação em Fortaleza, CE, Brasil |
| motoristas | Dados de distância e velocidade de 4000 motoristas |
| uber | Dados sobre corridas do Uber em New York |
| inibina | Utilização de inibina como marcador de reserva ovariana |
| iris | Medidas de pétalas e sépalas para três espécies de flores |

1.7 Notas do Capítulo

- 1) Apresentamos, a seguir, a primeira página do artigo de Alan Turing, publicado na revista *Mind*, em 1950.

VOL. LIX. No. 236.]

[October, 1950

M I N D
A QUARTERLY REVIEW
OF
PSYCHOLOGY AND PHILOSOPHY

— 366 —
I.—COMPUTING MACHINERY AND
INTELLIGENCE

By A. M. TURING

1. *The Imitation Game.*

I PROPOSE to consider the question, 'Can machines think?' This should begin with definitions of the meaning of the terms 'machine' and 'think'. The definitions might be framed so as to reflect so far as possible the normal use of the words, but this attitude is dangerous. If the meaning of the words 'machine' and 'think' are to be found by examining how they are commonly used it is difficult to escape the conclusion that the meaning and the answer to the question, 'Can machines think?' is to be sought in a statistical survey such as a Gallup poll. But this is absurd. Instead of attempting such a definition I shall replace the question by another, which is closely related to it and is expressed in relatively unambiguous words.

The new form of the problem can be described in terms of a game which we call the 'imitation game'. It is played with three people, a man (A), a woman (B), and an interrogator (C) who may be of either sex. The interrogator stays in a room apart from the other two. The object of the game for the interrogator is to determine which of the other two is the man and which is the woman. He knows them by labels X and Y, and at the end of the game he says either 'X is A and Y is B' or 'X is B and Y is A'. The interrogator is allowed to put questions to A and B thus:

C: Will X please tell me the length of his or her hair?
Now suppose X is actually A, then A must answer. It is A's

28

433

- 2) Apresentamos, abaixo, a primeira página do Projeto de IA de Dartmouth, publicado originalmente em 1955, e reproduzido na revista AI Magazine, de 2006.

AI Magazine Volume 27 Number 4 (2006) (© AAAI)

Articles

A Proposal for the Dartmouth Summer Research Project on Artificial Intelligence

August 31, 1955

*John McCarthy, Marvin L. Minsky,
Nathaniel Rochester,
and Claude E. Shannon*

■ The 1956 Dartmouth summer research project on artificial intelligence was initiated by this August 31, 1955 proposal, authored by John McCarthy, Marvin Minsky, Nathaniel Rochester, and Claude Shannon. The original typescript consisted of 17 pages plus a title page. Copies of the typescript are housed in the archives at Dartmouth College and Stanford University. The first 5 papers state the proposal, and the remaining pages give qualifications and interests of the four who proposed the study. In the interest of brevity, this article reproduces only the proposal itself, along with the short autobiographical statements of the proposers.

We propose that a 2 month, 10 man study of artificial intelligence be carried out during the summer of 1956 at Dartmouth College in Hanover, New Hampshire. The study is to proceed on the basis of the conjecture that every aspect of learning or any other feature of intelligence can in principle be so precisely described that a machine can be made to simulate it. An attempt will be made to find how to make machines use lan-

guage, form abstractions and concepts, solve kinds of problems now reserved for humans, and improve themselves. We think that a significant advance can be made in one or more of these problems if a carefully selected group of scientists work on it together for a summer.

The following are some aspects of the artificial intelligence problem:

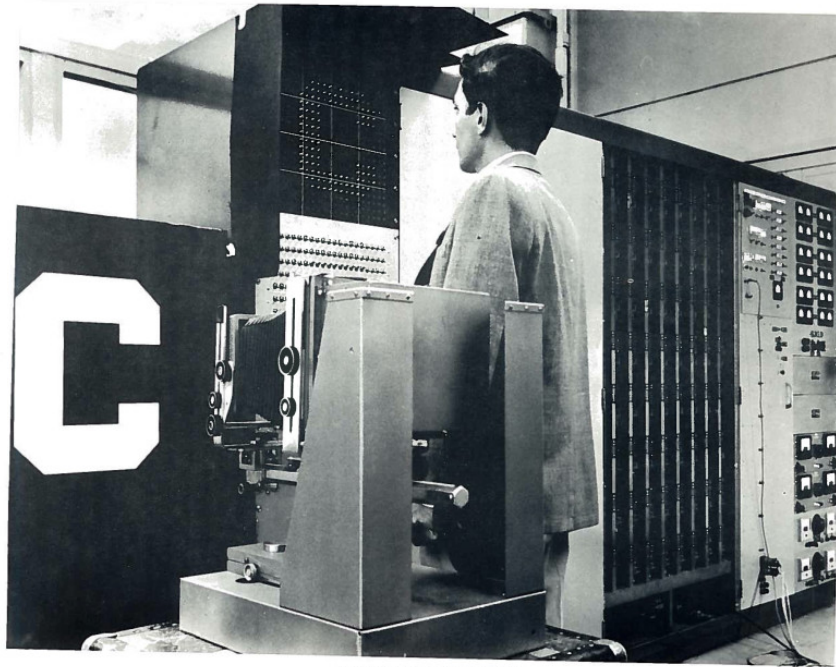
1. Automatic Computers

If a machine can do a job, then an automatic calculator can be programmed to simulate the machine. The speeds and memory capacities of present computers may be insufficient to simulate many of the higher functions of the human brain, but the major obstacle is not lack of machine capacity, but our inability to write programs taking full advantage of what we have.

2. How Can a Computer be Programmed to Use a Language

It may be speculated that a large part of human thought consists of manipulating words according to rules of reasoning and rules of conjecture. From this point of view, forming a generalization consists of admitting a new

- 3) A foto do Perceptron Mark I, abaixo, foi retirada do relatório “PERCEPTRONS AND THE THEORY OF BRAIN MECHANISMS”, de março de 1961, Cornell Aeronautical Laboratory.



THE MARK I PERCEPTRON

PARTE I: ANÁLISE EXPLORATÓRIA DE DADOS

A primeira parte deste texto é dedicada à discussão de alguns conceitos básicos, como distribuição de frequências, variabilidade e associação entre variáveis, além de métodos de resumo de dados por meio de tabelas e gráficos. Para efeito didático, discutimos separadamente os casos de uma, duas ou mais que duas variáveis. Consideramos técnicas de regressão, essenciais para o entendimento da associação entre uma ou mais variáveis explicativas e uma variável resposta. Nesse contexto, incluímos análise de sobrevivência, em que a variável resposta é o tempo até a ocorrência de um evento de interesse. Os conceitos e técnicas aqui abordados servem de substrato e são imprescindíveis para a compreensão e aplicação adequada das técnicas estatísticas de análise apresentadas nas Partes II e III.

Preparação dos dados

2.1 Considerações preliminares

Em praticamente todas as áreas do conhecimento, dados são coletados com o objetivo de obtenção de informação. Esses dados podem representar uma população (como o censo demográfico) ou uma parte (amostra) dessa população (como aqueles oriundos de uma pesquisa eleitoral). Eles podem ser obtidos por meio de estudos observacionais (como aqueles em que se examinam os registros médicos de um determinado hospital), de estudos amostrais (como pesquisas de opinião) ou experimentais (como ensaios clínicos).

Mais comumente, os dados envolvem valores de várias variáveis, obtidos da observação de unidades de investigação que constituem uma amostra de uma população. A análise de dados amostrais possibilita que se faça inferência sobre a distribuição de probabilidades das variáveis de interesse, definidas sobre a população da qual a amostra foi colhida. Nesse contexto, a Estatística é uma ferramenta importante para organizá-los, resumi-los, analisá-los e utilizá-los para tomada de decisões. O ramo da Estatística conhecido como **Análise Exploratória de Dados** se ocupa da organização e resumo dos dados de uma amostra ou, eventualmente, de toda a população e o ramo conhecido como **Inferência Estatística** se refere ao processo de se tirar conclusões sobre uma população com base em uma amostra dela.

A abordagem estatística para o tratamento de dados envolve

- i) O planejamento da forma de coleta em função dos objetivos do estudo.
- ii) A organização de uma planilha para seu armazenamento eletrônico; no caso de Megadados, a organização de um banco de dados (*data warehouse*) pode ser necessária (ver Nota de Capítulo 1).
- iii) O seu resumo por meio de tabelas e gráficos.
- iv) A identificação e correção de possíveis erros de coleta e/ou digitação.
- v) A proposta de modelos probabilísticos baseados na forma de coleta dos dados e nos objetivos do estudo; a finalidade desses modelos é relacionar a amostra (se for o caso) à população para a qual se quer fazer inferência.

- vi) A proposta de modelos estruturais para os parâmetros do modelo probabilístico para representar relações entre as características (variáveis) observadas.
- vii) A avaliação do ajuste do modelo aos dados por meio de técnicas de diagnóstico e/ou simulação.
- viii) A reformulação e reajuste do modelo à luz dos resultados do diagnóstico e/ou simulação.
- ix) a tradução dos resultados do ajuste em termos não técnicos.

O item i), por exemplo, pode ser baseado em uma hipótese formulada por um cientista. Numa tentativa de comprovar a sua hipótese, ele identifica as variáveis de interesse e planeja um experimento (preferencialmente com o apoio de um estatístico) para a coleta dos dados que serão armazenados numa planilha. O objetivo desse livro é abordar detalhadamente os itens ii), iii), iv) e viii), que constituem a essência da Estatística Descritiva, com referências eventuais aos itens v), vi), vii), viii) e ix), que formam a base da Inferência Estatística.

Exemplo 2.1: Se quisermos saber se há relação entre o consumo (variável C) e renda (variável Y) de indivíduos de uma população, podemos escolher uma amostra¹ de n indivíduos dessa população e medir essas duas variáveis nesses indivíduos, obtendo-se o conjunto de dados $\{(Y_1, C_1), \dots, (Y_n, C_n)\}$.

Para saber se existe alguma relação entre C e Y podemos construir um gráfico de dispersão, colocando a variável Y no eixo das abscissas e a variável C no eixo das ordenadas. Obteremos uma nuvem de pontos no plano (Y, C) , que pode nos dar uma ideia de um **modelo** relacionando Y e C . No Capítulo 4 trataremos da análise de duas variáveis e, no Capítulo 6, estudaremos os chamados modelos de regressão, que são apropriados para o exemplo em questão. Em Economia, sabe-se, desde Keynes, que o gasto com o consumo de pessoas (C) é uma função da renda pessoal disponível (Y), ou seja

$$C = f(Y),$$

para alguma função f .

Para se ter uma ideia de como é a função f para essa comunidade, podemos construir um gráfico de dispersão entre Y e C . Com base em um conjunto de dados hipotéticos com $n = 20$, esse gráfico está apresentado na Figura 2.1 e é razoável postular o modelo

$$C_i = \alpha + \beta Y_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.1)$$

em que (Y_i, C_i) , $i = 1, \dots, n$ são os valores de Y e C efetivamente observados e e_i , $i = 1, \dots, n$ são variáveis não observadas, chamadas **erros**. No

¹Em geral, a amostra deve ser obtida segundo alguns critérios que servirão para fundamentar os modelos utilizados na inferência; mesmo nos casos em que esses critérios não forem seguidos, as técnicas abordadas neste texto podem ser utilizadas para o entendimento das relações entre as variáveis observadas. No Capítulo 3 definiremos formalmente o que se chama uma amostra aleatória simples retirada de uma população.

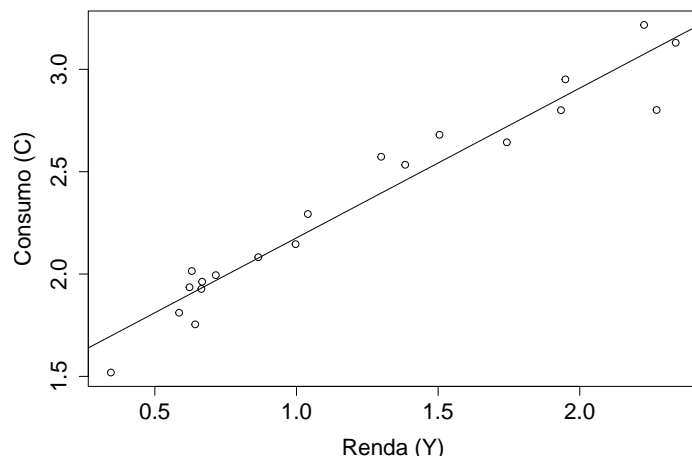


Figura 2.1: Relação entre renda e consumo de 20 indivíduos.

jargão econômico, o parâmetro α é denominado **consumo autônomo** e β representa a **propensão marginal a consumir**. A reta representada no gráfico foi obtida usando-se métodos discutidos no Capítulo 6. Nesse caso, obtemos $\alpha = 1,44$ e $\beta = 0,73$, aproximadamente. Para diferentes comunidades (populações) poderemos ter curvas (modelos) diferentes para relacionar Y e C .

Exemplo 2.2: Os dados da Tabela 2.1 foram extraídos de um estudo realizado no Instituto de Ciências Biomédicas da Universidade de São Paulo com o objetivo de avaliar a associação entre a infecção de gestantes por malária e a ocorrência de microcefalia nos respectivos bebês. O dicionário das variáveis observadas está indicado na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Dicionário para as variáveis referentes ao Exemplo 2.2

| Rótulos | Variável | Unidade de medida |
|---------|--|---|
| id | identificador de paciente | |
| idade | Idade da mãe | anos |
| nmal | Quantidade de malárias durante a gestação | número inteiro |
| parasit | Espécie do parasita da malária | 0: não infectada 1: P. vivax 2: P. falciparum 3: malária mista 4: indeterminado |
| ngest | Paridade (quantidade de gestações) | Número inteiro |
| idgest | Idade gestacional no parto | semanas |
| sexrn | Sexo do recém-nascido | 1: masculino 2: feminino |
| pesorn | Peso do recém-nascido | g |
| estrn | Estatura do recém-nascido | cm |
| pcefal | Perímetro cefálico do recém-nascido | cm |
| Obs: | Observações omissas são representadas por um ponto | |

A disposição dos dados do Exemplo 2.2 no formato de uma planilha está representada na Figura 2.2.²

| id | idade | nmal | parasit | ngest | idgest | sexrn | pesorn | estrn | pcefal |
|----|-------|------|---------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|
| 1 | 25 | 0 | 0 | 3 | 38 | 2 | 3665 | 46 | 36 |
| 2 | 30 | 0 | 0 | 9 | 37 | 1 | 2880 | 44 | 33 |
| 3 | 40 | 0 | 0 | 1 | 41 | 1 | 2960 | 52 | 35 |
| 4 | 26 | 0 | 0 | 2 | 40 | 1 | 2740 | 47 | 34 |
| 5 | . | 0 | 0 | 1 | 38 | 1 | 2975 | 50 | 33 |
| 6 | 18 | 0 | 0 | . | 38 | 2 | 2770 | 48 | 33 |
| 7 | 20 | 0 | 0 | 1 | 41 | 1 | 2755 | 48 | 34 |
| 8 | 15 | 0 | 0 | 1 | 39 | 1 | 2860 | 49 | 32 |
| 9 | . | 0 | 0 | . | 42 | 2 | 3000 | 50 | 35 |
| 10 | 18 | 0 | 0 | 1 | 40 | 1 | 3515 | 51 | 34 |
| 11 | 17 | 0 | 0 | 2 | 40 | 1 | 3645 | 54 | 35 |
| 12 | 18 | 1 | 1 | 3 | 40 | 2 | 2665 | 48 | 35 |
| 13 | 30 | 0 | 0 | 6 | 40 | 2 | 2995 | 49 | 33 |
| 14 | 19 | 0 | 0 | 1 | 40 | 1 | 2972 | 46 | 34 |
| 15 | 32 | 0 | 0 | 5 | 41 | 2 | 3045 | 50 | 35 |
| 16 | 32 | 0 | 0 | 8 | 38 | 2 | 3150 | 44 | 35 |
| 17 | 18 | 0 | 0 | 2 | 40 | 1 | 2650 | 48 | 33.5 |
| 18 | 18 | 0 | 0 | 1 | 41 | 1 | 3200 | 50 | 37 |
| 19 | 19 | 0 | 0 | 1 | 39 | 1 | 3140 | 48 | 32 |
| 20 | 18 | 0 | 0 | 2 | 40 | 1 | 3150 | 47 | 35 |
| 21 | 27 | 0 | 0 | 3 | 40 | 1 | 4185 | 52 | 35.5 |
| 22 | 26 | 0 | 0 | 3 | 40 | 2 | 4070 | 52 | 35 |
| 23 | . | 0 | 0 | . | 40 | 1 | 3950 | 50 | 37 |
| 24 | 19 | 0 | 0 | 1 | 40 | 1 | 3245 | 51 | 33 |
| 25 | 23 | 0 | 0 | . | 41 | 1 | 3010 | 49 | 35 |
| 26 | . | 0 | 0 | . | 40 | 2 | 3260 | 50 | 33 |
| 27 | 20 | 1 | 1 | 2 | 40 | 2 | 3450 | 49 | 33 |
| 28 | 19 | 0 | 0 | 3 | 40 | 2 | 2765 | 48 | 32 |
| 29 | 22 | 0 | 0 | 4 | 40 | 1 | 4190 | 50 | 34 |
| 30 | 32 | 0 | 0 | 4 | 42 | 2 | 4035 | 51 | 34 |
| 31 | 33 | 0 | 0 | 5 | 39 | 2 | 3620 | 51 | 33 |
| 32 | 30 | 3 | 3 | 5 | 38 | 1 | 3230 | 48 | 34 |
| 33 | 36 | 0 | 0 | 7 | 39 | 2 | 3185 | 50 | 38 |
| 34 | . | 0 | 0 | . | 39 | 2 | 2950 | 47 | 33 |

Figura 2.2: Planilha com dados referentes ao Exemplo 2.2.

Neste livro estaremos interessados na análise de conjuntos de dados, que poderão ser provenientes de populações, amostras ou de estudos observacionais. Para essa análise usaremos tabelas, gráficos e diversas medidas de posição (localização), variabilidade e associação, com o intuito de resumir e interpretar os dados.

²Note que representamos tabelas e planilhas de forma diferente. Planilhas são representadas no texto como figuras para retratar o formato com que são apresentadas nos *software* mais utilizados, como o **Excel**. Veja a Seção 2.2.

2.2 Planilhas de Dados

Planilhas (usualmente eletrônicas) são matrizes em que se armazenam dados com o objetivo de permitir sua análise estatística. Em geral, cada linha da matriz de dados corresponde a uma unidade de investigação (*e.g.* unidade amostral) e cada coluna, a uma variável. Uma planilha bem elaborada contribui tanto para o entendimento do processo de coleta de dados e especificação das variáveis sob investigação quanto para a proposta de uma análise estatística adequada. A primeira etapa para a construção de uma planilha de dados consiste na elaboração de um dicionário com a especificação das variáveis, que envolve

- i) sua definição operacional (ver Nota de Capítulo 2);
- ii) a atribuição de rótulos (mnemônicos com letras minúsculas e sem acentos para facilitar a digitação e leitura por pacotes computacionais);
- iii) a especificação das unidades de medida ou definição de categorias; para variáveis categorizadas, convém atribuir valores numéricos às categorias com a finalidade de facilitar a digitação e evitar erros (veja a variável “Sexo do recém-nascido” na Tabela 2.1);
- iv) a atribuição de um código para valores omissos (*missing*);
- v) a indicação de como devem ser codificados dados abaixo do limite de detecção (*e.g.*, $< 0,05$ ou $0,025$ se considerarmos que medidas abaixo do limite de detecção serão definidas como o ponto médio entre $0,00$ e $0,05$);
- vi) a especificação do número de casas decimais (correspondente à precisão do instrumento de medida) - ver Notas de Capítulo 3 e 4;
- vii) quando possível, indicar limites (inferior ou superior) para facilitar a identificação de erros; por exemplo, o valor mínimo para aplicação num fundo de ações é de R\$ 2000,00;
- viii) mascarar (por meio de um código de identificação, por exemplo) informações sigilosas ou confidenciais como o nome de pacientes de ensaios clínicos.

Algumas recomendações para a construção da planilha de dados são:

- i) não utilizar limitadores de celas (*borders*) ou cores;
- ii) reservar a primeira linha para os rótulos das variáveis;
- iii) não esquecer uma coluna para a variável indicadora das unidades de investigação (evitar informações confidenciais como nomes de pacientes); essa variável é útil para a correção de erros identificados na análise estatística além de servir como elo de ligação entre planilhas com diferentes informações sobre as unidades de investigação;
- iv) escolher ponto ou vírgula para separação de casas decimais³;

³Embora a norma brasileira ABNT indique a vírgula para separação de casas decimais, a maioria dos pacotes computacionais utiliza o ponto com essa função; por essa razão é preciso tomar cuidado com esse detalhe na construção de planilhas a serem analisadas computacionalmente. Em geral adotaremos a norma brasileira neste texto.

- v) especificar o número de casas decimais (ver Nota de Capítulo 3);
- vi) formate as celas correspondentes a datas para manter a especificação uniforme (dd/mm/aaaa ou mm/dd/aaaa, por exemplo).

Exemplo 2.3: Na Tabela 2.2 apresentamos dados provenientes de um estudo em que o objetivo é avaliar a variação do peso (kg) de bezerros submetidos a uma determinada dieta entre 12 e 26 semanas após o nascimento.

Tabela 2.2: Peso de bezerros (kg)

| animal | Semanas após nascimento | | | | | | | |
|--------|-------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 12 | 14 | 16 | 18 | 20 | 22 | 24 | 26 |
| 1 | 54.1 | 65.4 | 75.1 | 87.9 | 98.0 | 108.7 | 124.2 | 131.3 |
| 2 | 91.7 | 104.0 | 119.2 | 133.1 | 145.4 | 156.5 | 167.2 | 176.8 |
| 3 | 64.2 | 81.0 | 91.5 | 106.9 | 117.1 | 127.7 | 144.2 | 154.9 |
| 4 | 70.3 | 80.0 | 90.0 | 102.6 | 101.2 | 120.4 | 130.9 | 137.1 |
| 5 | 68.3 | 77.2 | 84.2 | 96.2 | 104.1 | 114.0 | 123.0 | 132.0 |
| 6 | 43.9 | 48.1 | 58.3 | 68.6 | 78.5 | 86.8 | 99.9 | 106.2 |
| 7 | 87.4 | 95.4 | 110.5 | 122.5 | 127.0 | 136.3 | 144.8 | 151.5 |
| 8 | 74.5 | 86.8 | 94.4 | 103.6 | 110.7 | 120.0 | 126.7 | 132.2 |
| 9 | 50.5 | 55.0 | 59.1 | 68.9 | 78.2 | 75.1 | 79.0 | 77.0 |
| 10 | 91.0 | 95.5 | 109.8 | 124.9 | 135.9 | 148.0 | 154.5 | 167.6 |
| 11 | 83.3 | 89.7 | 99.7 | 110.0 | 120.8 | 135.1 | 141.5 | 157.0 |
| 12 | 76.3 | 80.8 | 94.2 | 102.6 | 111.0 | 115.6 | 121.4 | 134.5 |
| 13 | 55.9 | 61.1 | 67.7 | 80.9 | 93.0 | 100.1 | 103.2 | 108.0 |
| 14 | 76.1 | 81.1 | 84.6 | 89.8 | 97.4 | 111.0 | 120.2 | 134.2 |
| 15 | 56.6 | 63.7 | 70.1 | 74.4 | 85.1 | 90.2 | 96.1 | 103.6 |

Dados com essa natureza são chamados de dados longitudinais por terem a mesma característica (peso, no exemplo) medida ao longo de uma certa dimensão (tempo, no exemplo). De acordo com nossa especificação, há nove variáveis na Tabela 2.2, nomeadamente, Animal, Peso na 12a semana, Peso na 14a semana etc. Para efeito computacional, no entanto, esse tipo de dados deve ser disposto numa planilha com formato diferente (às vezes chamado de **formato longo**) como indicado na Figura 2.3. Nesse formato apropriado para dados longitudinais (ou mais geralmente, para medidas repetidas), há apenas três variáveis, a saber, Animal, Semana e Peso. Note que a mesma unidade amostral (animal) é repetida na primeira coluna para caracterizar a natureza longitudinal dos dados. Ele é especialmente adequado para casos em que as unidades de investigação são avaliadas em instantes diferentes.

Na Figura 2.4 apresentamos um exemplo em que o diâmetro da aorta (mm) de recém nascidos pré termo, com peso adequado (AIG) ou pequeno (PIG) para a idade gestacional foi avaliado até a 40a semana pós concepção. Note que o número de observações pode ser diferente para as diferentes unidades de investigação. Esse formato também é comumente utilizado para armazenar dados de **séries temporais**.

| animal | semana | peso |
|--------|--------|-------|
| 1 | 12 | 54.1 |
| 1 | 14 | 65.4 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 1 | 24 | 124.2 |
| 1 | 26 | 131.3 |
| 2 | 12 | 91.7 |
| 2 | 14 | 104.0 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 2 | 26 | 176.8 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 15 | 12 | 56.6 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 15 | 26 | 103.6 |

Figura 2.3: Planilha computacionalmente adequada para os dados do Exemplo 2.3.

| grupo | ident | sem | diam |
|-------|-------|-----|------|
| AIG | 2 | 30 | 7.7 |
| AIG | 2 | 31 | 8.0 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| AIG | 2 | 36 | 9.8 |
| AIG | 12 | 28 | 7.1 |
| AIG | 12 | 29 | 7.1 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| AIG | 12 | 30 | 9.4 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| PIG | 17 | 33 | 7.5 |
| PIG | 17 | 34 | 7.7 |
| PIG | 17 | 36 | 8.2 |
| PIG | 29 | 26 | 6.3 |
| PIG | 29 | 27 | 6.5 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| PIG | 29 | 31 | 7.2 |
| PIG | 29 | 32 | 7.2 |

Figura 2.4: Planilha com diâmetro da aorta (mm) observado em recém nascidos pré termo.

2.3 Construção de tabelas

A finalidade primordial de uma tabela é resumir a informação obtida dos dados. Sua construção deve permitir que o leitor entenda esse resumo sem a necessidade de recorrer ao texto. Algumas sugestões para construção de tabelas estão apresentadas a seguir.

- 1) Não utilize mais casas decimais do que o necessário para não mascarar as comparações de interesse. A escolha do número de casas decimais depende da precisão do instrumento de medida e/ou da importância prática dos valores representados. Para descrever a redução de peso após um mês de dieta, por exemplo, é mais conveniente representá-lo como 6 kg do que como 6,200 kg. Por outro lado, quanto mais casas decimais forem incluídas, mais difícil é a comparação. Por exemplo, compare a Tabela 2.3 com a Tabela 2.4.

Observe que calculamos porcentagens em relação ao total de cada linha. Poderíamos, também, ter calculado porcentagens em relação ao total de cada coluna ou porcentagens em relação ao total geral (50). Cada uma dessas maneiras pode ser útil em determinada situação; por exemplo, determinar se há alguma dependência entre as duas variáveis estado civil e bebida preferida, avaliada em 50 indivíduos.

Tabela 2.3: Número de alunos

| Estado civil | Bebida preferida | | | Total |
|-----------------|------------------|----------|-----------------|-----------|
| | não alcoólica | cerveja | outra alcoólica | |
| Solteiro | 19 (53%) | 7 (19%) | 10 (28%) | 36 (100%) |
| Casado | 3 (25%) | 4 (33%) | 5 (42%) | 12 (100%) |
| Outros | 1 (50%) | 0 (0%) | 1 (50%) | 2 (100%) |
| Total | 23 (46%) | 11 (22%) | 16 (32%) | 50 (100%) |

Tabela 2.4: Número de alunos (e porcentagens com duas casas decimais)

| Estado civil | Bebida preferida | | | Total |
|-----------------|------------------|-------------|-----------------|--------------|
| | não alcoólica | cerveja | outra alcoólica | |
| Solteiro | 19 (52,78%) | 7 (19,44%) | 10 (27,78%) | 36 (100,00%) |
| Casado | 3 (25,00%) | 4 (33,33%) | 5 (41,67%) | 12 (100,00%) |
| Outros | 1 (50,00%) | 0 (0,00%) | 1 (50,00%) | 2 (100,00%) |
| Total | 23 (46,00%) | 11 (22,00%) | 16 (32,00%) | 50 (100,00%) |

- 2) Proponha um título autoexplicativo e inclua as unidades de medida. O título deve dizer o que representam os números do corpo da tabela

e, em geral, não deve conter informações que possam ser obtidas diretamente dos rótulos de linhas e colunas. Compare o título da Tabela 2.5 com: Intenção de voto (%) por candidato para diferentes meses.

- 3) Inclua totais de linhas e/ou colunas para facilitar as comparações. É sempre bom ter um padrão contra o qual os dados possam ser avaliados.
- 4) Não utilize abreviaturas ou indique o seu significado no rodapé da tabela (*e.g.* Desvio padrão em vez de DP); se precisar utilize duas linhas para indicar os valores da coluna correspondente.
- 5) Ordene colunas e/ou linhas quando possível. Se não houver impedimentos, ordene-as segundo os valores, crescente ou decrescentemente. Compare a Tabela 2.5 com a Tabela 2.6.

Tabela 2.5: Intenção de voto (%)

| Candidato | janeiro | fevereiro | março | abril |
|-----------|---------|-----------|-------|-------|
| Nononono | 39 | 41 | 40 | 38 |
| Nananana | 20 | 18 | 21 | 24 |
| Nenenene | 8 | 15 | 18 | 22 |

- 6) Tente trocar a orientação de linhas e colunas para melhorar a apresentação. Em geral, é mais fácil fazer comparações ao longo das linhas do que das colunas.
- 7) Altere a disposição e o espaçamento das linhas e colunas para facilitar a leitura. Inclua um maior espaçamento a cada grupo de linhas e/ou colunas em tabelas muito extensas.
- 8) Não analise a tabela descrevendo-a, mas sim comentando as principais tendências sugeridas pelos dados. Por exemplo, os dados apresentados na Tabela 2.3 indicam que a preferência por bebidas alcoólicas é maior entre os alunos casados do que entre os solteiros; além disso, há indicações de que a cerveja é menos preferida que outras bebidas alcoólicas, tanto entre solteiros quanto entre casados.

Tabela 2.6: Intenção de voto (%)

| Candidato | janeiro | fevereiro | março | abril |
|-----------|---------|-----------|-------|-------|
| Nananana | 20 | 18 | 21 | 24 |
| Nononono | 39 | 41 | 40 | 38 |
| Nenenene | 8 | 15 | 18 | 22 |

2.4 Construção de gráficos

A seguir apresentamos algumas sugestões para a construção de gráficos, cuja finalidade é similar àquela de tabelas, ou seja, resumir a informação obtida dos dados; por esse motivo, convém optar pelo resumo em forma de tabela ou de gráfico.

- 1) Proponha um título autoexplicativo.
- 2) Escolha o tipo de gráfico apropriado para os dados.
- 3) Rotule os eixos apropriadamente, incluindo unidades de medida.
- 4) Procure escolher adequadamente as escalas dos eixos para não distorcer a informação que se pretende transmitir. Se o objetivo for comparar as informações de dois os mais gráficos, use a mesma escala.
- 5) Inclua indicações de “quebra” nos eixos para mostrar que a origem (zero) está deslocada.
- 6) Altere as dimensões do gráfico até encontrar o formato adequado.
- 7) Inclua uma legenda.
- 8) Tome cuidado com a utilização de áreas para comparações, pois elas variam com o quadrado das dimensões lineares.
- 9) Não exagere nas ilustrações que acompanham o gráfico para não o “poluir” visualmente, mascarando seus aspectos mais relevantes.

2.5 Notas de capítulo

1) Bancos de dados

Projetos que envolvem grandes quantidades de dados, em geral provenientes de diversas fontes e com diversos formatos necessitam a construção de bancos de dados (*data warehouses*), cuja finalidade é prover espaço suficiente para sua armazenagem, garantir sua segurança, permitir a inclusão por meio de diferentes meios e proporcionar uma interface que permita a recuperação da informação de forma estruturada para uso por diferentes pacotes de análise estatística.

Bancos de dados têm se tornado cada vez maiores e mais difíceis de administrar em função da crescente disponibilidade de sistemas analíticos em que os dados são oriundos de diferentes sistemas de transações. Em geral, esses bancos de dados envolvem a participação de profissionais de áreas e instituições diversas. Por esse motivo, os resultados de sua implantação são lentos e às vezes inexistentes. Conforme pesquisa elaborada pelo Grupo Gartner (2005), 50% dos projetos de bancos de dados tendem a falhar por problemas em sua construção. Uma das causas para esse problema, é o longo tempo necessário para o seu desenvolvimento, o que gera uma defasagem na sua operacionalidade. Muitas vezes, algumas de suas funcionalidades ficam logo obsoletas enquanto novas demandas estão sendo requisitadas. Duas razões para isso são a

falta de sincronização entre os potenciais usuários e os desenvolvedores do banco de dados e o fato de que técnicas tradicionais usadas nesse desenvolvimento não permitem a rápida disponibilidade de suas funções. Para contornar esses problemas, sugere-se uma arquitetura modular cíclica em que o foco inicial é a criação dos principais elementos do sistema, deixando os detalhes das características menos importantes para uma segunda fase em que o sistema se torna operacional. No Módulo 1, são projetados os sistemas para inclusão e armazenagem dos dados provenientes de diferentes fontes. A detecção, correção de possíveis erros e homogeneização dos dados é realizada no Módulo 2. Como esperado, dados obtidos por diferentes componentes do projeto geralmente têm codificação distinta para os mesmos atributos, o que requer uniformização e possível indicação de incongruências que não podem ser corrigidas. No Módulo 3, os dados tratados no módulo anterior são atualizados e inseridos numa base de dados históricos, devidamente padronizada. Nesse módulo, a integridade dos dados recém obtidos é avaliada comparativamente aos dados já existentes para garantir a consistência entre eles. O foco do Módulo 4 é a visualização, análise e exportação dos dados. Esse módulo contém as ferramentas que permitem a geração de planilhas de dados apropriadas para a análise estatística.

Detalhes sobre a construção de bancos de dados podem ser encontrados em Rainardi (2008), entre outros. Para avaliar as dificuldades de construção de um banco de dados num projeto complexo, o leitor poderá consultar Ferreira et al. (2017).

2) Definição operacional de variáveis

Para efeito de comparação entre estudos, a definição das variáveis envolvidas requer um cuidado especial. Por exemplo em estudos cujo objetivo é avaliar a associação entre renda e gastos com lazer, é preciso especificar se a variável “Renda” se refere à renda familiar total ou *per capita*, se benefícios como vale transporte, vale alimentação ou bônus estão incluídos etc. Num estudo que envolva a variável “Pressão arterial”, um exemplo de definição operacional é: “média de 60 medidas com intervalo de 1 minuto da pressão arterial diastólica (mmHg) obtida no membro superior direito apoiado à altura do peito com aparelho automático de método oscilométrico (Dixtal, São Paulo, Brasil)”. Num estudo cujo objetivo é comparar diferentes modelos de automóveis com relação ao consumo de combustível, uma definição dessa variável poderia ser “número de quilômetros percorridos em superfície plana durante 15 minutos em velocidade constante de 50 km/h e sem carga por litro de gasolina comum (km/L).”

Neste texto, não consideraremos definições detalhadas por razões didáticas.

3) Ordem de grandeza, precisão e arredondamento de dados

quantitativos

A precisão de dados quantitativos contínuos está relacionada com a capacidade de os instrumentos de medida distinguirem entre valores próximos na escala de observação do atributo de interesse. O número de dígitos colocados após a vírgula indica a precisão associada à medida que estamos considerando. O volume de um certo recipiente expresso como 0,740 L implica que o instrumento de medida pode detectar diferenças da ordem de 0,001 L (= 1 mL, ou seja 1 mililitro); se esse volume for expresso na forma 0,74 L, a precisão correspondente será de 0,01 L (= 1 cL, ou seja 1 centilitro).

Muitas vezes, em função dos objetivos do estudo em questão, a expressão de uma grandeza quantitativa pode não corresponder à precisão dos instrumentos de medida. Embora com uma balança suficientemente precisa, seja possível dizer que o peso de uma pessoa é de 89,230 kg, para avaliar o efeito de uma dieta, o que interessa saber é a ordem de grandeza da perda de peso após três meses de regime, por exemplo. Nesse caso, saber se a perda de peso foi de 10,230 kg ou de 10,245 kg é totalmente irrelevante. Para efeitos práticos, basta dizer que a perda foi da ordem de 10 kg. A ausência de casas decimais nessa representação indica que o próximo valor na escala de interesse seria 11 kg, embora todos os valores intermediários com unidades de 1 g sejam mensuráveis.

Para efeitos contábeis, por exemplo, convém expressar o aumento das exportações brasileiras num determinado período como R\$ 1 657 235 458,29; no entanto, para efeitos de comparação com outros períodos, é mais conveniente dizer que o aumento das exportações foi da ordem de 1,7 bilhões de reais. Note que nesse caso, as grandezas significativas são aquelas da ordem de 0,1 bilhão de reais (= 100 milhões de reais).

Nesse processo de transformação de valores expressos com uma determinada precisão para outros com a precisão de interesse é preciso arredondar os números correspondentes. Em termos gerais, se o dígito a ser eliminado for 0, 1, 2, 3 ou 4, o dígito precedente não deve sofrer alterações e se o dígito a ser eliminado for 5, 6, 7, 8 ou 9, o dígito precedente deve ser acrescido de uma unidade. Por exemplo, se desejarmos reduzir para duas casas decimais números originalmente expressos com três casas decimais, 0,263 deve ser transformado para 0,26 e 0,267 para 0,27. Se desejarmos uma redução mais drástica para apenas uma casa decimal, tanto 0,263 quanto 0,267 devem ser transformados para 0,3.

É preciso tomar cuidado com essas transformações quando elas são aplicadas a conjuntos de números cuja soma seja prefixada (porcentagens, por exemplo) pois elas podem introduzir erros cumulativos. Discutiremos esse problema ao tratar de porcentagens e tabulação de dados. É interessante lembrar que a representação decimal utilizada nos EUA e nos países da comunidade britânica substitui a vírgula por

um ponto. Cuidados devem ser tomados ao se fazerem traduções, embora em alguns casos, esse tipo de representação já tenha sido adotada no cotidiano (veículos com motor 2.0, por exemplo, são veículos cujo volume dos cilindros é de 2,0 L).

Finalmente, convém mencionar que embora seja conveniente apresentar os resultados de uma análise com o número de casas decimais conveniente, os cálculos necessários para sua obtenção devem ser realizados com maior precisão para evitar propagação de erros. O arredondamento deve ser concretizado ao final dos cálculos.

4) **Proporções e porcentagens**

Uma proporção é um quociente utilizado para comparar duas grandezas através da adoção de um padrão comum. Se 31 indivíduos, num total de 138, são fumantes, dizemos que a proporção de fumantes entre esses 138 indivíduos é de 0,22 ($= 31/138$). O denominador desse quociente é chamado de base e a interpretação associada à proporção é que 31 está para a base 138 assim como 0,22 está para a base 1,00. Essa redução a uma base fixa permite a comparação com outras situações em que os totais são diferentes. Consideremos, por exemplo, um outro conjunto de 77 indivíduos em que 20 são fumantes; embora o número de fumantes não seja comparável com o do primeiro grupo, dado que as bases são diferentes, pode-se dizer que a proporção de fumantes desse segundo grupo, 0,26 ($= 20/77$) é maior que aquela associada ao primeiro conjunto.

Porcentagens, nada mais são do que proporções multiplicadas por 100, o que equivale a fazer a base comum igual a 100. No exemplo acima, podemos dizer que a porcentagem de fumantes é de 22% ($= 100 \times 31/138$) no primeiro grupo e de 26% no segundo. Para efeito da escolha do número de casas decimais, note que a comparação entre essas duas porcentagens é mais direta do que se considerássemos suas expressões mais precisas (com duas casas decimais), ou seja 22,46% contra 25,97%.

A utilização de porcentagens pode gerar problemas de interpretação em algumas situações. A seguir consideramos algumas delas. Se o valor do IPTU de um determinado imóvel cobrado foi de R\$ 500,00 em 1998 e de R\$ 700,00 em 1999, podemos dizer que o valor do IPTU em 1999 é 140% ($= 100 \times 700/500$) do valor em 1998, mas o aumento foi de 40% [$= 100 \times (700-500)/500$]. Se o preço de uma determinada ação varia de R\$ 22,00 num determinado instante para R\$ 550,00 um ano depois, podemos dizer que o aumento de seu preço foi de 2400% [$= 100 \times (550-22)/22$] nesse período. É difícil interpretar porcentagens “grandes” como essa. Nesse caso é melhor dizer que o preço dessa ação é 25 ($= 550/22$) vezes seu preço há um ano. Porcentagens calculadas a partir de bases de pequena magnitude podem induzir conclusões inadequadas. Dizer que 43% dos participantes de uma pesquisa preferem

um determinado produto tem uma conotação diferente se o cálculo for baseado em 7 ou em 120 entrevistados. É sempre conveniente explicitar a base relativamente à qual se estão fazendo os cálculos.

Para se calcular uma porcentagem global a partir das porcentagens associadas às partes de uma população, é preciso levar em conta sua composição. Suponhamos que numa determinada faculdade, 90% dos alunos que usam transporte coletivo sejam favoráveis à cobrança de estacionamento no campus e que apenas 20% dos alunos que usam transporte individual o sejam. A porcentagem de alunos dessa faculdade favoráveis à cobrança do estacionamento só será igual à média aritmética dessas duas porcentagens, ou seja 55%, se a composição da população de alunos for tal que metade usa transporte coletivo e metade não. Se essa composição for de 70% e 30% respectivamente, a porcentagem de alunos favoráveis à cobrança de estacionamento será de 69% ($= 0,9 \times 70\% + 0,20 \times 30\%$ ou seja, 90% dos 70% que usam transporte coletivo + 20% dos 30% que utilizam transporte individual). Para evitar confusão, ao se fazer referência a variações, convém distinguir porcentagem e ponto percentual. Se a porcentagem de eleitores favoráveis a um determinado candidato aumentou de 14% antes para 21% depois da propaganda na televisão, pode-se dizer que a preferência eleitoral por esse candidato aumentou 50% [$= 100 \times (21-14)/14$] ou foi de 7 pontos percentuais (e não de 7%). Note que o que diferencia esses dois enfoques é a base em relação à qual se calculam as porcentagens; no primeiro caso, essa base é a porcentagem de eleitores favoráveis ao candidato antes da propaganda (14%) e no segundo caso é o total (não especificado) de eleitores avaliados na amostra (favoráveis ou não ao candidato).

Uma porcentagem não pode diminuir mais do que 100%. Se o preço de um determinado produto decresce de R\$ 3,60 para R\$ 1,20, a diminuição de preço é de 67% [$= 100 \times (3,60 - 1,20)/3,60$] e não de 200% [$= 100 \times (3,60 - 1,20)/1,20$]. Aqui também, o importante é definir a base: a ideia é comparar a variação de preço (R\$ 2,40) com o preço inicial do produto (R\$ 3,60) e não com o preço final (R\$ 1,20). Na situação limite, em que o produto é oferecido gratuitamente, a variação de preço é de R\$ 3,60; conseqüentemente, a diminuição de preço limite é de 100%. Note que se estivéssemos diante de um aumento de preço de R\$ 1,20 para R\$ 3,60, diríamos que o aumento foi de 200% [$= 100 \times (3,60 - 1,20)/1,20$].

2.6 Exercícios

- 1) O objetivo de um estudo da Faculdade de Medicina da USP foi avaliar a associação entre a quantidade de morfina administrada a pacientes com dores intensas provenientes de lesões medulares ou radiculares e a dosagem dessa substância em seus cabelos. Três medidas foram reali-

zadas em cada paciente, a primeira logo após o início do tratamento e as demais após 30 e 60 dias. Detalhes podem ser obtidos no documento intitulado “morfina.doc”, disponível no sítio

http:

[//www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/morfina.doc](http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/morfina.doc).

A planilha morfina.xls, disponível no sítio

http:

[//www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/morfina.xls](http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/morfina.xls),

foi entregue ao estatístico para análise e contém resumos de características demográficas além dos dados do estudo. Organize-a, construindo tabelas apropriadas para descrever essas características demográficas e uma planilha num formato apropriado para análise estatística.

- 2) A Figura 2.5 foi extraída de um relatório do Centro de Estatística Aplicada do IME/USP [ver Giampaoli et al. (2008) para detalhes]. Critique-a e reformule-a para facilitar sua leitura.

Sheet1

| Subprefeitura | Observado | Ajustado | Nota SP |
|-------------------------|-----------|----------|---------|
| Aricanduva | 0,586 | 0,588 | 0,396 |
| Butantã | 0,483 | 0,468 | 0,334 |
| Campo Limpo | 0,484 | 0,526 | 0,362 |
| Casa Verde/Cachoeirinha | 0,558 | 0,554 | 0,382 |
| Cidade Tiradentes | 0,543 | 0,540 | 0,369 |
| Freguesia/Brasilândia | 0,545 | 0,540 | 0,371 |
| Ipiranga | 0,593 | 0,539 | 0,368 |
| Itaim Paulista | 0,566 | 0,557 | 0,374 |
| Itaquera | 0,396 | 0,563 | 0,383 |
| Jabaquara | 0,533 | 0,533 | 0,364 |
| M' Boi Mirim | 0,566 | 0,552 | 0,368 |
| São Mateus | 0,523 | 0,511 | 0,354 |
| São Miguel | 0,601 | 0,583 | 0,395 |
| Socorro | 0,601 | 0,523 | 0,360 |
| V, Prudente/Sapopemba | 0,648 | 0,620 | 0,413 |

Figura 2.5: Tabela comparativa das notas médias da avaliação das subprefeituras no modelo padronizado para a escala [0,1]

- 3) Utilize as sugestões para construção de planilhas apresentadas na Seção 2.2 com a finalidade de preparar os dados dos diferentes conjuntos do arquivo MorettinSingerDados.xls para análise estatística.
- 4) A Figura 2.6 contém uma planilha encaminhada pelos investigadores responsáveis por um estudo sobre AIDS para análise estatística. Organize-a de forma a permitir sua análise por meio de um pacote computacional como o R.

| Grupo I | Tempo de | | | Ganho de Peso |
|-----------------|--------------------|---------------------|------------|------------------------|
| registro | Diagnóstico | DST | MAC | por Semana |
| 2847111D | pré natal | não | Pílula | 11Kg em 37 semanas |
| 3034048F | 6 meses | não | pílula | ? |
| 3244701J | 1 ano | não | Condon | ? |
| 2943791B | pré natal | não | não | 8 Kg em 39 semanas |
| 3000327F | 4 anos | condiloma/ sífilis | não | 9Kg em 39 semanas |
| 3232893D | 1 ano | não | DIU | 3Kg em 39 semanas |
| 3028772E | 3 anos | não | não | 3 kg em 38 semanas |
| 3240047G | pré natal | não | pílula | 9 Kg em 38 semanas |
| 3017222G | | HPV | CONDON | falta exame clínico |
| 3015834J | 2 anos | não | condon | 14 Kg em 40 semanas |
| Grupo II | Tempo de | | | Ganho de Peso |
| registro | Diagnóstico | DST | MAC | por Semana |
| 3173611E | 3 meses | abscesso ovariano | condon | 15 Kg em 40 semanas |
| 3296159D | pré natal | não | condon | 0 Kg em ? semanas |
| 3147820D1 | 2 anos | não | sem dados | 4 Kg em 37 semanas |
| 3274750K | 3 anos | não | condon | 8 Kg em 38 semanas |
| 3274447H | pré natal | sífilis com 3 meses | condon | |
| 2960066D | 5 anos | não | ? | 13 Kg em 36 semanas |
| 3235727J | 7 anos | não | Condon | (-) 2 Kg em 38 semanas |
| 3264897E | | condiloma | condon | nenhum Kg |
| 3044120J | 5 anos | HPV | | 3 Kg em 39 semanas 1 |

Figura 2.6: Planilha com dados de um estudo sobre AIDS.

- 5) Num estudo planejado para avaliar o consumo médio de combustível de veículos em diferentes velocidades foram utilizados 4 automóveis da marca A e 3 automóveis da marca B selecionados ao acaso das respectivas linhas de produção. O consumo (em L/km) de cada um dos 7 automóveis foi observado em 3 velocidades diferentes (40 km/h, 80 km/h e 110 km/h). Construa uma tabela apropriada para a coleta e análise estatística dos dados, rotulando-a adequadamente.
- 6) A planilha apresentada na Figura 2.7 contém dados de um estudo em que o limiar auditivo foi avaliado nas orelhas direita (OD) e esquerda (OE) de 13 pacientes em 3 ocasiões (Limiar, Teste 1 e Teste 2). Reformate-a segundo as recomendações da Seção 2.3.
- 7) Preencha a ficha de inscrição do Centro de Estatística Aplicada (www.ime.usp.br/~cea) com as informações de um estudo em que você está envolvido.

| Limiar | Teste1 | Teste2 |
|------------------|-------------|---------------|
| OD 50 / OE 55 | OD/OE 50 | OD/OE 80% |
| OD 41 /OE 40 | OD 45/OE 50 | OD 68% OE 80% |
| OD/OE 41,25 | OD/OE 45 | OD 64% OE 72% |
| OD 45/OE 43,75 | OD 60/OE 50 | OD 76%/OE 88% |
| OD51,25/ OE47,5 | OD/OE 50 | OD 80%/OE 88% |
| OD45/ OE 52,5 | OD/OE 50 | OD 84%/OE 96% |
| OD 52,5/OE 50 | OD55/OE45 | OD 40%/OE 28% |
| OD 42,15/OE48,75 | OD 40/OE 50 | OD80%/OE76% |
| OD50/ OE 48,75 | OD/OE 50 | OD 72%/OE 80% |
| OD47,5/OE46,25 | OD/OE 50 | OD/OE 84% |
| OD55/OE 56,25 | OD55/OE60 | OD80%/OE 84% |
| OD/OE 46,25 | OD40/OE35 | OD72%/OE 84% |
| OD 50/OE 47,5 | OD/OE45 | OD/OE 76% |

Figura 2.7: Limiar auditivo de pacientes observados em 3 ocasiões.

Análise de dados de uma variável

3.1 Introdução

Neste capítulo consideraremos a análise descritiva de dados provenientes da observação de uma variável. As técnicas utilizadas podem ser empregadas tanto para dados provenientes de uma população quanto para dados oriundos de uma amostra.

A ideia de uma análise descritiva de dados é tentar responder as seguintes questões:

- i) qual a frequência com que cada valor (ou intervalo de valores) aparece no conjunto de dados ou seja qual a distribuição de frequências dos dados?
- ii) quais são alguns valores típicos do conjunto de dados, como mínimo e máximo?
- iii) qual seria um valor para representar a posição (ou localização) central do conjunto de dados?
- iv) qual seria uma medida da variabilidade ou dispersão dos dados?
- v) existem valores atípicos ou discrepantes (*outliers*) no conjunto de dados?
- vi) os dados podem ser considerados simétricos?

Nesse contexto, um dos objetivos da análise descritiva é organizar e exibir os dados de maneira apropriada e para isso utilizamos

- i) gráficos e tabelas;
- i) medidas para resumo de dados.

As técnicas empregadas na análise descritiva dependem do tipo de variáveis que compõem o conjunto de dados em questão. Uma possível classificação de variáveis está representada na Figura 3.1.

Variáveis qualitativas são aquelas que indicam um atributo da unidade de investigação (sexo, por exemplo). Elas podem ser ordinais, quando há

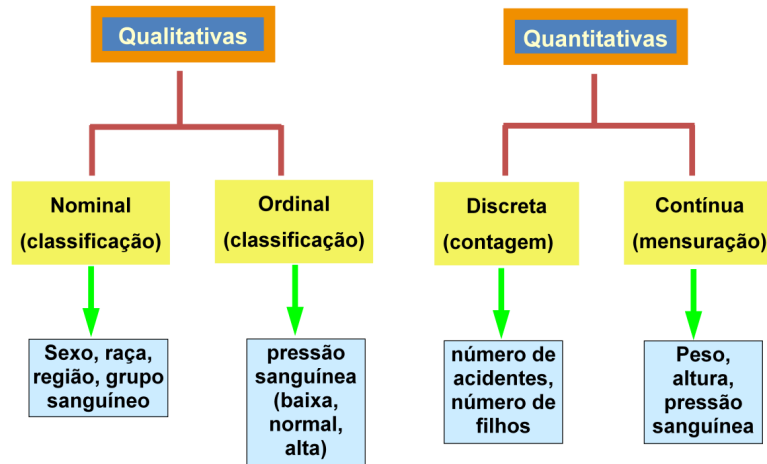


Figura 3.1: Classificação de variáveis.

uma ordem nas diferentes categorias do atributo (tamanho de uma escola - pequena, média ou grande, por exemplo) ou nominais, quando não há essa ordem (região em que está localizada uma empresa: norte, sul, leste ou oeste, por exemplo).

Variáveis quantitativas são aquelas que exibem valores numéricos associados à unidade de investigação (peso, por exemplo). Elas podem ser discretas, quando assumem valores no conjunto dos números naturais (número de gestações de uma paciente) ou contínuas, quando assumem valores no conjunto dos números reais (tempo gasto por um atleta para percorrer 100 m, por exemplo). Ver Nota de Capítulo 1.

3.2 Distribuições de frequências

Exemplo 3.1: Consideremos um conjunto de dados como aquele apresentado na Tabela 3.1 obtido de um questionário respondido por 50 alunos de uma disciplina ministrado na Fundação Getúlio Vargas em São Paulo. Os dados estão disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/ceagfgv.xls>.

Em geral, a primeira tarefa de uma análise estatística de um conjunto de dados consiste em resumi-los. As técnicas disponíveis para essa finalidade dependem do tipo de variáveis envolvidas, tema que discutiremos a seguir.

3.2.1 Variáveis qualitativas

Uma tabela contendo as frequências (absolutas e/ou relativas) de unidades de investigação para cada categoria do atributo avaliado por uma variável qualitativa é chamada de distribuição de frequências dessa variável. As

Tabela 3.1: Dados de um estudo realizado na FGV

| ident | Salário (R\$) | Fluência inglês | Anos de formado | Estado civil | Número de filhos | Bebida preferida |
|--------------|----------------------|------------------------|------------------------|---------------------|-------------------------|-------------------------|
| 1 | 3500 | fluyente | 12.0 | casado | 1 | outra alcoólica |
| 2 | 1800 | nenhum | 2.0 | casado | 3 | não alcoólica |
| 3 | 4000 | fluyente | 5.0 | casado | 1 | outra alcoólica |
| 4 | 4000 | fluyente | 7.0 | casado | 3 | outra alcoólica |
| 5 | 2500 | nenhum | 11.0 | casado | 2 | não alcoólica |
| 6 | 2000 | fluyente | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 7 | 4100 | fluyente | 4.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 8 | 4250 | algum | 10.0 | casado | 2 | cerveja |
| 9 | 2000 | algum | 1.0 | solteiro | 2 | cerveja |
| 10 | 2400 | algum | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 11 | 7000 | algum | 15.0 | casado | 1 | não alcoólica |
| 12 | 2500 | algum | 1.0 | outros | 2 | não alcoólica |
| 13 | 2800 | fluyente | 2.0 | solteiro | 1 | não alcoólica |
| 14 | 1800 | algum | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 15 | 3700 | algum | 10.0 | casado | 4 | cerveja |
| 16 | 1600 | fluyente | 1.0 | solteiro | 2 | cerveja |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 26 | 1000 | algum | 1.0 | solteiro | 1 | outra alcoólica |
| 27 | 2000 | algum | 5.0 | solteiro | 0 | outra alcoólica |
| 28 | 1900 | fluyente | 2.0 | solteiro | 0 | outra alcoólica |
| 29 | 2600 | algum | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 30 | 3200 | | 6.0 | casado | 3 | cerveja |
| 31 | 1800 | algum | 1.0 | solteiro | 2 | outra alcoólica |
| 32 | 3500 | | 7.0 | solteiro | 1 | cerveja |
| 33 | 1600 | algum | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 34 | 1700 | algum | 4.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 35 | 2000 | fluyente | 1.0 | solteiro | 2 | não alcoólica |
| 36 | 3200 | algum | 3.0 | solteiro | 2 | outra alcoólica |
| 37 | 2500 | fluyente | 2.0 | solteiro | 2 | outra alcoólica |
| 38 | 7000 | fluyente | 10.0 | solteiro | 1 | não alcoólica |
| 39 | 2500 | algum | 5.0 | solteiro | 1 | não alcoólica |
| 40 | 2200 | algum | 0.0 | casado | 0 | cerveja |
| 41 | 1500 | algum | 0.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 42 | 800 | algum | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 43 | 2000 | fluyente | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 44 | 1650 | fluyente | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 45 | | algum | 1.0 | solteiro | 0 | outra alcoólica |
| 46 | 3000 | algum | 7.0 | solteiro | 0 | cerveja |
| 47 | 2950 | fluyente | 5.5 | outros | 1 | outra alcoólica |
| 48 | 1200 | algum | 1.0 | solteiro | 0 | não alcoólica |
| 49 | 6000 | algum | 9.0 | casado | 2 | outra alcoólica |
| 50 | 4000 | fluyente | 11.0 | casado | 3 | outra alcoólica |

Tabelas 3.2 e 3.3 por exemplo, representam respectivamente as distribuições de frequências das variáveis “Bebida preferida” e “Fluência em inglês” para os dados do Exemplo 3.1.

Tabela 3.2: Distribuição de frequências para a variável Bebida preferida correspondente ao Exemplo 3.1

| Bebida preferida | Frequência observada | Frequência relativa (%) |
|------------------|----------------------|-------------------------|
| não alcoólica | 23 | 46 |
| cerveja | 11 | 22 |
| outra alcoólica | 16 | 32 |
| Total | 50 | 100 |

Tabela 3.3: Distribuição de frequências para a variável Fluência em inglês correspondente ao Exemplo 3.1

| Fluência em inglês | Frequência observada | Frequência relativa (%) | Frequência acumulada (%) |
|--------------------|----------------------|-------------------------|--------------------------|
| nenhuma | 2 | 4 | 4 |
| alguma | 26 | 54 | 58 |
| fluyente | 20 | 42 | 100 |
| Total | 48 | 100 | |

Obs: dois participantes não forneceram informação

Note que para variáveis qualitativas ordinais pode-se acrescentar uma coluna com as frequências relativas acumuladas que são úteis na sua análise. Por exemplo a partir da última coluna da Tabela 3.3 pode-se afirmar que cerca de 60% dos alunos que forneceram a informação tem no máximo alguma fluência em inglês.

O resumo exibido nas tabelas com distribuições de frequências pode ser representado por meio de gráficos de barras ou gráficos do tipo pizza (ou torta). Exemplos correspondentes às variáveis “Bebida preferida” e “Fluência em inglês” são apresentados nas Figuras 3.2, 3.3 e 3.4.

Note que na Figura 3.2 as barras podem ser colocadas em posições arbitrárias; na Figura 3.4, convém colocá-las de acordo com a ordem natural das categorias.

3.2.2 Variáveis quantitativas

Se utilizássemos o mesmo critério adotado para variáveis qualitativas na construção de distribuições de frequências de variáveis quantitativas (especialmente no caso de variáveis contínuas), em geral obteríamos tabelas

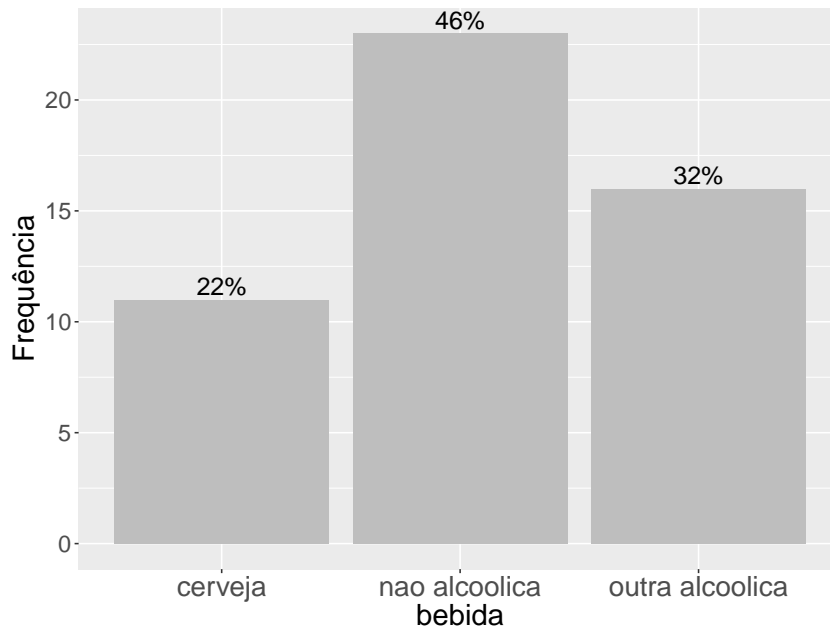


Figura 3.2: Gráfico de barras para Bebida preferida.

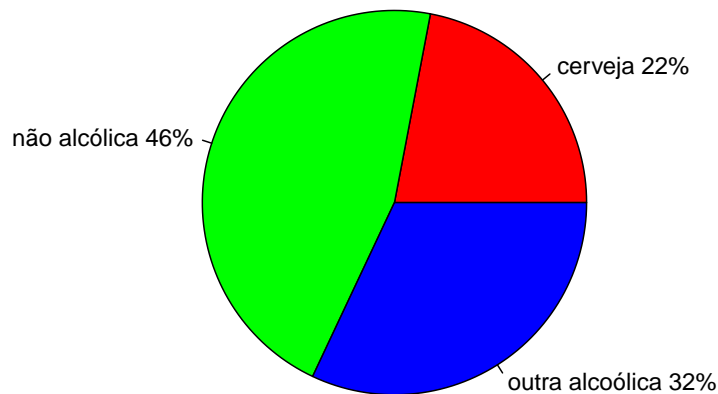


Figura 3.3: Gráfico tipo pizza para Bebida preferida.

com frequência muito pequena (em geral 1) para as diversas categorias, deixando de atingir o objetivo de resumir os dados. Para contornar o problema, agrupam-se os valores das variáveis em classes e obtêm-se as frequências em cada classe.

Uma possível distribuição de frequências para a variável “Salário” correspondente ao Exemplo 3.1 está apresentada na Tabela 3.4.

Alternativamente a tabelas com o formato da Tabela 3.4 vários gráficos podem ser utilizados para representar a distribuição de frequências de um

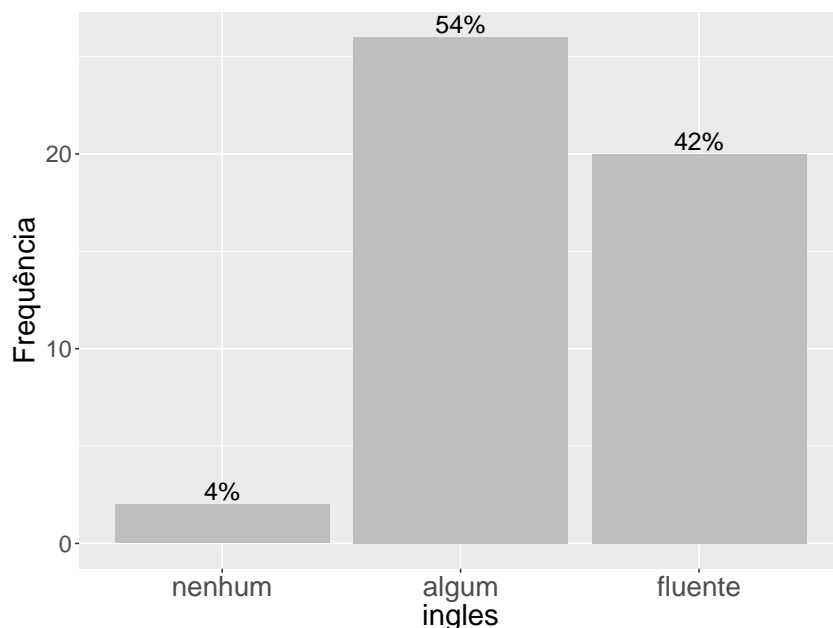


Figura 3.4: Gráfico de barras para Fluência em inglês.

Tabela 3.4: Distribuição de frequências para a variável Salário correspondente ao Exemplo 3.1

| Classe de salário (R%) | Frequência observada | Frequência relativa (%) | Frequência relativa acumulada (%) |
|------------------------|----------------------|-------------------------|-----------------------------------|
| 0 — 1500 | 6 | 12,2 | 12,2 |
| 1500 — 3000 | 27 | 55,1 | 67,3 |
| 3000 — 4500 | 12 | 24,5 | 91,8 |
| 4500 — 6000 | 2 | 4,1 | 95,9 |
| 6000 — 7500 | 2 | 4,1 | 100,0 |
| Total | 49 | 100,0 | 100,0 |

Obs: um dos participantes não informou o salário.

conjunto de dados. Os mais utilizados são apresentados a seguir.

Gráfico de dispersão unidimensional (*dotplot*)

Neste gráfico representamos por pontos os valores x_1, \dots, x_n ao longo de uma reta provida de uma escala. Valores repetidos são empilhados, de modo que possamos ter uma ideia de sua distribuição. O gráfico de dispersão unidimensional para a variável Salário do Exemplo 3.1 está representado na Figura 3.5.

Gráfico Ramo e Folhas (*Stem and leaf*)

Um procedimento alternativo para reduzir um conjunto de dados sem

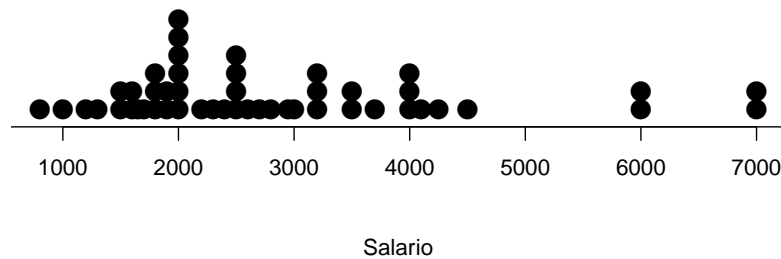


Figura 3.5: Gráfico de dispersão unidimensional para a variável Salário (Exemplo 3.1).

perder muita informação sobre eles consiste na construção de um gráfico chamado ramo-e-folhas. Não há regras fixas para construí-lo, mas a ideia básica é dividir cada observação em duas partes: o *ramo*, colocado à esquerda de uma linha vertical, e a *folha*, colocada à direita.

Considere a variável “Salário” do Exemplo 3.1. Para cada observação, podemos considerar o ramo como a parte inteira e a folha como a parte decimal. Assim fazendo, é fácil ver que obtemos muitos ramos, essencialmente tantos quantos são os dados, e não teríamos alcançado o objetivo de resumi-los. Outra possibilidade é arredondar os dados para números inteiros e considerar o primeiro dígito como o ramo e o segundo como folha, no caso de dezenas; os dois primeiros dígitos como o ramo e o terceiro como folha, para as centenas, etc. O gráfico correspondente está apresentado na Figura 3.6. Pelo gráfico podemos avaliar a forma da distribuição das observações; em particular, vemos que há quatro valores atípicos, nomeadamente, dois iguais a R\$ 6000 (correspondentes aos alunos 22 e 49) e dois iguais a R\$ 7000 (correspondentes aos alunos 11 e 38) respectivamente.

Histograma

O histograma é um gráfico construído a partir da distribuição de frequências dos dados e é composto de retângulos contíguos cuja área total é em geral normalizada para ter valor unitário. A **área** de cada retângulo corresponde à frequência relativa associada à classe definida pela sua base.

Um histograma correspondente à distribuição de frequências indicada na Tabela 3.4 está representado na Figura 3.7.

Mais formalmente, dados os valores x_1, \dots, x_n de uma variável quantitativa X , podemos construir uma tabela contendo

- a) as frequências absolutas n_k , $k = 1, \dots, K$, que correspondem aos números de elementos cujos valores pertencem às classes $k = 1, \dots, K$;
- b) as frequências relativas $f_k = n_k/n$, $k = 1, \dots, K$, que são as proporções de elementos cujos valores pertencem às classes $k = 1, \dots, K$;

1 | 2: representa 1200
 unidade da folha: 100
 n: 49

```

0 | 8
1 | 023
1 | 55666788899
2 | 000000234
2 | 55556789
3 | 0222
3 | 557
4 | 00012
4 | 5
5 |
5 |
6 | 00
6 |
7 | 00

```

Figura 3.6: Gráfico ramo-e-folhas para a variável Salário (R\$).

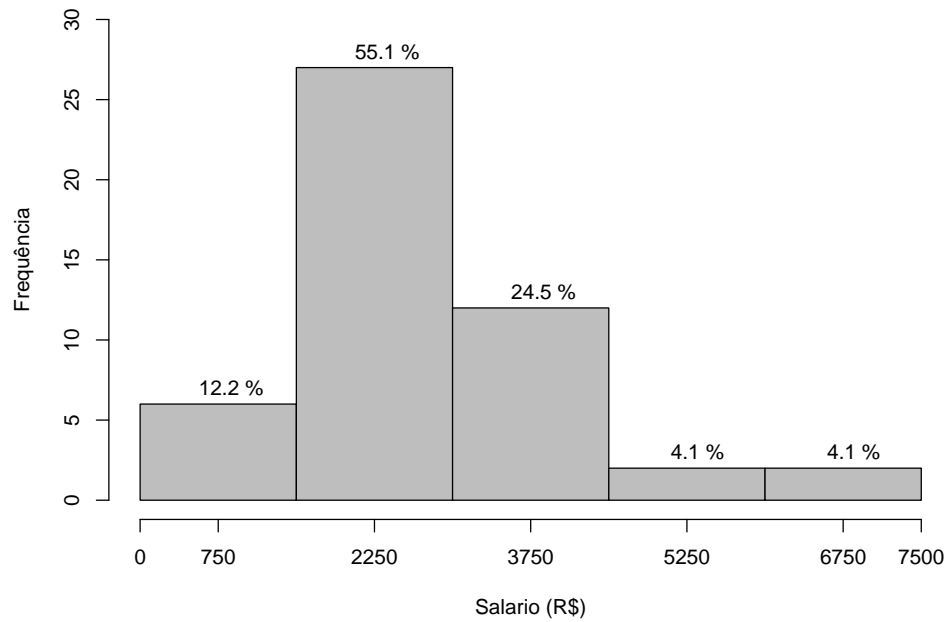


Figura 3.7: Histograma para a variável salário (R\$).

- c) as densidades de frequência $d_k = f_k/h_k$, $k = 1, \dots, K$, que representam as proporções de valores pertencentes às classes $k = 1, \dots, K$ por unidade de comprimento h_k de cada classe.

Exemplo 3.2: Os dados correspondentes à população¹ (em 10000 habitantes) de 30 municípios brasileiros (IBGE, 1996) estão dispostos na Tabela 3.5. Os dados estão disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/municipios.xls>

Tabela 3.5: População de 30 municípios brasileiros (10000 habitantes)

| Município | População | Município | População |
|---------------------|-----------|---------------------------|-----------|
| São Paulo (SP) | 988.8 | Nova Iguaçu (RJ) | 83.9 |
| Rio de Janeiro (RJ) | 556.9 | São Luís (MA) | 80.2 |
| Salvador (BA) | 224.6 | Maceió (AL) | 74.7 |
| Belo Horizonte (MG) | 210.9 | Duque de Caxias (RJ) | 72.7 |
| Fortaleza (CE) | 201.5 | S. Bernardo do Campo (SP) | 68.4 |
| Brasília (DF) | 187.7 | Natal (RN) | 66.8 |
| Curitiba (PR) | 151.6 | Teresina (PI) | 66.8 |
| Recife (PE) | 135.8 | Osasco (SP) | 63.7 |
| Porto Alegre (RS) | 129.8 | Santo André (SP) | 62.8 |
| Manaus (AM) | 119.4 | Campo Grande (MS) | 61.9 |
| Belém (PA) | 116.0 | João Pessoa (PB) | 56.2 |
| Goiânia (GO) | 102.3 | Jaboatão (PE) | 54.1 |
| Guarulhos (SP) | 101.8 | Contagem (MG) | 50.3 |
| Campinas (SP) | 92.4 | S. José dos Campos (SP) | 49.7 |
| São Gonçalo (RJ) | 84.7 | Ribeirão Preto (SP) | 46.3 |

Ordenemos os valores da variável $X =$ população do município $i = 1, \dots, 30$ do menor para o maior e consideremos a primeira classe como aquela com limite inferior igual a 40 e a última com limite superior igual a 1000; para que as classes sejam disjuntas, tomemos por exemplo, intervalos semiabertos. A Tabela 3.6 contém a distribuição de frequências para a variável X .

Observemos que as duas primeiras classes têm amplitudes iguais a 100, a terceira tem amplitude 50, a penúltima tem amplitude igual 350 e a última, amplitude igual a 400. Observemos que $K = 5$, $\sum_{k=1}^K n_k = n = 30$ e que $\sum_{k=1}^K f_k = 1$. Quanto maior for a densidade de frequência de uma classe, maior será a concentração de valores nessa classe.

¹Aqui, o termo “população” se refere ao número de habitantes e é encarado como uma variável. Não deve ser confundido com população no contexto estatístico, que se refere a um conjunto (na maioria das vezes, conceitual) de valores de uma ou mais variáveis medidas. Podemos considerar, por exemplo, a população de pesos de pacotes de feijão produzidos por uma empresa.

Tabela 3.6: Distribuição de frequências para a $X =$ população em dezenas de milhares de habitantes

| classes | h_k | n_k | f_k | $d_k = f_k/h_k$ |
|------------|-------|-------|-------|-----------------|
| 00 – 100 | 100 | 17 | 0,567 | 0,00567 |
| 100 – 200 | 100 | 8 | 0,267 | 0,00267 |
| 200 – 250 | 50 | 3 | 0,100 | 0,00200 |
| 250 – 600 | 350 | 1 | 0,033 | 0,00010 |
| 600 – 1000 | 400 | 1 | 0,033 | 0,00008 |
| Total | – | 30 | 1,000 | – |

O valor da amplitude de classes h deve ser escolhido de modo adequado. Se h for grande, teremos poucas classes e o histograma pode não mostrar detalhes importantes; por outro lado, se h for pequeno, teremos muitas classes e algumas poderão ser vazias. A escolha do número e amplitude das classes é arbitrária. Detalhes técnicos sobre a escolha do número de classes em casos específicos podem ser encontrados na Nota de Capítulo 2. Uma definição mais técnica de histograma está apresentada na Nota de Capítulo 3.

O histograma da Figura 3.8 corresponde à distribuição de frequências da variável X do Exemplo 3.2, obtido usando a função `hist` do R.

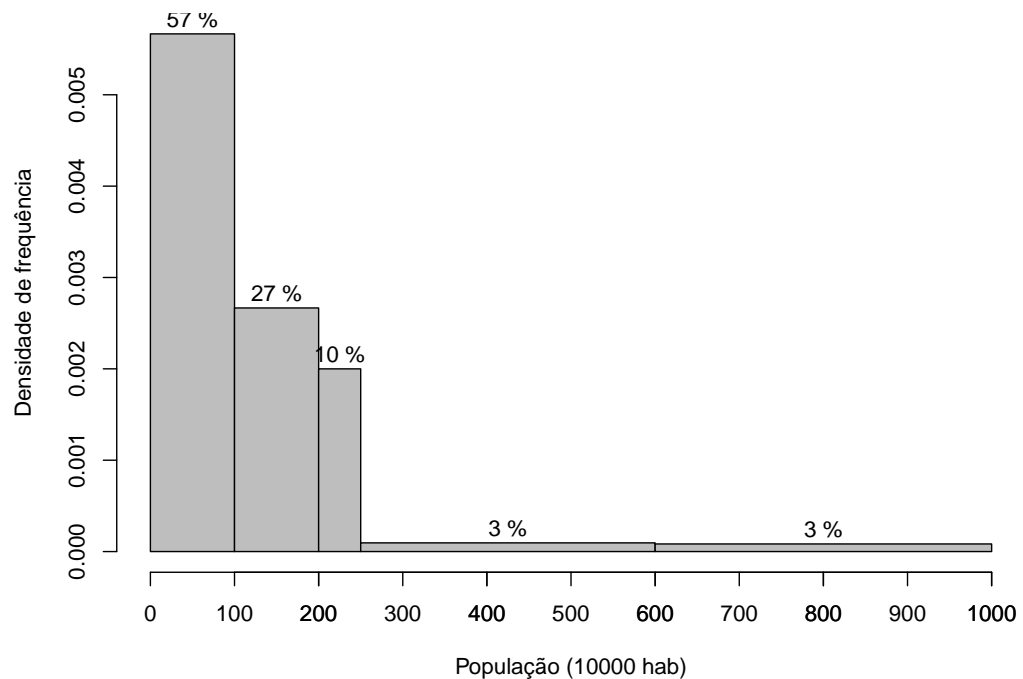


Figura 3.8: Histograma para a variável População (10000 habitantes).

O gráfico de ramo-e-folhas para os dados da Tabela 3.5 está apresentado na Figura 3.9. Pelo gráfico podemos avaliar a forma da distribuição das ob-

1 | 2: representa 120
 unidade da folha: 10
 n: 30

```

0 | 445556666666778889
1 | 00112358
2 | 012
3 |
4 |
5 | 5
6 |
7 |
8 |
9 | 8

```

Figura 3.9: Gráfico ramo-e-folhas para a variável População (10000 habitantes).

servações; em particular, vemos que há dois valores atípicos, 556,9 e 988,8, correspondentes às populações do Rio de Janeiro e São Paulo, respectivamente.

Quando há muitas folhas num ramo, podemos considerar ramos subdivididos, como no exemplo a seguir.

Exemplo 3.3: Os dados da planilha intitulada “poluicao”, disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/poluicao.xls> correspondem à concentração atmosférica de poluentes ozônio O_3 e monóxido de carbono (CO) além de temperatura média e umidade na cidade de São Paulo entre 1 de janeiro e 30 de abril de 1991. O gráfico de ramo-e-folhas para a concentração de monóxido de carbono pode ser construído com dois ramos, colocando-se no primeiro folhas com dígitos de 0 a 4 e no segundo, folhas com dígitos de 5 a 9. Esse gráfico está apresentado na Figura 3.10

A separação decimal está em |

```

4 | 77
5 | 12
5 | 55677789
6 | 111112222222233333444444
6 | 5666677777899999999
7 | 00122233444
7 | 5566777778888899999999
8 | 012334
8 | 55678999
9 | 0114
9 | 557
10 | 1333
10 | 8
11 | 4
11 | 69
12 | 0
12 | 5

```

Figura 3.10: Gráfico ramo-e-folhas para a variável CO (ppm).

3.3 Medidas resumo

Em muitas situações deseja-se fazer um resumo mais drástico de um determinado conjunto de dados, por exemplo, por meio de um ou dois valores. A renda per capita de um país ou a porcentagem de eleitores favoráveis a um candidato são exemplos típicos. Com essa finalidade podem-se considerar as chamadas medidas de posição (localização ou de tendência central), as medidas de dispersão e medidas de assimetria, entre outras.

3.3.1 Medidas de posição

As medidas de posição mais utilizadas são a média, a mediana, a média aparada e os quantis. Para defini-las, consideremos as observações x_1, \dots, x_n de uma variável X .

A **média aritmética** (ou simplesmente média) é definida por

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (3.1)$$

No caso de dados agrupados numa distribuição de frequências de um conjunto com n valores, K classes e n_k valores na classe k , $k = 1, \dots, K$, a média pode ser calculada como

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k \tilde{x}_k = \sum_{k=1}^K f_k \tilde{x}_k, \quad (3.2)$$

em que \tilde{x}_k é o ponto médio correspondente à classe k e $f_k = n_k/n$. Essa mesma expressão é usada para uma variável discreta, com n_k valores iguais a x_k , bastando para isso, substituir com \tilde{x}_k por x_k .

A **mediana** é definida em termos das estatísticas de ordem, $x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}$ por

$$\text{md}(x) = \begin{cases} x_{(\frac{n+1}{2})}, & \text{se } n \text{ for ímpar,} \\ \frac{1}{2}[x_{(\frac{n}{2})} + x_{(\frac{n}{2}+1)}], & \text{se } n \text{ for par.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Dado um número $0 < \alpha < 1$, a **média aparada** de ordem α , $\bar{x}(\alpha)$ é definida como a média do conjunto de dados obtido após a eliminação das $100\alpha\%$ primeiras observações ordenadas e das $100\alpha\%$ últimas observações ordenadas do conjunto original. Uma definição formal é:

$$\bar{x}(\alpha) = \begin{cases} \frac{1}{n(1-2\alpha)} \{ \sum_{i=m+2}^{n-m-1} x_{(i)} + (1+m-n\alpha)[x_{(m+1)} + x_{(n-m)}] \}, & \text{se } m+2 \leq n-m+1 \\ \frac{1}{2}[x_{(m+1)} + x_{(n-m)}] & \text{em caso contrário.} \end{cases} \quad (3.4)$$

em que m é o maior inteiro menor ou igual a $n\alpha$, $0 < \alpha < 0,5$. Se $\alpha = 0,5$, obtemos a mediana. Para $\alpha = 0,25$ obtemos a chamada a **meia média**. Observe que se $\alpha = 0$, $\bar{x}(0) = \bar{x}$.

Exemplo 3.4: Consideremos um conjunto com $n = 10$ valores de uma variável X dados por 14, 7, 3, 18, 9, 220, 34, 23, 6, 15.

Então, $\bar{x} = 34,9$, $\text{md}(x) = (14 + 15)/2 = 14,5$, e $\bar{x}(0,2) = [x_{(3)} + x_{(4)} + \dots + x_{(8)}]/6 = 14,3$. Note que se usarmos (3.4), temos $\alpha = 0,2$ e $m = 2$ obtendo o mesmo resultado. Se $\alpha = 0,25$, então de (3.4) obtemos

$$\bar{x}(0,25) = \frac{x_{(3)} + 2x_{(4)} + 2x_{(5)} + \dots + 2x_{(7)} + x_{(8)}}{10} = 14,2$$

Observe que a média é bastante afetada pelo valor atípico 220, ao passo que a mediana e a média aparada com $\alpha = 0,2$ não o são. Dizemos que essas duas últimas são **medidas resistentes** ou **robustas**.

Uma medida diz-se resistente se ela muda pouco quando alterarmos um número pequeno dos valores do conjunto de dados. Se substituirmos o valor 220 do exemplo por 2200, a média passa para 232,9 ao passo que a mediana e a média aparada $\bar{x}(0,20)$ não se alteram.

As três medidas consideradas acima são chamadas de posição ou localização central do conjunto de dados. Para variáveis qualitativas também é comum utilizarmos outra medida de posição que indica o valor mais frequente, denominado **moda**. Quando há duas classes com a mesma frequência máxima, a variável (ou distribuição) é dita **bimodal**. A não ser que os dados de uma variável contínua sejam agrupados em classes, caso em que se pode considerar a **classe modal**, não faz sentido considerar a moda, pois em geral, cada valor da variável tem frequência unitária.

Quantis

Consideremos agora medidas de posição úteis para indicar outras posições

não centrais dos dados. Informalmente, um quantil- p ou quantil de ordem p é **um valor da variável** (quando ela é contínua) ou **um valor interpolado entre dois valores da variável** (quando ela é discreta) que deixa $100p\%$ ($0 < p < 1$) das observações à sua esquerda. Formalmente, definimos o quantil- p empírico (ou simplesmente quantil) como

$$Q(p) = \begin{cases} x_{(i)}, & \text{se } p = p_i = (i - 0,5)/n, \quad i = 1, \dots, n \\ (1 - f_i)Q(p_i) + f_i Q(p_{i+1}), & \text{se } p_i < p < p_{i+1} \\ x_{(1)}, & \text{se } 0 < p < p_1 \\ x_{(n)}, & \text{se } p_n < p < 1, \end{cases} \quad (3.5)$$

em que $f_i = (p - p_i)/(p_{i+1} - p_i)$. Ou seja, se p for da forma $p_i = (i - 0,5)/n$, o quantil- p coincide com a i -ésima observação ordenada. Para um valor p entre p_i e p_{i+1} , o quantil $Q(p)$ pode ser definido como sendo a ordenada de um ponto situado no segmento de reta determinado por $[p_i, Q(p_i)]$ e $[p_{i+1}, Q(p_{i+1})]$. Escolhemos p_i como acima (e não como i/n , por exemplo) de forma que se um quantil coincidir com uma das observações, metade dela pertencerá ao conjunto de valores à esquerda de $Q(p)$ e metade ao conjunto de valores à sua direita.

Os quantis amostrais para os dez pontos do Exemplo 3.4 estão indicados na Tabela 3.7. Com essa informação, podemos calcular outros quantis; por

Tabela 3.7: Quantis amostrais para os dados do Exemplo 3.4

| i | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|----------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| p_i | 0,05 | 0,15 | 0,25 | 0,35 | 0,45 | 0,55 | 0,65 | 0,75 | 0,85 | 0,95 |
| $Q(p_i)$ | 3 | 6 | 7 | 9 | 14 | 15 | 18 | 23 | 34 | 220 |

exemplo, $Q(0,10) = [x_{(1)} + x_{(2)}]/2 = (3 + 6)/2 = 4,5$ com $f_1 = (0,10 - 0,05)/(0,10) = 0,5$, $Q(0,90) = [x_{(9)} + x_{(10)}]/2 = (34 + 220)/2 = 127$, pois $f_9 = 0,5$ e $Q(0,62) = [0,30 \times x_{(5)} + 0,70 \times x_{(6)}] = (0,3 \times 14 + 0,7 \times 15) = 14,7$ pois $f_6 = (0,62 - 0,55)/0,10 = 0,7$. Note que a definição (3.5) é compatível com a definição de mediana apresentada anteriormente.

Os quantis $Q(0,25)$, $Q(0,50)$ e $Q(0,75)$ são chamados **quartis** e usualmente são denotados por Q_1 , Q_2 e Q_3 , respectivamente. O quartil Q_2 é a mediana e a proporção dos dados entre Q_1 e Q_3 é 50%.

Outras denominações comumente empregadas são $Q(0,10)$: primeiro decil, $Q(0,20)$: segundo decil ou vigésimo percentil, $Q(0,85)$: octogésimo-quinto percentil etc.

3.3.2 Medidas de dispersão

Duas medidas de dispersão (ou de escala ou de variabilidade) bastante usadas são obtidas tomando-se a média dos desvios das observações em relação à sua média. Considere as observações x_1, \dots, x_n , não necessariamente distintas.

A **variância** desse conjunto de valores é definida por

$$\text{var}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2. \quad (3.6)$$

No caso de uma tabela de frequências (com K classes), a expressão para cálculo da variância é

$$\text{var}(x) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k (\tilde{x}_k - \bar{x})^2 = \sum_{k=1}^K f_k (\tilde{x}_k - \bar{x})^2, \quad (3.7)$$

com a notação estabelecida anteriormente. Para facilitar os cálculos, convém substituir (3.6) pela expressão equivalente

$$\text{var}(x) = n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \bar{x}^2. \quad (3.8)$$

Analogamente, podemos substituir (3.7) por

$$\text{var}(x) = n^{-1} \sum_{k=1}^K f_k \tilde{x}_k^2 - \bar{x}^2. \quad (3.9)$$

Como a unidade de medida da variância é o quadrado da unidade de medida da variável correspondente, convém definir outra medida de dispersão que mantenha a unidade de medida original. Uma medida com essa propriedade é a raiz quadrada positiva da variância conhecida por **desvio padrão**, denotado $\text{dp}(x)$.

Para garantir certas propriedades estatísticas úteis para propósitos de inferência, convém modificar as definições acima. Em particular, para garantir que a variância obtida de uma amostra de dados de uma população seja um **estimador não enviesado** da variância populacional basta definir a variância como

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad (3.10)$$

em substituição à definição (3.6).

Um estimador (a variância amostral S^2 , por exemplo) de um determinado parâmetro (a variância populacional σ^2 , por exemplo) é dito não enviesado quando seu valor esperado é o próprio parâmetro que está sendo estimado. *Grosso modo*, se um conjunto muito grande amostras for colhido da população sob investigação e para cada uma delas for calculado o valor desse estimador não enviesado, a média desses valores será o próprio parâmetro. Dizemos que o estimador S^2 tem $n-1$ **graus de liberdade** pois “perdemos” um grau de liberdade ao estimar a média populacional μ por meio de \bar{x} , ou seja, dado o valor \bar{x} , só temos “liberdade” para escolher $n-1$ valores da variável X , pois o último valor, digamos x_n , é obtido como $x_n = n\bar{x} - \sum_{k=1}^{n-1} x_k$.

Note que se n for grande (*e.g.*, $n = 100$) (3.10) e (3.6) têm valores praticamente iguais. Para detalhes, veja Bussab e Morettin (2014) entre outros.

Em geral, S^2 é conhecida por **variância amostral**. A **variância populacional** é definida como em (3.10) com o denominador $n - 1$ substituído pelo tamanho populacional N e a média amostral \bar{x} substituída pela média populacional μ . As fórmulas de cálculo acima podem ser modificadas facilmente com essa definição; o desvio padrão amostral é usualmente denotado por S .

O **desvio médio** ou **desvio absoluto médio** definido por

$$\text{dm}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i - \bar{x}|. \quad (3.11)$$

Outra medida de dispersão bastante utilizada é a **distância interquartis** ou **amplitude interquartis**

$$d_Q = Q_3 - Q_1. \quad (3.12)$$

A distância interquartis pode ser utilizada para estimar o desvio padrão conforme indicado na Nota de Capítulo 4.

Podemos também considerar uma medida de dispersão definida em termos de desvios em relação à mediana. Como a mediana é uma medida robusta, nada mais natural que definir o **desvio mediano absoluto** como

$$\text{dma}(x) = \text{md}_{1 \leq i \leq n} |x_i - \text{md}(x)|, \quad (3.13)$$

Finalmente, uma medida correspondente à média aparada é a **variância aparada**, definida por

$$S^2(\alpha) = \begin{cases} \frac{c_\alpha}{n(1-2\alpha)} \left(\sum_{i=m+2}^{n-m-1} [x_{(i)} - \bar{x}(\alpha)]^2 + A \right), & m+2 \leq n-m+1 \\ \frac{1}{2} [(x_{(m+1)} - \bar{x}(\alpha))^2 + (x_{(n-m)} - \bar{x}(\alpha))^2], & \text{em caso contrário,} \end{cases} \quad (3.14)$$

em que

$$A = (1 + m - n\alpha) [(x_{(m+1)} - \bar{x}(\alpha))^2 + (x_{(n-m)} - \bar{x}(\alpha))^2],$$

m é como em (3.4) e c_α é uma constante normalizadora que torna $S^2(\alpha)$ um estimador não enviesado para σ^2 . Para n grande, $c_\alpha = 1,605$. Para amostras pequenas, veja a tabela da página 173 de Johnson e Leone (1964). Em particular, para $n = 10$, $c_\alpha = 1,46$.

A menos do fator c_α , a variância aparada pode ser obtida calculando-se a variância amostral das observações restantes, após a eliminação das $100\alpha\%$ iniciais e finais (com denominador $n - l$ em que l é o número de observações desprezadas).

Considere as observações do Exemplo 3.4. Para esse conjunto de dados as medidas de dispersão apresentadas são $S^2 = 4313,9$, $S = 65,7$, $\text{dm}(x) = 37,0$, $d_Q = 23 - 7 = 16$, $S^2(0,2) = 34,3$, $S(0,20) = 5,9$, e $\text{dma}(x) = 7,0$.

Observemos que as medidas robustas são, em geral, menores do que \bar{x} e S e que $d_Q/1,349 = 11,9$. Se considerarmos que esses dados constituem uma amostra de uma população com desvio padrão σ , pode-se mostrar que, $d_{ma}/0,6745$ é um estimador não enviesado para σ . A constante $0,6745$ é obtida por meio de considerações assintóticas. No exemplo, $d_{ma}/0,6745 = 10,4$. Note que esses dois estimadores do desvio padrão populacional coincidem. Por outro lado, S é muito maior, pois sofre bastante influencia do valor 220. Retirando-se esse valor do conjunto de dados, a média dos valores restantes é $14,3$ e o correspondente desvio padrão é $9,7$.

Uma outra medida de dispersão, menos utilizada na prática é a **amplitude**, definida como $\max(x_1, \dots, x_n) - \min(x_1, \dots, x_n)$.

3.3.3 Medidas de assimetria

Embora sejam menos utilizadas na prática que as medidas de posição e dispersão, as medidas de assimetria (*skewness*) são úteis para identificar modelos probabilísticos para análise inferencial.

Na Figura 3.11 estão apresentados histogramas correspondentes a dados com assimetria positiva (ou à direita) ou negativa (ou à esquerda) e simétrico. O objetivo das medidas de assimetria é quantificar sua mag-

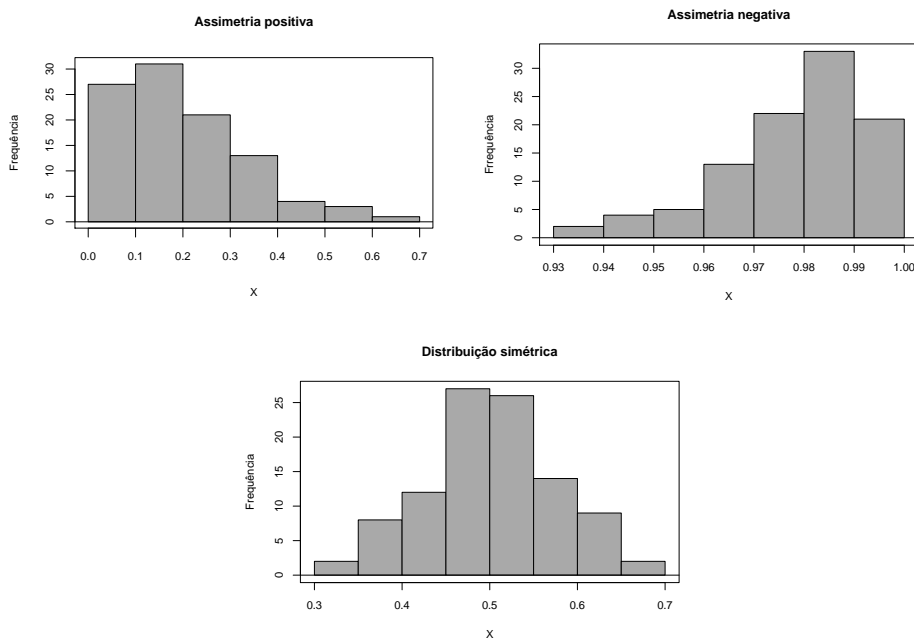


Figura 3.11: Histogramas com assimetria positiva e negativa e simétrico.

nitude e, em geral, são baseadas na relação entre o segundo e o terceiro

momentos centrados, nomeadamente

$$m_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad \text{e} \quad m_3 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3.$$

Dentre elas as mais comuns são:

- a) o coeficiente de assimetria de Fisher-Pearson: $g_1 = m_3/m_2^{3/2}$
- b) o coeficiente de assimetria de Fisher-Pearson ajustado:

$$\frac{\sqrt{n(n-1)}}{n-1} \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x})/\sqrt{m_2}]^3.$$

As principais propriedades desses coeficientes são

- i) seu sinal reflete a direção da assimetria;
- ii) comparam a assimetria dos dados com aquela da distribuição Normal;
- iii) valores mais afastados do zero indicam maiores magnitudes de assimetria e conseqüentemente, maior afastamento da distribuição Normal;
- iv) a estatística indicada em b) tem um ajuste para o tamanho amostral;
- v) o ajuste tem pequeno impacto em grandes amostras.

Outro coeficiente de assimetria mais intuitivo é o chamado Coeficiente de assimetria de Pearson 2,

$$Sk_2 = 3[\bar{x} - md(x)]/s.$$

A avaliação de assimetria também pode ser concretizada por meios gráficos. Em particular, o gráfico de $Q(p)$ versus p conhecido como **gráfico de quantis** é uma ferramenta importante para esse propósito.

A Figura 3.12 mostra o gráfico de quantis para os dados do Exemplo 3.2. Notamos que os pontos correspondentes a São Paulo e Rio de Janeiro são destacados. Além disso, se a distribuição dos dados for aproximadamente simétrica, a inclinação na parte superior do gráfico deve ser aproximadamente igual àquela da parte inferior, o que não acontece na figura em questão.

Os cinco valores $x_{(1)}, Q_1, Q_2, Q_3, x_{(n)}$, isto é, os extremos e os quartis, são medidas de localização importantes para avaliarmos a simetria dos dados.

Suponha uma distribuição simétrica (ou aproximadamente simétrica). Então,

- a) $Q_2 - x_{(1)} \approx x_{(n)} - Q_2$;
- b) $Q_2 - Q_1 \approx Q_3 - Q_2$;
- c) $Q_1 - x_{(1)} \approx x_{(n)} - Q_3$.

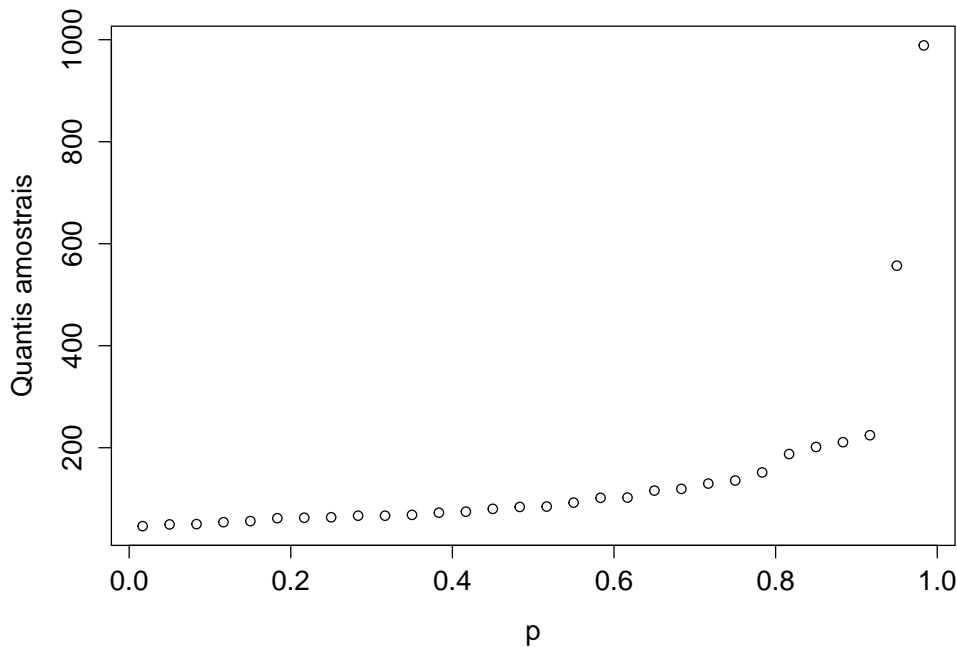


Figura 3.12: Gráfico de quantis para População (10000 habitantes).

Para distribuições assimétricas à direita, as diferenças entre os quantis situados à direita da mediana e a mediana são maiores que as diferenças entre a mediana e os quantis situados à esquerda da mediana. A condição (a) nos diz que a **dispersão inferior** é igual (ou aproximadamente igual) à **dispersão superior**. Notamos, também, que se uma distribuição for (aproximadamente) simétrica, vale a relação

$$Q_2 - x_{(i)} = x_{(n+1-i)} - Q_2, \quad i = 1, \dots, [(n+1)/2], \quad (3.15)$$

em que $[x]$ representa o maior inteiro contido em x .

Chamando $u_i = Q_2 - x_{(i)}$, $v_i = x_{(n+1-i)} - Q_2$, podemos considerar um **gráfico de simetria**, no qual colocamos os valores u_i como abcissas e os valores v_i como ordenadas. Se a distribuição dos dados for simétrica, os pontos (u_i, v_i) deverão estar ao longo da reta $u = v$.

Na Figura 3.13 apresentamos o gráfico de simetria para os dados do Exemplo 3.2 no qual podemos observar que a maioria dos pontos está acima da reta $u = v$, mostrando a assimetria à direita desses dados.

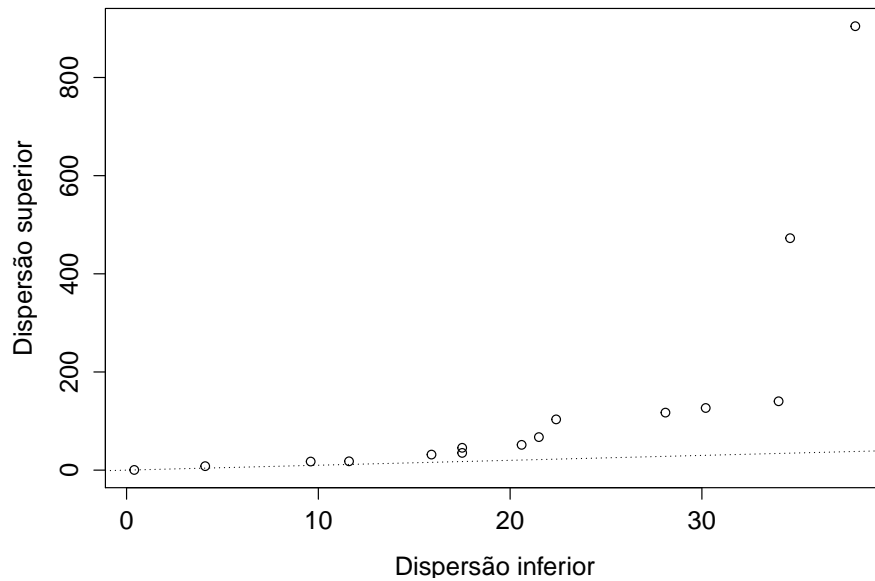
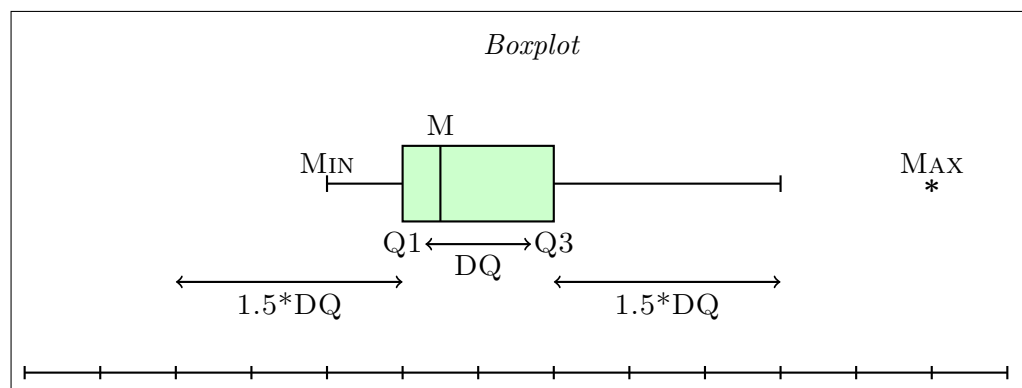


Figura 3.13: Gráfico de simetria para População (10000 habitantes).

3.4 *Boxplots*

O *boxplot* é um gráfico baseado nos quantis que serve como alternativa ao histograma para resumir a distribuição dos dados. Considere um retângulo, com bases determinadas por Q_1 e Q_3 , como indicado na Figura 3.14. Marque com um segmento a posição da mediana. Considere dois segmentos de reta denominados bigodes (*whiskers*) colocados respectivamente acima e abaixo de Q_1 e Q_3 com limites dados, respectivamente por $\min[x_{(n)}, Q_3 + 1,5 * d_Q]$ e $\max[x_{(1)}, Q_1 - 1,5 * d_Q]$. Pontos colocados acima do limite superior ou abaixo do limite inferior são considerados **valores atípicos** ou **discrepan-tes** (*outliers*).



Q1: 1o quartil Q3: 3o quartil DQ: distância interquartis M: mediana

Figura 3.14: Detalhe para a construção de *boxplots*.

Esse gráfico permite que identifiquemos a posição dos 50% centrais dos dados (entre o primeiro e terceiro quartis), a posição da mediana, os valores atípicos, se existirem, assim como permite uma avaliação da simetria da distribuição. *Boxplots* são úteis para a comparação de vários conjuntos de dados, como veremos em capítulos seguintes.

Os *boxplots* apresentados na Figura 3.15 correspondem aos dados do Exemplo 3.2 [painel (a)] e da Temperatura do Exemplo 3.3 [painel (b)].² A distribuição dos dados de Temperatura tem uma natureza mais simétrica e mais dispersa do que aquela correspondente às populações de municípios. Há valores atípicos no painel (a), representando as populações do Rio de Janeiro e de São Paulo, mas não os encontramos nos dados de temperatura.

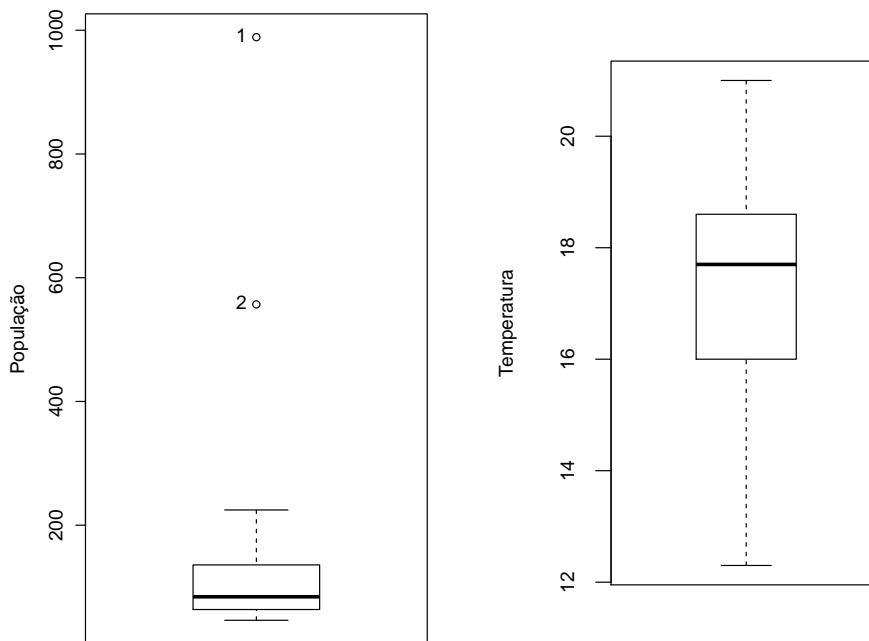


Figura 3.15: *Boxplots* para os dados dos Exemplos 3.2 (População) e 3.3 (Temperatura).

Há uma variante dos *boxplots*, denominada ***boxplot dentado*** (*notched boxplot*) que consiste em acrescentar um dente em “v” ao redor da mediana no gráfico. O intervalo determinado pelo dente é dado por

$$Q_2 \pm \frac{1,57d_Q}{\sqrt{n}}.$$

Para detalhes, veja McGill et al. (1978) ou Chambers et al. (1983). Na Figura 3.16 apresentamos *boxplots* correspondentes àqueles da Figura 3.15 com os dentes (*notchs*) incorporados.

²Note que tanto a orientação horizontal (como na Figura 3.14) quanto a vertical (como na Figura 3.15) podem ser empregadas na construção dos *boxplots*.

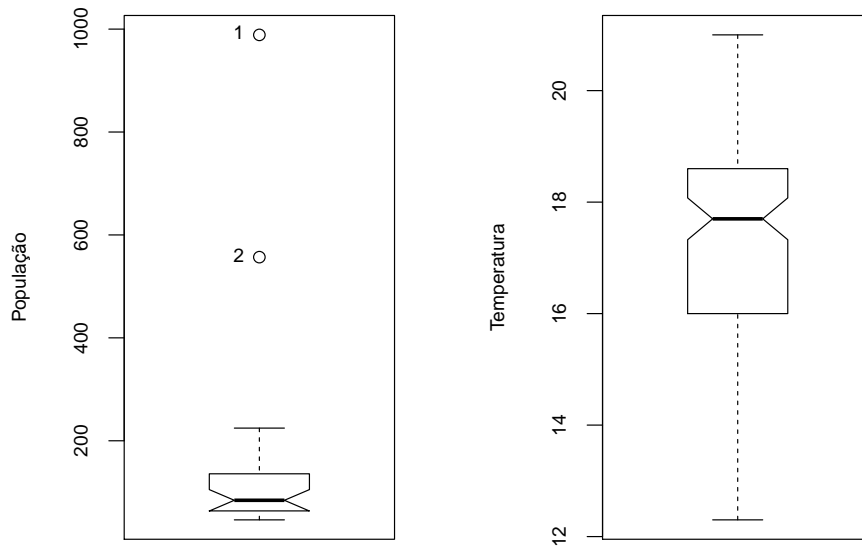


Figura 3.16: *Boxplots* dentados para os dados dos Exemplos 3.2 (População) e 3.3 (Temperatura).

3.5 Modelos probabilísticos

Um dos objetivos da Estatística é fazer inferência (ou tirar conclusões) sobre distribuições de variáveis em populações a partir de dados de uma parte dela, denominada **amostra**. A ligação entre os dados amostrais e a população depende de **modelos probabilísticos** ou seja, de modelos que representem a distribuição (desconhecida) da variável na população. Por exemplo, pode ser difícil obter informações sobre a distribuição dos salários de empregados de uma empresa com 40.000 empregados espalhados por diversos países. Nessa situação, costuma-se recorrer a uma amostra dessa população, obter as informações desejadas a partir dos valores amostrais e tentar tirar conclusões sobre toda a população a partir desses valores com base num modelo probabilístico. No exemplo acima, podemos escolher uma amostra de 400 empregados da empresa e analisar a distribuição dos salários dessa amostra. Esse procedimento é denominado **inferência estatística**.

Muitas vezes, a população para a qual se quer tirar conclusões é apenas conceitual e não pode ser efetivamente enumerada, como o conjunto de potenciais consumidores de um produto ou o conjunto de pessoas que sofrem de uma certa doença. Nesses casos, não se pode obter a correspondente distribuição de frequências de alguma característica de interesse associada a essa população e o recurso a modelos para essa distribuição faz-se necessário; esses são os chamados modelos probabilísticos e as frequências correspondentes são denominadas probabilidades. Nesse sentido, o conhecido gráfico com formato de sino associado à distribuição normal pode ser considerado

Tabela 3.8: Modelos probabilísticos para variáveis discretas

| Modelo | $P(X = x)$ | Parâmetros | $E(X), \text{Var}(X)$ |
|-----------------|--|------------|--|
| Bernoulli | $p^x(1-p)^{1-x}, x = 0, 1$ | p | $p, p(1-p)$ |
| Binomial | $\binom{n}{x}p^x(1-p)^{n-x}, x = 0, \dots, n$ | n, p | $np, np(1-p)$ |
| Poisson | $\frac{e^{-\lambda}\lambda^x}{x!}, x = 0, 1, \dots$ | λ | λ, λ |
| Geométrica | $p(1-p)^{x-1}, x = 1, 2, \dots$ | p | $1/p, (1-p)/p^2$ |
| Hipergeométrica | $\frac{\binom{r}{x}\binom{N-r}{n-x}}{\binom{N}{n}}, x = 0, 1, \dots$ | N, r, n | $nr/N, n\frac{r}{N}(1 - \frac{r}{N})\frac{N-n}{N-1}$ |

como um histograma teórico. Por isso, convém chamar a média da distribuição de probabilidades (que no caso conceitual não pode ser efetivamente calculada) de **valor esperado**.

Se pudermos supor que a distribuição de probabilidades de uma variável X , definida sobre uma população possa ser representada por uma determinada distribuição, nosso problema reduz-se a estimar os parâmetros que caracterizam essa particular distribuição.

Há vários modelos probabilísticos importantes que usados em situações de interesse prático. As Tabelas 3.8 e 3.9 trazem um resumo das principais distribuições discretas e contínuas, respectivamente apresentando:

- a **função de probabilidade** (f.p.) $p(x) = P(X = x)$, no caso discreto e a **função densidade de probabilidade** (f.d.p.), $f(x)$, no caso contínuo;
- os parâmetros que caracterizam cada distribuição;
- a média e a variância de cada distribuição.

Detalhes podem ser encontrados em Bussab e Morettin (2017). Para muitas dessas distribuições as probabilidades podem ser encontradas em tabelas apropriadas ou obtidas com o uso de programas de computador.

3.6 Dados amostrais

Dizer que um conjunto de observações x_1, \dots, x_n constituem uma **amostra aleatória simples** (AAS) de tamanho n de uma variável X definida sobre uma população \mathcal{P} se as variáveis X_1, \dots, X_n que geraram as observações são independentes e têm a mesma distribuição de X . Em particular, teremos que $E(X_i) = E(X)$, $\text{Var}(X_i) = \text{Var}(X)$, $i = 1, \dots, n$.

Tabela 3.9: Modelos probabilísticos para variáveis contínuas

| Modelo | $f(x)$ | Parâmetros | $E(X), \text{Var}(X)$ |
|--------------|---|------------------------|-------------------------------------|
| Uniforme | $1/(b-a), a < x < b$ | a, b | $\frac{a+b}{2}, \frac{(b-a)^2}{12}$ |
| Exponencial | $\alpha e^{-\alpha x}, x > 0$ | α | $1/\alpha, 1/\alpha^2$ |
| Normal | $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}, -\infty < x < \infty$ | μ, σ | μ, σ^2 |
| Gama | $\frac{\alpha}{\Gamma(r)} (\alpha x)^{r-1} e^{-\alpha x}, x > 0$ | $\alpha > 0, r \geq 1$ | $r/\alpha, r/\alpha^2$ |
| Qui-quadrado | $\frac{2^{-n/2}}{\Gamma(n/2)} x^{n/2-1} e^{-x/2}, x > 0$ | n | $n, 2n$ |
| t-Student | $\frac{\Gamma((n+1)/2)}{\Gamma(n/2)\sqrt{\pi n}} \left(1 + \frac{x^2}{n}\right)^{-(n+1)/2}, -\infty < x < \infty$ | n | $0, n/(n-2)$ |

Nem sempre nossos dados representam uma AAS de uma população. Por exemplo, dados observados ao longo de um certo período de tempo são, em geral, correlacionados. Nesse caso, os dados constituem uma amostra de uma trajetória de um **processo estocástico** e a população correspondente pode ser considerada como o conjunto de todas as trajetórias de tal processo. Ver Morettin e Tolói (2018) para os conceitos necessários. Também podemos ter dados obtidos de um experimento planejado no qual uma ou mais variáveis são controladas para produzir valores de uma variável resposta. A não ser quando explicitamente indicado, para propósitos inferenciais, neste texto consideraremos os dados como provenientes de uma AAS.

Denotemos por x_1, \dots, x_n os valores efetivamente observados das variáveis X_1, \dots, X_n . Denotemos por $x_{(1)}, \dots, x_{(n)}$ esses valores observados ordenados em ordem crescente, ou seja, $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$. Esses são os valores das **estatísticas de ordem** $X_{(1)}, \dots, X_{(n)}$.

Muitas vezes não faremos distinção entre a variável e seu valor, ou seja, designaremos, indistintamente, por x a variável e um valor observado dela.

A **função distribuição acumulada** de uma variável X é definida como $F(x) = P(X \leq x)$, $x \in \mathcal{R}$ pode ser estimada a partir dos dados amostrais, por meio da **função distribuição empírica** definida por

$$F_e(x) = \frac{n(x)}{n}, \quad \forall x \in \mathcal{R}, \quad (3.16)$$

em que $n(x)$ é o número de observações amostrais menores ou iguais a x .

Considere novamente as observações do Exemplo 3.4 sem o valor 220 para efeito ilustrativo. O gráfico de F_e que é essencialmente uma função em

escada, com “saltos” de magnitude $1/n$ em cada $x_{(i)}$, nomeadamente

$$F_e(x_{(i)}) = \frac{i}{n}, \quad i = 1, \dots, n$$

está disposto na Figura 3.17.

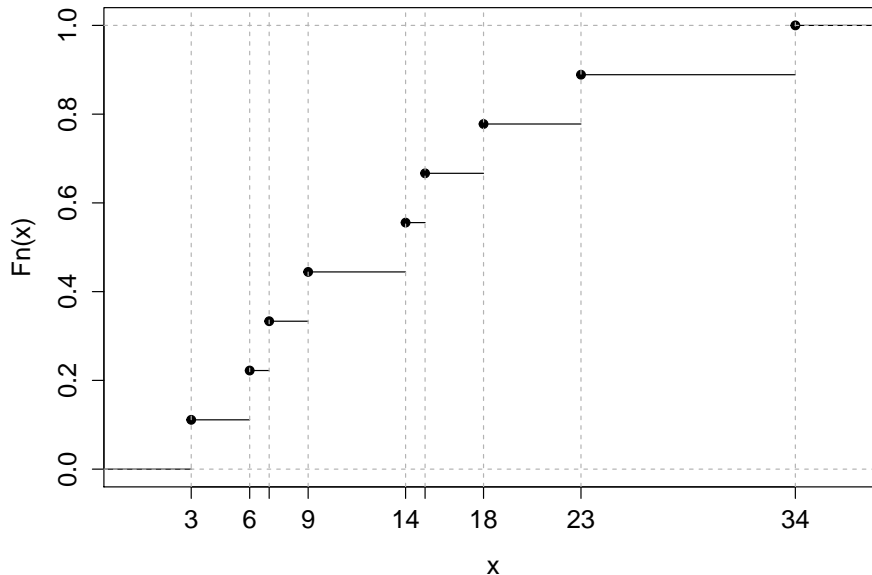


Figura 3.17: Função distribuição empírica para os dados do Exemplo 3.4 (sem o valor 220).

3.7 Gráficos QQ

Uma das questões fundamentais na especificação de um modelo para inferência estatística é a escolha de um modelo probabilístico para representar a distribuição (desconhecida) da variável de interesse na população. Uma possível estratégia para isso é examinar o histograma dos dados amostrais e compará-lo com os histogramas teóricos associados a modelos probabilísticos candidatos. Alternativamente, os **gráficos QQ** (*QQ plots*) também podem ser utilizados com essa finalidade.

Essencialmente, gráficos QQ são gráficos cartesianos cujos pontos representam os quantis de mesma ordem obtidos das distribuições amostral e teórica. Se os dados amostrais forem compatíveis com o modelo probabilístico proposto, esses pontos devem estar sobre uma reta (com inclinação unitária se os dados forem padronizados).

Como o modelo Normal serve de base para muitos métodos estatísticos de análise, uma primeira tentativa é construir esse tipo de gráfico baseado nos quantis dessa distribuição. Os quantis Normais $Q_N(p_i)$ são obtidos da

distribuição Normal padrão $[N(0, 1)]$ por meio da solução da equação

$$\int_{-\infty}^{Q_N(p_i)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2) = p_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

que pode ser obtida da maioria dos pacotes computacionais destinados à análise estatística. Para facilitar a comparação, convém utilizar os quantis amostrais padronizados, $Q^*(p_i) = [Q(p_i) - (\bar{x})]/dp(x)$ nos gráficos QQ. Ver Nota de Capítulo 5.

Consideremos novamente os dados do Exemplo 3.4. Os quantis amostrais, quantis amostrais padronizados e Normais estão dispostos na Tabela 3.7. Os correspondentes quantis Normais são exibidos na Tabela 3.10 e o correspondente gráfico QQ, na Figura 3.18.

Tabela 3.10: Quantis amostrais e Normais para os dados do Exemplo 3.4

| i | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|
| p_i | 0,05 | 0,15 | 0,25 | 0,35 | 0,45 | 0,55 | 0,65 | 0,75 | 0,85 | 0,95 |
| $Q(p_i)$ | 3 | 6 | 7 | 9 | 14 | 15 | 18 | 23 | 34 | 220 |
| $Q^*(p_i)$ | -0,49 | -0,44 | -0,42 | -0,39 | -0,32 | -0,30 | -0,26 | -0,18 | -0,14 | 2,82 |
| $Q_N(p_i)$ | -1,64 | -1,04 | -0,67 | -0,39 | -0,13 | 0,13 | 0,39 | 0,67 | 1,04 | 1,64 |

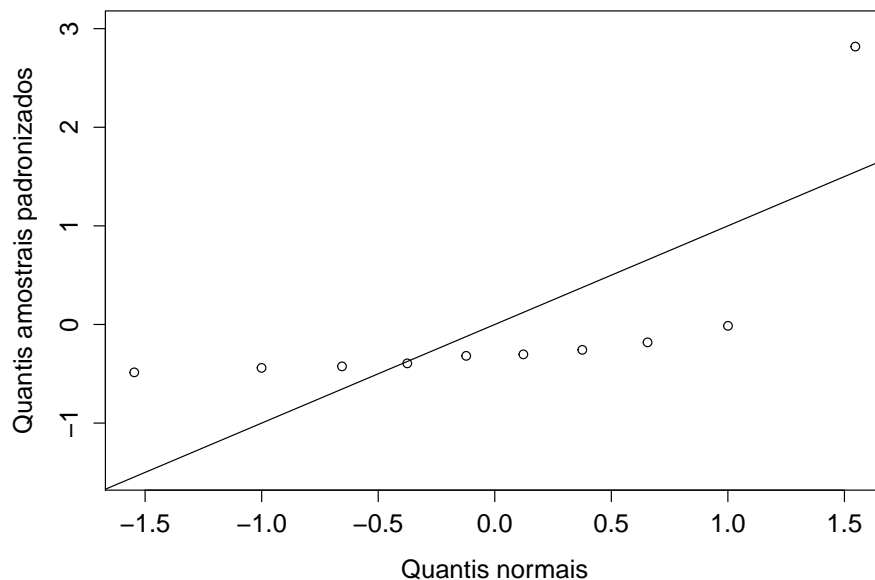


Figura 3.18: Gráfico QQ Normal para os dados do Exemplo 3.4.

Um exame da Figura 3.18 sugere que o modelo Normal não parece ser adequado para os dados do Exemplo 3.4. Uma das razões para isso, é a presença de um ponto atípico (220). Um gráfico QQ Normal para o conjunto de dados obtidos com a eliminação desse ponto está exibido na Figura 3.19 e indica que as evidências contrárias ao modelo Normal são menos aparentes.

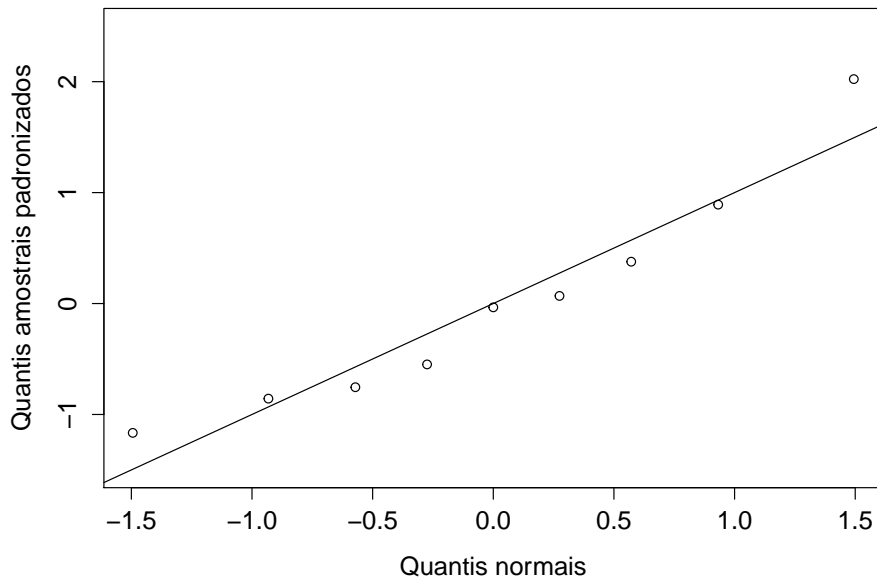


Figura 3.19: Gráfico QQ Normal para os dados do Exemplo 3.4 com a eliminação do ponto 220.

Um exemplo de gráfico QQ para uma distribuição amostral com 100 dados gerados a partir de uma distribuição Normal padrão está apresentado na Figura 3.20.

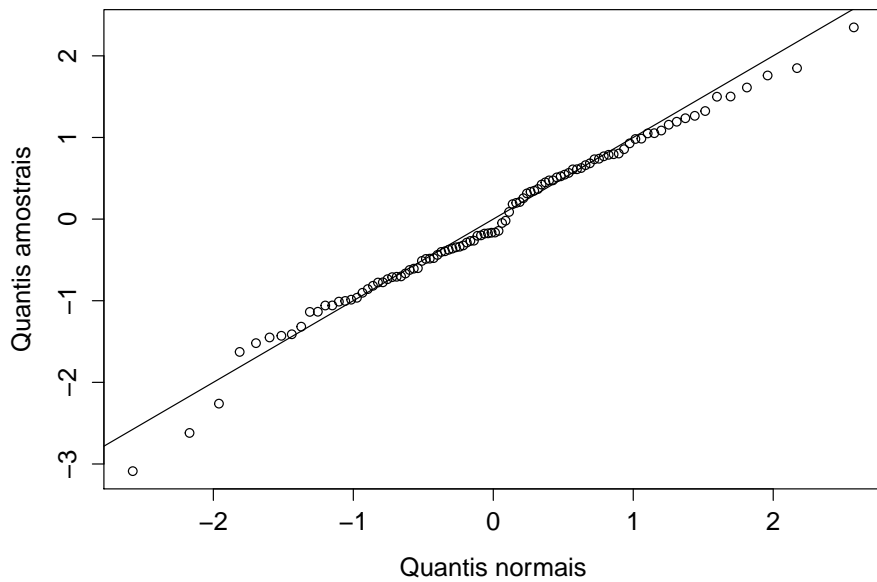


Figura 3.20: Gráfico QQ Normal para 100 dados gerados de uma distribuição Normal padrão.

Embora os dados correspondentes aos quantis amostrais da Figura 3.20 tenham sido gerados a partir de uma distribuição Normal padrão, os pontos não se situam exatamente sobre a reta com inclinação de 45 graus em função de flutuações amostrais. Em geral, a adoção de um modelo probabilístico com base num exame do gráfico QQ tem uma natureza subjetiva, mas é possível incluir bandas de confiança nesse tipo de gráfico para facilitar a decisão. Essas bandas dão uma ideia sobre a faixa de variação esperada para os pontos no gráfico. Detalhes sobre a construção dessas bandas são tratados na Nota de Capítulo 6. Um exemplo de gráfico QQ com bandas de confiança para uma distribuição amostral com 100 dados gerados a partir de uma distribuição Normal padrão está apresentado na Figura 3.21.

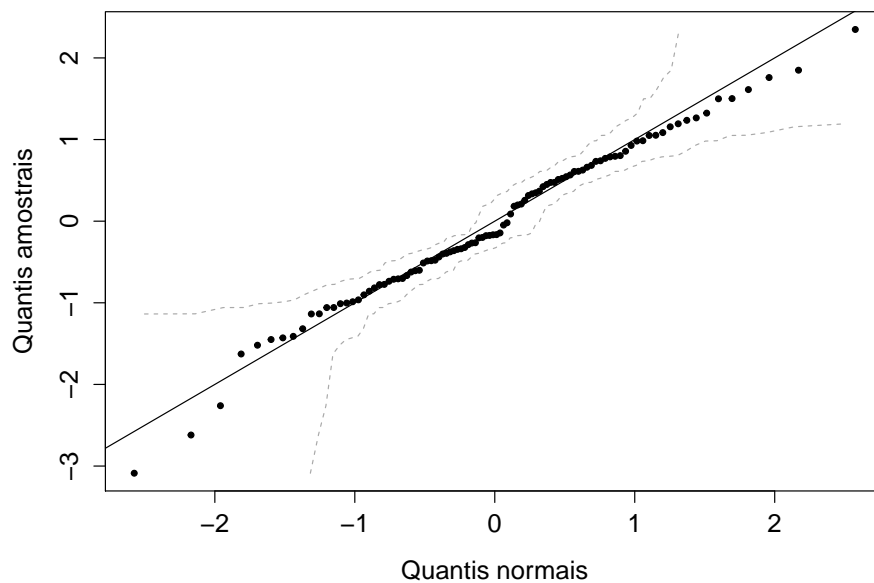


Figura 3.21: Gráfico QQ Normal para 100 dados gerados de uma distribuição Normal padrão com bandas de confiança.

Um exemplo de gráfico QQ em que as caudas da distribuição amostral (obtidas de uma amostra de 100 dados gerados a partir de uma distribuição t com 2 graus de liberdade) são mais pesadas que aquelas da distribuição Normal está apresentado na Figura 3.22.

Um exemplo de gráfico QQ Normal em que a distribuição amostral (com 100 dados gerados a partir de uma distribuição qui-quadrado com 2 graus de liberdade) é assimétrica está apresentado na Figura 3.23. O gráfico QQ correspondente, agora obtido por meio dos quantis de uma distribuição qui-quadrado com 2 graus de liberdade é apresentado na Figura 3.24.

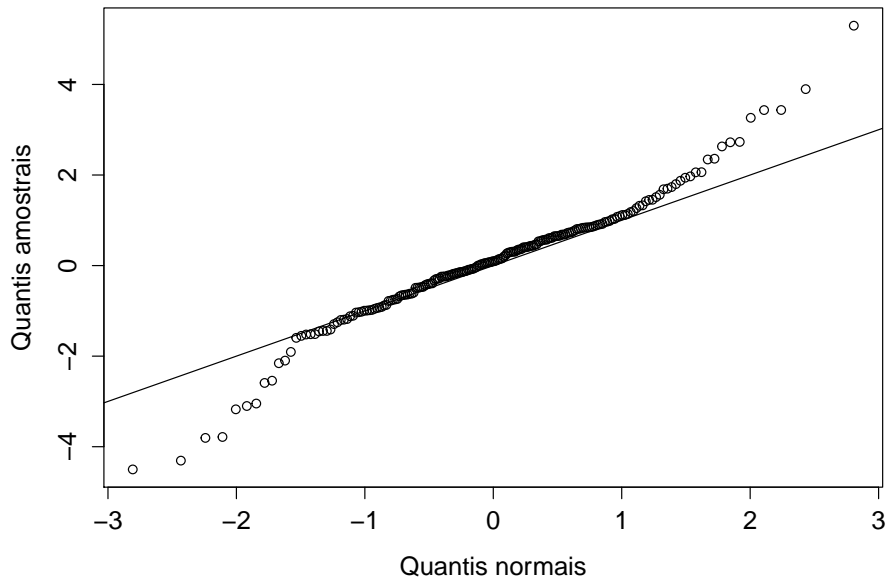


Figura 3.22: Gráfico QQ Normal para 100 dados gerados de uma distribuição t com 2 graus de liberdade.

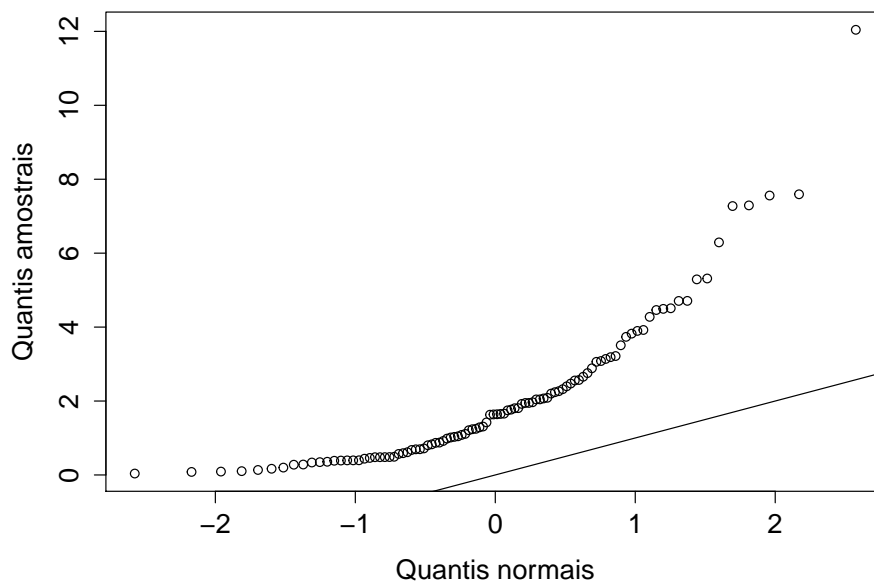


Figura 3.23: Gráfico QQ Normal para 100 dados gerados de uma distribuição qui-quadrado com 2 graus de liberdade.

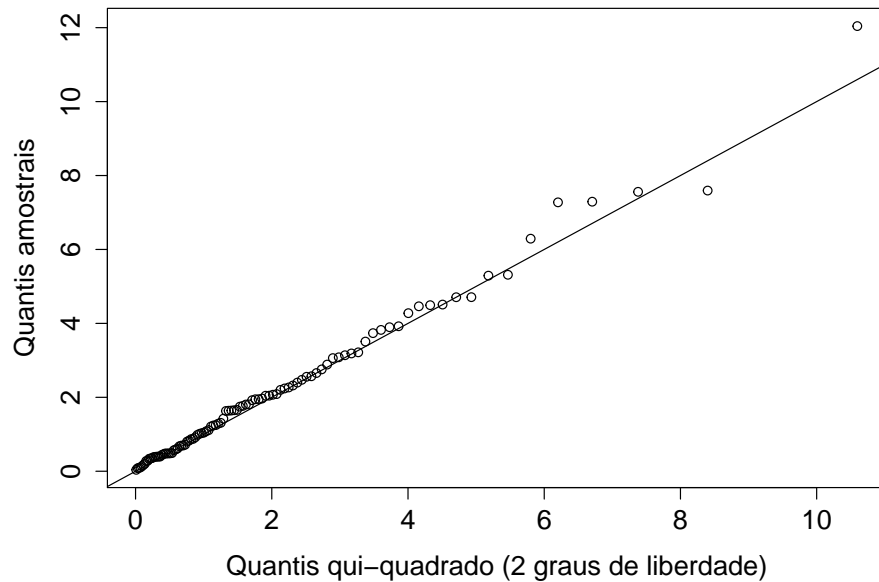


Figura 3.24: Gráfico QQ qui-quadrado para 100 dados gerados de uma distribuição qui-quadrado com 2 graus de liberdade.

3.8 Transformação de variáveis

Muitos procedimentos empregados em inferência estatística são baseados na suposição de que os valores de uma (ou mais) das variáveis de interesse provêm de uma distribuição Normal, ou seja, de que os dados associados a essa variável constituem uma amostra de uma população na qual a distribuição dessa variável é Normal. No entanto, em muitas situações de interesse prático, a distribuição dos dados na amostra é assimétrica e pode conter valores atípicos, como vimos em exemplos anteriores.

Se quisermos utilizar os procedimentos talhados para análise de dados com distribuição Normal em situações nas quais a distribuição dos dados amostrais é sabidamente assimétrica, pode-se considerar uma transformação das observações com a finalidade de se obter uma distribuição “mais simétrica” e portanto, mais próxima da distribuição Normal. Uma transformação bastante usada com esse propósito é

$$y^{(p)} = \begin{cases} x^p, & \text{se } p > 0 \\ \ln(x), & \text{se } p = 0 \\ -x^p, & \text{se } p < 0. \end{cases} \quad (3.17)$$

Essa transformação com $0 < p < 1$ é apropriada para distribuições assimétricas à direita, pois valores grandes de x decrescem mais relativamente a valores pequenos. Para distribuições assimétricas à esquerda, basta tomar $p > 1$.

Normalmente, consideramos valores de p na sequência

$$\dots, -3, -2, -1, -1/2, -1/3, -1/4, 0, 1/4, 1/3, 1/2, 1, 2, 3, \dots$$

e para cada deles construímos gráficos apropriados (histogramas, *boxplots*) com os dados originais e transformados, de modo que podemos escolher o valor mais adequado de p . Hinkley (1977) sugere que para cada valor de p na sequência acima se calcule a média, mediana e um estimador de escala (desvio padrão ou algum estimador robusto) e então se escolha o valor que minimiza

$$d_p = \frac{\text{média} - \text{mediana}}{\text{medida de escala}}, \quad (3.18)$$

que pode ser vista como uma medida de assimetria; numa distribuição simétrica, $d_p = 0$.

Exemplo 3.5. Consideremos a variável concentração de Fe obtidas em cascas de árvores da espécie *Tipuana tipu* disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/arvores.xls>. Nas Figuras 3.25 e 3.26 apresentamos, respectivamente *boxplots* e histogramas para os valores originais da variável assim como para seus valores transformados por (3.17) com $p = 0, 1/3$ e $1/2$. Observamos que a transformação obtida com $p = 1/3$ é aquela que gera uma distribuição mais próxima da simetria.

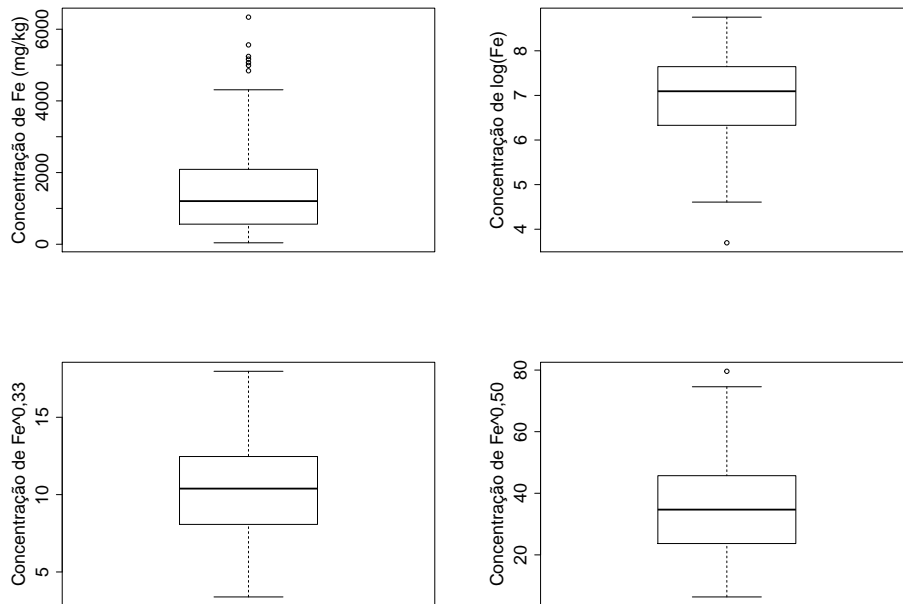


Figura 3.25: *Boxplots* com variável transformada.

Muitas vezes, (em Análise de Variância, por exemplo) é mais importante transformar os dados de modo a “estabilizar” a variância do que tornar a

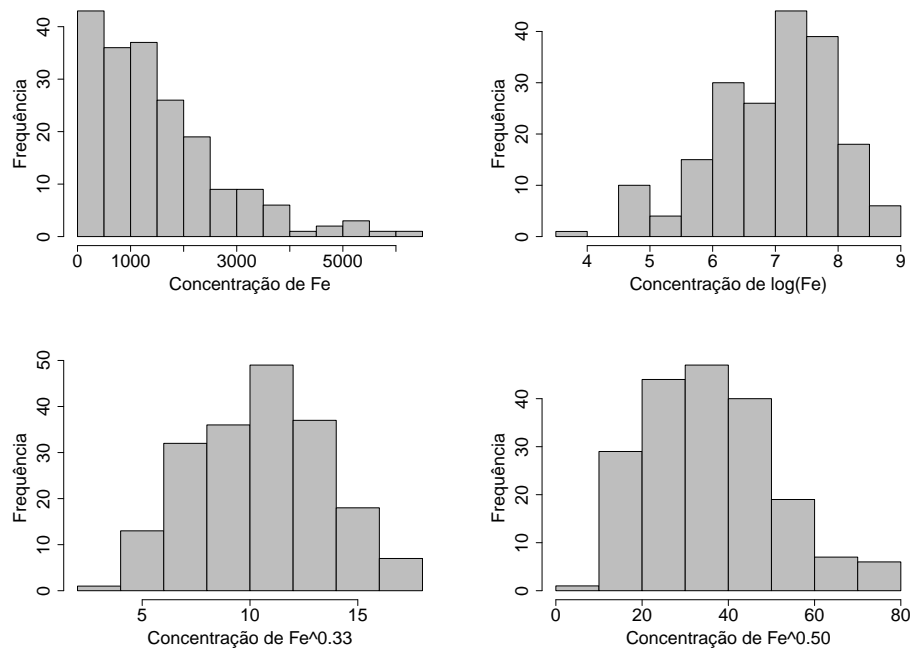


Figura 3.26: Histogramas com variável transformada.

distribuição aproximadamente Normal. Um procedimento idealizado para essa finalidade é detalhado a seguir.

Suponhamos que X seja uma variável com $E(X) = \mu$ e variância dependente da média, ou seja $\text{Var}(X) = h^2(\mu)\sigma^2$, para alguma função $h(\cdot)$. Notemos que se $h(\mu) = 1$, então $\text{Var}(X) = \sigma^2 = \text{constante}$. Procuremos uma transformação $X \rightarrow g(X)$, de modo que $\text{Var}[g(X)] = \text{constante}$. Com esse propósito, consideremos uma expansão de Taylor de $g(X)$ ao redor de $g(\mu)$ até primeira ordem, ou seja

$$g(X) \approx g(\mu) + (X - \mu)g'(\mu).$$

em que g' denota a derivada de g em relação a μ . Então,

$$\text{Var}[g(X)] \approx [g'(\mu)]^2 \text{Var}(X) = [g'(\mu)]^2 h^2(\mu) \sigma^2.$$

Para que a variância da variável transformada seja constante, devemos tomar

$$g'(\mu) = \frac{1}{h(\mu)}.$$

Por exemplo, se o desvio padrão de X for proporcional a μ , tomamos $h(\mu) = \mu$, logo $g'(\mu) = 1/\mu$ e portanto $g(\mu) = \log(\mu)$ e devemos considerar a transformação (3.17) com $p = 0$, ou seja, $y^{(p)} = \log(x)$. Por outro lado, se a variância for proporcional à média, então usando o resultado acima, é fácil ver que a transformação adequada é $g(x) = \sqrt{x}$.

A transformação (3.19) é um caso particular das **transformações de Box-Cox** que são da forma

$$g(x) = \begin{cases} \frac{x^p-1}{p}, & \text{se } p \neq 0 \\ \log(x), & \text{se } p = 0. \end{cases} \quad (3.19)$$

Veja Box e Cox (1964) para detalhes.

Um tópico relevante nesse contexto é o de padronização de variáveis. Considere um conjunto de valores, X_1, \dots, X_n de uma variável X e sejam \bar{X} e S^2 sua média e sua variância, respectivamente. A variável $Z = (X - \bar{X})/S$ com valores Z_1, \dots, Z_n é denominada variável padronizada e tem média 0 e variância 1 (ver Exercício 3.2).

3.9 Desvio padrão e Erro padrão

Considere uma população para a qual a variável X tem média μ e variância σ^2 . Imaginemos que um número grande, digamos M de amostras de tamanho n seja obtido dessa população. Denotemos por X_{i1}, \dots, X_{in} os n valores observados da variável X na i -ésima amostra, $i = 1, \dots, M$. Para cada uma das M amostras, calculemos as respectivas médias, denotadas por $\bar{X}_1, \dots, \bar{X}_M$. Pode-se mostrar que a média e a variância da variável \bar{X} (cujos valores são $\bar{X}_1, \dots, \bar{X}_M$) são respectivamente μ e σ^2/n , *i.e.*, a média do conjunto das médias amostrais é igual à média da variável original X e a sua variância é menor (por um fator $1/n$) que a variância da variável original X . Além disso pode-se demonstrar que o histograma da variável \bar{X} tem o formato da distribuição Normal.

Note que a variância σ^2 é uma característica inerente à distribuição da variável original e não depende do tamanho da amostra. A variância σ^2/n da variável \bar{X} , depende do tamanho da amostra; quanto maior esse tamanho, mais concentrada (em torno de sua média, que é a mesma da variável original) será a sua distribuição. O desvio padrão da variável \bar{X} é conhecido como **erro padrão** (da média). Detalhes podem ser obtidos em Bussab e Morettin (2017).

3.10 Intervalo de confiança

Em muitas situações, dados passíveis de análise estatística provêm de variáveis observadas em unidades de investigação (indivíduos, animais, corpos de prova, residências etc.) obtidas de uma população de interesse por meio de um processo de amostragem. Além de descrever e resumir os dados da amostra, há interesse em utilizá-los para fazer inferência sobre as distribuições populacionais dessas variáveis. Essas populações são, em geral, conceituais. Por exemplo, na avaliação de um determinado medicamento para diminuição da pressão arterial (X), a população de interesse não se resume aos pacientes (vivos) de um hospital ou de uma região; o foco é a população de indivíduos (vivos ou que ainda nascerão) que poderão utilizar

essa droga. Nesse contexto, as características populacionais da diminuição da pressão arterial possivelmente provocada pela administração da droga são desconhecidas e queremos estimá-la (ou adivinhá-las) com base nas suas características amostrais.

Não temos dúvidas sobre as características amostrais. Se a droga foi administrada a n pacientes e a redução média da pressão arterial foi de $\bar{X} = 10$ mmHg com desvio padrão $S = 3$ mmHG, não temos dúvida de que “em média” a droga reduziu a pressão arterial nos indivíduos da amostra de 10 mmHg. O problema é saber se o resultado obtido na amostra pode ser extrapolado para a população, ou seja se podemos utilizar \bar{X} para estimar a média populacional (μ), que não conhecemos e que não conheceremos a não ser que seja possível fazer um censo. Obviamente, se foram tomados cuidados na seleção da amostra e se o protocolo experimental foi devidamente adotado, faz sentido supor que a redução média da pressão arterial induzida pela droga na população esteja próxima de 10 mmHg mas precisamos então especificar o que entendemos por “próxima”. Isso pode ser feito por intermédio do cálculo da **margem de erro**, que, essencialmente, é uma medida de nossa incerteza na extrapolação dos resultados obtidos na amostra para a população de onde assumimos que foi obtida.

A margem de erro depende do processo amostral, do desvio padrão amostral S , do tamanho amostral n e é dada por $e = kS/\sqrt{n}$ em que k é uma constante que depende do modelo probabilístico adotada e da confiança com que pretendemos fazer a inferência. No caso de uma **amostra aleatória simples** de uma variável X obtida de uma população para a qual assumimos um modelo Normal, a margem de erro correspondente a um nível de confiança de 95% é $e = 1,96S/\sqrt{n}$. Com base nessa margem de erro, podemos construir um **intervalo de confiança** para a média populacional da variável X . Os limites inferior e superior para esse intervalo são, respectivamente, $\bar{X} - 1,96S/\sqrt{n}$ e $\bar{X} + 1,96S/\sqrt{n}$. Se considerássemos um grande número de amostras dessa população sob as mesmas condições, o intervalo construído dessa maneira conteria o verdadeiro (mas desconhecido) valor da média populacional (μ) em 95% delas.

Consideremos uma pesquisa eleitoral em que uma amostra de n eleitores é avaliada quanto à preferência por um determinado candidato. Podemos definir a variável resposta como $X = 1$ se o eleitor apoiar o candidato e $X = 0$ em caso contrário. A média amostral de X é a proporção amostral de eleitores favoráveis ao candidato, que representamos por \hat{p} ; sua variância, $p(1-p)/n$, pode ser estimada por $\hat{p}(1-\hat{p})/n$. Ver Exercício 32. Pode-se demonstrar que os limites inferior e superior de um intervalo de confiança com 95% de confiança para a proporção populacional p de eleitores favoráveis ao candidato são, respectivamente, $\hat{p} - 1,96\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})/n}$ e $\hat{p} + 1,96\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})/n}$. Se numa amostra de tamanho $n = 400$ obtivermos 120 eleitores favoráveis ao candidato, a proporção amostral $\hat{p} = 30\%$ e então podemos dizer que com 95% de confiança a proporção populacional p deve estar entre 25,5% e 34,5%.

Detalhes técnicos sobre a construção de intervalos de confiança podem

ser encontrados em Bussab e Morettin (2017).

3.11 Notas de capítulo

1) Variáveis contínuas

Conceitualmente existem variáveis que podem assumir qualquer valor no conjunto dos números reais, como peso ou volume de certos produtos. Como na prática, todas as medidas que fazemos têm valores discretos, não é possível obter o valor π (que precisa ser expresso com infinitas casas decimais) por exemplo, para peso ou volume. No entanto, em geral, é possível aproximar as distribuições de frequências de variáveis com essa natureza por funções contínuas (como a distribuição normal) e é essa característica que sugere sua classificação como variáveis contínuas.

2) Amplitude de classes em histogramas

Nos casos em que o histograma é obtido a partir dos dados de uma amostra de uma população com densidade $f(x)$, Freedman e Diaconis (1981) mostram que a escolha

$$h = 1,349\tilde{s} \left(\frac{\log n}{n} \right)^{1/3} \quad (3.20)$$

minimiza o desvio máximo absoluto entre o histograma e a verdadeira densidade $f(x)$. Em (3.20), \tilde{s} é um estimador “robusto” do desvio padrão de X . Esse conceito será discutido adiante.

O pacote R usa como *default* o valor de h sugerido por Sturges (1926), dado por

$$h = \frac{W}{1 + 3,322 \log(n)}, \quad (3.21)$$

sendo W a amplitude amostral e n o tamanho da amostra,

3) Definição de histograma

Consideremos um exemplo com classes de comprimentos iguais a h . O número de classes a utilizar pode ser obtido aproximadamente como o quociente $(x_{(n)} - x_{(1)})/h$ em que $x_{(1)}$ é o valor mínimo e $x_{(n)}$, o valor máximo do conjunto de dados. Para que a área do histograma seja igual a 1, a altura do k -ésimo retângulo deve ser igual a f_k/h . Chamando \tilde{x}_k os pontos médios dos intervalos das classes, o histograma pode ser construído a partir da seguinte função

$$\tilde{f}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n I(x - \tilde{x}_i; h/2), \quad (3.22)$$

em que $I(z; h)$ é a função indicadora do intervalo $[-h, h]$, ou seja,

$$I(z; h) = \begin{cases} 1, & \text{se } -h \leq z \leq h \\ 0, & \text{em caso contrário.} \end{cases}$$

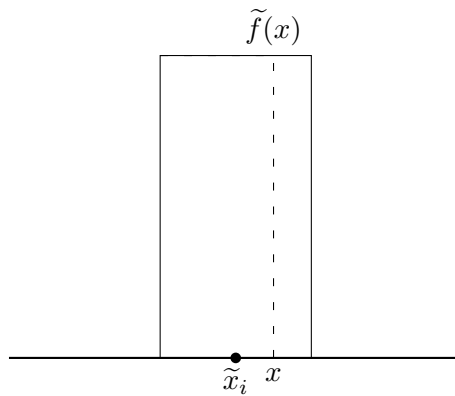


Figura 3.27: Detalhe para a construção de histogramas.

Para representar essa construção, veja a Figura 3.27.

4) **Um estimador alternativo para o desvio padrão**

Pode-se verificar que, para uma distribuição Normal,

$$d_Q = 1,349\sigma$$

com σ^2 representando a variância. Logo, um estimador do desvio padrão populacional é

$$\tilde{s} = \frac{d_Q}{1,349}.$$

Observe que substituindo \tilde{s} em (3.20), obtemos

$$h \approx d_Q \left(\frac{\log n}{n} \right)^{1/3},$$

que também pode ser utilizado para a determinação do número de classes de um histograma.

5) **Padronização de variáveis**

Para comparação de gráficos QQ, por exemplo, convém transformar variáveis com diferentes unidades de medida para deixá-las adimensionais, com a mesma média e mesma variância. Para esse efeito pode-se padronizar uma variável X com média μ e desvio padrão σ por meio da transformação $Z = (X - \mu)/\sigma$. Pode-se mostrar (ver Exercício 15) que a variável padronizada Z tem média 0 e desvio padrão 1, independentemente dos valores de μ e σ . Esse tipo de padronização também é útil em Análise de Regressão (ver Capítulo 6) quando se deseja avaliar a importância relativa de cada variável por meio dos coeficientes do modelo linear adotado.

6) Bandas de confiança para gráficos QQ

Seja X_1, \dots, X_n uma amostra aleatória com função distribuição F desconhecida. A estatística de Kolmogorov-Smirnov [ver Wayne (1990, páginas 319-330), por exemplo], dada por

$$S = \sup_x |F_n(x) - F_0(x)|$$

em que F_n é correspondente função distribuição empírica, serve para testar a hipótese $F = F_0$. A distribuição da estatística S é tabelada de forma que se pode obter o valor crítico s tal que $P(S \leq s) = 1 - \alpha$, $0 < \alpha < 1$. Isso implica que para qualquer valor x temos $|F_n(x) - F_0(x)| \leq s = 1 - \alpha$ ou seja, que com probabilidade $1 - \alpha$ temos $F_n(x) - s \leq F_0(x) \leq F_n(x) + s$. Consequentemente, os limites inferior e superior de um intervalo de confiança com coeficiente de confiança $1 - \alpha$ para F são respectivamente, $F_n(x) - s$ e $F_n(x) + s$. Essas bandas conterão a função distribuição Normal $N(\mu, \sigma^2)$ se

$$F_n(x) - s \leq \Phi[(x - \mu)/\sigma] \leq F_n(x) + s$$

o que equivale a ter uma reta contida entre os limites da banda definida por

$$\Phi^{-1}[F_n(x) - s] \leq (x - \mu)/\sigma \leq \Phi^{-1}[F_n(x) + s].$$

Para a construção do gráfico QQ esses valores são calculados nos pontos X_1, \dots, X_n .

3.12 Exercícios

1) Os arquivos disponíveis em

<http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/rehabcardio.xls>

contêm informações sobre um estudo de reabilitação de pacientes cardíacos. Elabore um relatório indicando possíveis inconsistências na matriz de dados e faça uma análise descritiva de todas as variáveis do estudo.

2) Considere um conjunto de dados X_1, \dots, X_n .

a) Calcule a média e a variância de W_1, \dots, W_n em que $W_i = X_i + k$ com k denotando uma constante.

b) Calcule a média e a variância de V_1, \dots, V_n em que $V_i = kX_i$ com k denotando uma constante.

3) Calcule as medidas de posição e dispersão estudadas para os dados apresentados na Tabela 3.1 (arquivo CD-ceagfgv).

4) Determine o valor de h dado por (3.20) para os dados do Exemplo 3.4.

- 5) Prove que S^2 dado por (3.10) é um estimador não enviesado da variância populacional.
- 6) Considere os dados abaixo, que são medidas da velocidade do vento tomadas no aeroporto de Philadelphia (EUA) à 01:00 h, para os primeiros quinze dias de dezembro de 1974 (Graedel e Kleiner, 1985).
 22,2 61,1 13,0 27,8 22,2 7,4 7,4 7,4 20,4 20,4 20,4 11,1 13,0
 7,4 14,8
 Observe o valor atípico 61,1, que na realidade ocorreu devido a forte tempestade no dia 2 de dezembro. Calcule as medidas de posição e dispersão dadas na Seção 3.3. Comente os resultados.
- 7) Construa gráficos ramo-e-folhas e *boxplot* para os dados do Exercício 6.
- 8) Usando o pacote R, analise a variável “Temperatura” da planilha <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/poluicao.xls>
- 9) Idem, para a variável “Salário de administradores”, disponível na planilha <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/salarios.xls>
- 10) Construa um gráfico ramo-e-folhas e um *boxplot* para os dados de precipitação atmosférica de Fortaleza obtidos em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/precipitacao.xls>
- 11) Transforme os dados do Exercício 6 por meio de (3.17) com $p = 0, 1/4, 1/3, 1/2, 3/4$ e escolha a melhor alternativa de acordo com a medida d_p dada em (3.18).
- 12) Construa gráficos de quantis e simetria para os dados de manchas solares disponível na planilha <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/manchas.xls>.
- 13) Prove a relação (3.8). Como ficaria essa expressão para S^2 ?
- 14) Uma outra medida de assimetria é
- $$A = \frac{(Q_3 - Q_2) - (Q_2 - Q_1)}{Q_3 - Q_1},$$
- que é igual a zero no caso de uma distribuição simétrica. Calcule-a para os dados do Exercício 6.
- 15) Considere os valores X_1, \dots, X_n de uma variável X , com média \bar{X} e desvio padrão S . Mostre que a variável Z , cujos valores são $Z_i = (X_i - \bar{X})/S$, $i = 1, \dots, n$ tem média 0 e desvio padrão 1.

16) Os dados disponíveis em

<http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/endometriose.xls>

são provenientes de um estudo sobre endometriose onde o objetivo é verificar se existe diferença entre os grupos de doentes e controle quanto a algumas características observadas.

- a) O pesquisador responsável pelo estudo tem a seguinte pergunta: as pacientes doentes apresentam mais dor na menstruação do que as pacientes não doentes? Que tipo de análise você faria para responder essa pergunta? Faça-a e tire suas conclusões.
- b) Compare as distribuições das variáveis idade e concentração de PCR durante a menstruação (PCRa) para indivíduos dos grupos controle e doente utilizando medidas resumo (mínimo, máximo, quartis, mediana, média, desvio padrão, etc), *boxplots*, histogramas, gráficos de médias e gráficos QQ. Como você considerou os valores $< 0,5$ da variável PCRa nesses cálculos? Você sugeriria uma outra maneira para considerar tais valores?
- c) Compare a distribuição da variável número de gestações para os dois grupos por intermédio de uma tabela de frequências e do teste qui-quadrado de Pearson. Utilize um método gráfico para representar essa tabela.

17) Os dados apresentados na Figura 3.28 referem-se aos instantes nos quais o centro de controle operacional de estradas rodoviárias recebeu chamados solicitando algum tipo de auxílio em duas estradas num determinado dia.

| | | | | | |
|-----------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Estrada 1 | 12:07:00 AM | 12:58:00 AM | 01:24:00 AM | 01:35:00 AM | 02:05:00 AM |
| | 03:14:00 AM | 03:25:00 AM | 03:46:00 AM | 05:44:00 AM | 05:56:00 AM |
| | 06:36:00 AM | 07:26:00 AM | 07:48:00 AM | 09:13:00 AM | 12:05:00 PM |
| | 12:48:00 PM | 01:21:00 PM | 02:22:00 PM | 05:30:00 PM | 06:00:00 PM |
| | 07:53:00 PM | 09:15:00 PM | 09:49:00 PM | 09:59:00 PM | 10:53:00 PM |
| | 11:27:00 PM | 11:49:00 PM | 11:57:00 PM | | |
| Estrada 2 | 12:03:00 AM | 01:18:00 AM | 04:35:00 AM | 06:13:00 AM | 06:59:00 AM |
| | 08:03:00 AM | 10:07:00 AM | 12:24:00 PM | 01:45:00 PM | 02:07:00 PM |
| | 03:23:00 PM | 06:34:00 PM | 07:19:00 PM | 09:44:00 PM | 10:27:00 PM |
| | 10:52:00 PM | 11:19:00 PM | 11:29:00 PM | 11:44:00 PM | |

Figura 3.28: Planilha com instantes de realização de chamados solicitando auxílio em estradas.

- a) Construa um histograma para a distribuição de frequências de chamados em cada uma das estradas.
- b) Calcule os intervalos de tempo entre as sucessivas chamadas e descreva-os, para cada uma das estradas, utilizando medidas resumo gráficos do tipo *boxplot*. Existe alguma relação entre o tipo de estrada e o intervalo de tempo entre as chamadas?

- c) Por intermédio de um gráfico do tipo QQ, verifique se a distribuição da variável intervalo de tempo entre as chamadas em cada estrada é compatível com um modelo normal. Faça o mesmo para um modelo exponencial. Compare as distribuições de frequências correspondentes às duas estradas.
- 18) As notas finais de um curso de Estatística foram: 7, 5, 4, 5, 6, 3, 8, 4, 5, 4, 6, 4, 5, 6, 4, 6, 6, 3, 8, 4, 5, 4, 5, 5 e 6.
- a) Determine a mediana, os quartis e a média.
- b) Separe o conjunto de dados em dois grupos denominados *aprovados*, com nota pelo menos igual a 5, e *reprovados*. Compare a variância desses dois grupos.
- 19) Considere o seguinte resumo descritivo da pulsação de estudantes com atividade física intensa e fraca:

| Atividade | N | Média | Mediana | DP | Min | Max | Q1 | Q3 |
|-----------|----|-------|---------|------|-----|-----|----|----|
| Intensa | 30 | 79,6 | 82 | 10,5 | 62 | 90 | 70 | 79 |
| Fraca | 30 | 73,1 | 70 | 9,6 | 58 | 92 | 63 | 77 |

DP: desvio padrão

Q1: primeiro quartil

Q3: terceiro quartil

Qual das seguintes afirmações está correta:

- a) 5% e 50% dos estudantes com atividade física intensa e fraca, respectivamente, tiveram pulsação inferior a 70.
- b) A pulsação de um estudante com fraca atividade física é provavelmente inferior a 63.
- c) A atividade física não tem efeito na média da pulsação dos estudantes.
- d) Quaisquer 15 estudantes com fraca atividade física têm pulsação inferior a 70.
- e) Nenhuma das respostas anteriores.
- 20) Considere os gráficos *boxplot* da Figura 3.29. Quais deles correspondem às pulsações dos estudantes submetidos a atividade física intensa e fraca?
- a) A e B b) B e D c) A e C d) B e C
- 21) Os histogramas apresentados na Figura 3.30 mostram a distribuição das temperaturas ($^{\circ}\text{C}$) ao longo de vários dias de investigação para duas regiões (R1 e R2). Podemos dizer que:

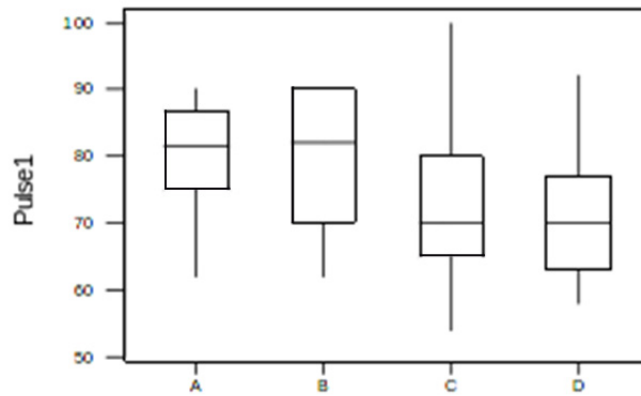


Figura 3.29: *Boxplots* para o Exercício 20.

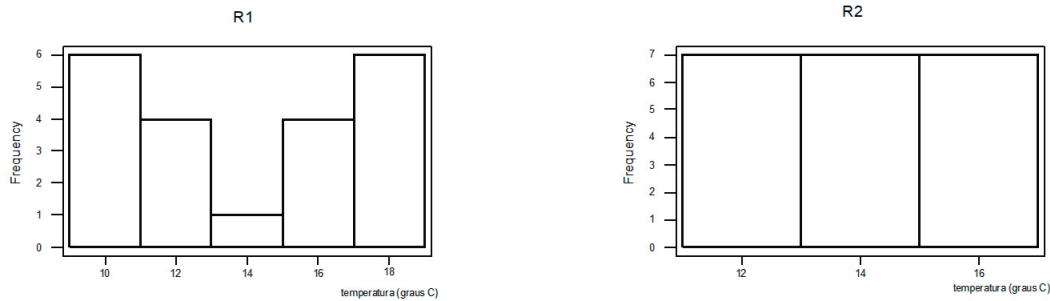


Figura 3.30: Histogramas para o Exercício 20.

- a) As temperaturas das regiões R1 e R2 têm mesma média e mesma variância.
 - b) Não é possível compara as variâncias.
 - c) A temperatura média da região R2 é maior que a de R1.
 - d) As temperaturas das regiões R1 e R2 têm mesma média e variância diferentes.
 - e) Nenhuma das respostas anteriores.
- 22) Na companhia A, a média dos salários é 10000 unidades e o 3º quartil é 5000.
- a) Se você se apresentasse como candidato a funcionário nessa firma e se o seu salário fosse escolhido ao acaso entre todos os possíveis salários, o que seria mais provável: ganhar mais ou menos que 5000 unidades?
 - b) Suponha que na companhia B a média dos salários seja 7000 unidades, a variância praticamente zero e o salário também seja

escolhido ao acaso. Em qual companhia você se apresentaria para procurar emprego, com base somente no salário?

- 23) Num conjunto de dados, o primeiro quartil é 10, a mediana é 15 e o terceiro quartil é 20. Indique quais das seguintes afirmativas são verdadeiras, justificando sua resposta:
- A distância interquartis é 5.
 - O valor 32 seria considerado *outlier* segundo o critério utilizado na construção do *boxplot*.
 - A mediana ficaria alterada de 2 unidades se um ponto com valor acima do terceiro quartil fosse substituído por outro 2 vezes maior.
 - O valor mínimo é maior do que zero.
 - Nenhuma das respostas anteriores.
- 24) A bula de um medicamento A para dor de cabeça afirma que o tempo médio para que a droga faça efeito é de 60 seg com desvio padrão de 10 seg. A bula de um segundo medicamento B afirma que a média correspondente é de 60 seg com desvio padrão de 30 seg. Sabe-se que as distribuições são simétricas. Indique quais das seguintes afirmativas são verdadeiras, justificando sua resposta:
- Os medicamentos são totalmente equivalentes com relação ao tempo para efeito pois as médias são iguais.
 - Com o medicamento A, a probabilidade de cura de sua dor de cabeça antes de 40 seg é maior do que com o medicamento B.
 - Com o medicamento B, a probabilidade de você ter sua dor de cabeça curada antes de 60 seg é maior que com o medicamento A.
- 25) Na tabela abaixo estão indicadas as durações de 335 lâmpadas.

| Duração (horas) | Número de lâmpadas |
|-----------------|--------------------|
| 0 † 100 | 82 |
| 100 † 200 | 71 |
| 200 † 300 | 68 |
| 300 † 400 | 56 |
| 400 † 500 | 43 |
| 500 † 800 | 15 |

- Esboce o histograma correspondente.
- Calcule os quantis de ordem $p=0,1, 0,3, 0,5, 0,7$ e $0,9$.

- 26) A tabela abaixo representa a distribuição do número de dependentes por empregados da Empresa Mirante.

| Dependentes | Empregados |
|-------------|------------|
| 1 | 40 |
| 2 | 50 |
| 3 | 30 |
| 4 | 20 |
| 5 | 10 |
| Total | 100 |

A mediana, média e moda são, respectivamente:

- a) 50; 15; 50 b) 1; 2,1; 1 c) 50,5; 50; 50 d) 1; 1; 1
- 27) Com relação ao Exercício 26, qual a porcentagem de empregados da Empresa Mirante com 2 ou mais dependentes?
- a) 40% b) 50% c) 60% d) 75%

- 28) Os dados encontrados no arquivo disponível em

<http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/esforco.xls>

são provenientes de um estudo sobre teste de esforço cardiopulmonar em pacientes com insuficiência cardíaca. As variáveis medidas durante a realização do teste foram observadas em quatro momentos distintos: repouso (REP), limiar anaeróbio (LAN), ponto de compensação respiratório (PCR) e pico (PICO). As demais variáveis são referentes às características demográficas e clínicas dos pacientes e foram registradas uma única vez.

- a) Descreva a distribuição da variável consumo de oxigênio (VO₂) em cada um dos quatro momentos de avaliação utilizando medidas resumo (mínimo, máximo, quartis, mediana, média, desvio padrão, etc), *boxplots* e histogramas. Você identifica algum paciente com valores de consumo de oxigênio discrepantes? Interprete os resultados.
- b) Descreva a distribuição da classe funcional NYHA por meio de uma tabela de frequências. Utilize um método gráfico para representar essa tabela.
- 29) Num estudo na área de Oncologia, o número de vasos que alimentam o tumor está resumido na seguinte tabela.

Tabela 3.11: Distribuição de frequências do número de vasos que alimentam o tumor

| Número de vasos | Frequência |
|-----------------|------------|
| 0 † 5 | 8 (12%) |
| 5 † 10 | 23 (35%) |
| 10 † 15 | 12 (18%) |
| 15 † 20 | 9 (14%) |
| 20 † 25 | 8 (12%) |
| 25 † 30 | 6 (9%) |
| Total | 66 (100%) |

Indique a resposta correta.

- a) O primeiro quartil é 25%.
 - b) A mediana está entre 10 e 15.
 - c) O percentil de ordem 10% é 10.
 - d) A distância interquartis é 50.
 - e) Nenhuma das respostas anteriores.
- 30) Utilizando o mesmo enunciado da questão anterior, indique a resposta correta:
- a) Não é possível estimar nem a média nem a variância com esses dados.
 - b) A variância é menor que 30.
 - c) A média estimada é 12.8.
 - d) Em apenas 35% dos casos, o número de vasos é maior que 10.
 - e) Nenhuma das anteriores.
- 31) Em dois estudos realizados com o objetivo de estimar o nível médio de colesterol total para uma população de indivíduos saudáveis observaram-se os dados indicados na tabela seguinte:

Tabela 3.12: Medidas descritivas dos estudos A e B

| Estudo | n | Média | Desvio padrão |
|--------|-----|-----------|---------------|
| A | 100 | 160 mg/dL | 60 mg/dL |
| B | 49 | 150 mg/dL | 35 mg/dL |

- Indique a resposta correta:
 - a) Não é possível estimar o nível médio de colesterol populacional só com esses dados.

- b) Se os dois estudos foram realizados com amostras da mesma população não deveria haver diferença entre os desvios padrões amostrais.
 - c) Com os dados do estudo B, o colesterol médio populacional pode ser estimado com mais precisão do que com os dados do estudo A.
 - d) Ambos os estudos sugerem que a distribuição do colesterol na população é simétrica.
 - e) Nenhuma das respostas anteriores.
- 32) Considere uma amostra aleatória simples X_1, \dots, X_n de uma variável X que assume o valor 1 com probabilidade $0 < p < 1$ e o valor 0 com probabilidade $1 - p$. Seja $\hat{p} = n^{-1} \sum_{i=1}^n X_i$. Mostre que

- i) $E(X_i) = p$ e $\text{Var}(X_i) = p(1 - p)$.
- ii) $E(\hat{p}) = p$ e $\text{Var}(\hat{p}) = p(1 - p)/n$.
- iii) $0 < \text{Var}(X_i) < 0,25$.

Com base nesses resultados, utilize o Teorema Limite Central [ver Sen et al. (2009), por exemplo] para construir um intervalo de confiança aproximado conservador (*i.e.* com a maior amplitude possível) para p . Utilize o Teorema de Sverdrup [ver Sen et al. (2009), por exemplo] para construir um intervalo de confiança aproximado para p com amplitude menor que a do intervalo mencionado acima.

- 33) Com a finalidade de entender a diferença entre “desvio padrão” e “erro padrão”,
- a) Simule 1000 dados de uma distribuição normal com média 12 e desvio padrão 4. Construa o histograma correspondente e calcule a média e o desvio padrão amostrais.
 - b) Simule 500 amostras de tamanho $n = 4$ dessa população. Calcule a média amostral de cada amostra, construa o histograma dessas médias e estime o correspondente desvio padrão (que é o erro padrão da média).
 - c) Repite os passos a) e b) com amostras de tamanhos $n = 9$ e $n = 16$. Comente os resultados.
 - d) Repita os passos a) - c) simulando amostras de uma distribuição qui-quadrado com 3 graus de liberdade.

Análise de dados de duas variáveis

4.1 Introdução

Neste capítulo trataremos da análise descritiva da associação entre duas variáveis. *Grosso modo*, dizemos que existe associação entre duas variáveis, se o conhecimento do valor de uma delas nos dá alguma informação sobre a distribuição da outra. Podemos estar interessados, por exemplo, na associação entre o grau de instrução e o salário de um conjunto de indivíduos. Nesse caso, esperamos que quanto maior seja o nível educacional de um indivíduo, maior deve ser o seu salário. Como na análise de uma única variável, também discutiremos o emprego de tabelas e gráficos para representar a distribuição conjunta das variáveis de interesse além de medidas resumo para avaliar o tipo e a magnitude da associação. Podemos destacar três casos:

- i) as duas variáveis são qualitativas;
- ii) as duas variáveis são quantitativas;
- iii) uma variável é qualitativa e a outra é quantitativa.

As técnicas para analisar dados nos três casos acima são distintas. No primeiro caso, a análise é baseada no número de unidades de investigação (amostrais, por exemplo) em cada cela de uma tabela de dupla entrada. No segundo caso, as observações são obtidas por mensurações, e técnicas envolvendo gráficos de dispersão ou de quantis são apropriadas. Na terceira situação, podemos comparar as distribuições da variável quantitativa para cada categoria da variável qualitativa.

Aqui, é importante considerar a classificação das variáveis segundo outra característica, intimamente ligada à forma de coleta dos dados. **Variáveis explicativas** são aquelas cujas categorias ou valores são fixos, seja por planejamento ou seja por condicionamento. **Variáveis respostas** são aquelas cujas categorias ou valores são aleatórios.

Num estudo em que se deseja avaliar o efeito da quantidade de aditivo adicionado ao combustível no consumo de automóveis, cada um de 3 conjun-

tos de 5 automóveis (de mesmo modelo) foi observado sob o tratamento com uma de 4 quantidades de aditivo. O consumo (em km/L) foi avaliado após um determinado período de tempo. Nesse contexto, a variável qualitativa “Quantidade de aditivo” (com 4 categorias) é considerada como explicativa e a variável quantitativa “Consumo de combustível” é classificada como resposta.

Num outro cenário, em que se deseja estudar a relação entre o nível sérico de colesterol (mg/dL) e o nível de obstrução coronariana (em %), cada paciente de um conjunto de 30 selecionados de um determinado hospital foi submetido a exames de sangue e tomográfico. Nesse caso, tanto a variável “Nível sérico de colesterol” quanto a variável “Nível de obstrução coronariana” devem ser encaradas como respostas. Mesmo assim, sob um **enfoque condicional**, em que se deseja avaliar o “Nível de obstrução coronariana” para pacientes com um determinado “Nível sérico de colesterol” a primeira é encarada como variável resposta e a segunda, como explicativa.

4.2 Duas variáveis qualitativas

Nessa situação, as classes das duas variáveis podem ser organizadas numa tabela de dupla entrada, em que as linhas correspondem aos níveis de uma das variáveis e as colunas, aos níveis da outra.

Exemplo 4.1. A planilha coronarias.xls, disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/coronarias.xls> contém dados do projeto “Fatores de risco na doença aterosclerótica coronariana”, coordenado pela Dra. Valéria Bezerra de Carvalho (INTERCOR). O arquivo contém informações sobre cerca de 70 variáveis observadas em 1500 indivíduos.

Para fins ilustrativos, consideramos apenas duas variáveis qualitativas nominais, a saber, hipertensão arterial (X) e insuficiência cardíaca (Y), ambas codificadas com os atributos 0=não tem e 1=tem observadas em 50 pacientes. Nesse contexto, as duas variáveis são classificadas como respostas. Os resultados estão dispostos na Tabela 4.1. A distribuição conjunta

Tabela 4.1: Distribuição conjunta das variáveis X = hipertensão arterial e Y = insuficiência cardíaca

| Insuficiência cardíaca | Hipertensão arterial | | Total |
|------------------------|----------------------|---------|-------|
| | Tem | Não tem | |
| Tem | 12 | 4 | 16 |
| Não tem | 20 | 14 | 34 |
| Total | 32 | 18 | 50 |

das duas variáveis indica, por exemplo, que 12 indivíduos têm hipertensão arterial e insuficiência cardíaca, ao passo que 4 indivíduos não têm hipertensão e têm insuficiência cardíaca. Para efeito de comparação com outros estudos envolvendo as mesmas variáveis mas com número de pacientes dife-

rentes, convém expressar os resultados na forma de porcentagens. Com esse objetivo, podemos considerar porcentagens em relação ao total da tabela, em relação ao total das linhas ou em relação ao total das colunas. Na Tabela 4.2 apresentamos as porcentagens correspondentes à Tabela 4.1 calculadas em relação ao seu total. Os dados da Tabela 4.2 permitem-nos concluir que

Tabela 4.2: Porcentagens para os dados da Tabela 4.1 em relação ao seu total

| Insuficiência cardíaca | Hipertensão | | Total |
|---------------------------|-------------|---------|-------|
| | Tem | Não tem | |
| Tem | 24% | 8% | 32% |
| Não tem | 40% | 28% | 68% |
| Total | 64% | 36% | 100% |

24% dos indivíduos avaliados têm hipertensão e insuficiência cardíaca, ao passo que 36% dos indivíduos avaliados não sofrem de hipertensão.

Também podemos considerar porcentagens calculadas em relação ao total das colunas como indicado na Tabela 4.3. Com base nessa tabela, po-

Tabela 4.3: Porcentagens com totais nas colunas

| Insuficiência cardíaca | Hipertensão | | Total |
|---------------------------|-------------|---------|--------|
| | Tem | Não tem | |
| Tem | 37,5% | 22,2% | 32% |
| Não tem | 62,5% | 77,8% | 68% |
| Total | 100,0% | 100,0% | 100,0% |

demos dizer que independentemente do *status* desses indivíduos quanto à presença de hipertensão, 32% têm insuficiência cardíaca. Esse cálculo de porcentagens é mais apropriado quando uma das variáveis é considerada explicativa e a outra, considerada resposta.

No exemplo, apesar de o planejamento do estudo indicar que as duas variáveis são respostas (a frequência de cada uma delas não foi fixada *a priori*), para efeito da análise, uma delas (Hipertensão arterial) será considerada explicativa. Isso significa que não temos interesse na distribuição de frequências de hipertensos ou não dentre os 50 pacientes avaliados apesar de ainda quisermos avaliar a associação entre as duas variáveis. Nesse caso, dizemos que a variável “Hipertensão arterial” é considerada explicativa **por condicionamento**. Se houvésemos fixado *a priori* um certo número de hipertensos e outro de não hipertensos e então observado quantos dentre cada um desses dois grupos tinham ou não insuficiência cardíaca, diríamos que a variável “Hipertensão arterial” seria considerada explicativa **por planejamento**. Nesse caso, apenas as porcentagens calculadas como na Tabela 4.3 fariam sentido. Uma enfoque análogo poderia ser adotado se fixássemos as frequências de “Insuficiência cardíaca” e considerássemos “Hipertensão arterial” como variável resposta. Nesse caso, as porcentagens deveriam ser

calculadas em relação ao total das linhas da tabela.

Tabelas com a natureza daquelas descritas acima são chamadas de **tabelas de contingência** ou **tabelas de dupla entrada**. Essas tabelas são classificadas como tabelas $r \times c$ em que r é o número de linhas e c é o número de colunas. As tabelas apresentadas acima são, portanto, tabelas 2×2 . Se a variável X tiver 3 categorias e a variável Y , 4 categorias, a tabela de contingência correspondente será uma tabela 3×4 .

Suponha, agora, que queiramos verificar se as variáveis X e Y são associadas. No caso da Tabela 4.2 (em que as duas variáveis são consideradas respostas), dizer que as variáveis não são associadas corresponde a dizer que essas variáveis são (estatisticamente) independentes. No caso da Tabela 4.3 (em que uma variáveis é explicativa, quer por condicionamento, quer por planejamento e a outra é considerada resposta), dizer que as variáveis não são associadas corresponde a dizer que as distribuições de frequências da variável resposta (“Insuficiência cardíaca”) para indivíduos classificados em cada categoria da variável explicativa (“Hipertensão arterial”) são homogêneas.

Nas Tabelas 4.2 ou 4.3, por exemplo, há diferenças, que parecem não ser “muito grandes”, o que nos leva a conjecturar que **para a população de onde esses indivíduos foram extraídos**, as duas variáveis não são associadas. Para avaliar essa conjectura, pode-se construir um **teste formal** para essa **hipótese de inexistência de associação** (independência ou homogeneidade), nomeadamente

$$H : X \text{ e } Y \text{ são não associadas.}$$

Convém sempre lembrar que a hipótese H refere-se à associação entre as variáveis X e Y na população (geralmente conceitual) de onde foi extraída uma amostra cujos dados estão dispostos na tabela. Não há dúvidas de que na tabela, as distribuições de frequências correspondentes às colunas rotuladas por “Tem” e “Não tem” hipertensão são diferentes.

Se as duas variáveis não fossem associadas, deveríamos porcentagens iguais nas colunas da Tabela 4.3 rotuladas “Tem” e “Não tem”. Podemos então calcular as frequências esperadas nas celas da tabela admitindo que a hipótese H seja verdadeira. Por exemplo, o valor 10,2 corresponde a 32% de 32, ou ainda, $10,2 = (32 \times 16)/50$. Observe que os valores foram arredondados segundo a regra usual e que as somas de linhas e colunas são as mesmas da Tabela 4.1.

Tabela 4.4: Valores esperados das frequências na Tabela 4.3 sob H

| Insuficiência Cardíaca | Hipertensão | | Total |
|---------------------------|-------------|---------|-------|
| | Tem | Não Tem | |
| Tem | 10,2 | 5,8 | 16 |
| Não Tem | 21,8 | 12,2 | 34 |
| Total | 32 | 18 | 50 |

Chamando os valores observados por o_i e os esperados por e_i , $i = 1, 2, 3, 4$, podemos calcular os **resíduos** $r_i = o_i - e_i$ e verificar que $\sum_i r_i = 0$. Uma medida da discrepância entre os valores observados e aqueles esperados sob a hipótese H é a chamada estatística ou **qui-quadrado** de Pearson, dada por

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^4 \frac{(o_i - e_i)^2}{e_i}. \quad (4.1)$$

No nosso exemplo, $\chi^2 = 1,3$. Quanto maior esse valor, maior a **evidência** de que a hipótese H não é verdadeira, ou seja de que as variáveis X e Y são associadas (na população de onde foi extraída a amostra que serviu de base para os cálculos). Resta saber se o valor observado é suficientemente grande para concluirmos que H não é verdadeira. Com essa finalidade, teríamos que fazer um teste formal, o que não será tratado nesse texto. Veja Bussab e Morettin (2017) para detalhes.

A própria estatística de Pearson poderia servir como medida da intensidade da associação mas o seu valor aumenta com o tamanho da amostra; uma alternativa para corrigir esse problema é o **coeficiente de contingência de Pearson**, dado por

$$C = \sqrt{\frac{\chi^2}{\chi^2 + n}}. \quad (4.2)$$

Para o Exemplo 4.1, temos que $C = \sqrt{1,3/(1,3 + 50)} = 0,16$, que é um valor pequeno. Esse coeficiente tem interpretação semelhante à do coeficiente de correlação, a ser tratado na próxima seção. Mas enquanto esse último varia entre -1 e $+1$, C , como definido acima, não varia entre 0 e 1 (em módulo). O valor máximo de C depende do número de linhas, r , e do número de colunas, c , da tabela de contingência. Uma modificação de C é o coeficiente de Tschuprov,

$$T = \sqrt{\frac{\chi^2/n}{\sqrt{(r-1)(c-1)}}}, \quad (4.3)$$

que atinge o valor máximo igual a 1 quando $r = c$. No Exemplo 4.1, $T = 0,16$.

Em estudos que envolvem a mesma característica observada sob duas condições diferentes (gerando duas variáveis, X e Y , cada uma correspondendo à observação da característica sob uma das condições), sabe-se *a priori* que elas são associadas e o interesse recai sobre a avaliação da concordância dos resultados em ambas as condições. Nesse contexto, consideremos um exemplo em que as redações de 445 alunos são classificadas por cada um de dois professores (A e B) como “ruim”, “média” ou “boa” com os resultados resumidos na Tabela 4.5.

Tabela 4.5: Frequências de redações classificadas por dois professores

| Professor A | Professor B | | |
|-------------|-------------|-------|-----|
| | ruim | média | boa |
| ruim | 192 | 1 | 5 |
| média | 2 | 146 | 5 |
| boa | 11 | 12 | 71 |

Se todas as frequências estivessem dispostas ao longo da diagonal principal da tabela, diríamos que a haveria completa concordância entre os dois professores com relação ao critério de avaliação das redações. Como em geral isso não acontece, é conveniente construir um índice para avaliar a magnitude da concordância. O índice

$$\kappa = \frac{\sum_{i=1}^3 p_{ii} - \sum_{i=1}^3 p_{i+p+i}}{1 - \sum_{i=1}^3 p_{i+p+i}},$$

denominado κ de Cohen (1960) é o mais utilizado com esse propósito. Nessa expressão, p_{ij} representa frequência relativa associada à cela correspondente à linha i e coluna j da tabela e p_{i+} e p_{+j} representam a soma das frequências relativas associadas à linha i e coluna j , respectivamente. O numerador corresponde à diferença entre a soma das frequências relativas correspondentes à diagonal principal da tabela e a soma das frequências relativas que seriam esperadas se as avaliações dos dois professores fossem independentes. Portanto, quando há concordância completa, $\sum_{i=1}^3 p_{ii} = 1$, o numerador é igual ao denominador e o valor do índice de Cohen é $\kappa = 1$. Quando os dois professores não concordam em nenhuma das avaliações, $\kappa < 0$. Para os dados da Tabela 4.5 temos $\kappa = 0.87$ sugerindo uma “boa” concordância entre as avaliações dos dois professores. Embora o nível de concordância medido pelo índice κ seja subjetivo e dependa da área em que se realiza o estudo gerador dos dados, há autores que sugerem modelos de classificação, como aquele proposto por Viera and Garrett (2005) e reproduzido na Tabela 4.6

Tabela 4.6: Níveis de concordância segundo o índice κ de Cohen

| κ de Cohen | Nível de concordância |
|-------------------|------------------------|
| < 0 | Menor do que por acaso |
| 0.01–0.20 | Leve |
| 0.21– 0.40 | Razoável |
| 0.41–0.60 | Moderado |
| 0.61–0.80 | Substancial |
| 0.81–0.99 | Quase perfeito |

Para salientar discordâncias mais extremas como no exemplo, um pro-

fessor classifica a redação como “ruim” e o outro como “boa”, pode-se considerar o índice κ ponderado, definido como

$$\kappa_p = \frac{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 w_{ij} p_{ij} - \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 w_{ij} p_{i+p+j}}{1 - \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 w_{ij} p_{i+p+j}},$$

em que w_{ij} , $i, j = 1, 2, 3$ é um conjunto de pesos convenientes. Por exemplo, $w_{ii} = 1$, $w_{ij} = 1 - (i - j)/(I - 1)$ em que I é o número de categorias em que a característica de interesse é classificada. Para o exemplo, $w_{12} = w_{21} = w_{23} = w_{32} = 1 - 1/2 = 1/2$, $w_{13} = w_{31} = 1 - 2/2 = 0$.

Exemplo 4.2. A Tabela 4.7 contém dados sobre o tipo de escola cursada por alunos aprovados no vestibular da USP em 2018.

Tabela 4.7: Frequências de alunos aprovados no vestibular de 2018 na USP

| Tipo de escola frequentada | Área do conhecimento | | | Total |
|-------------------------------|----------------------|--------|---------|-------|
| | Biológicas | Exatas | Humanas | |
| Pública | 341 | 596 | 731 | 1668 |
| Privada | 1327 | 1957 | 2165 | 5449 |
| Principalmente pública | 100 | 158 | 178 | 436 |
| Principalmente privada | 118 | 194 | 196 | 508 |
| Total | 1886 | 2905 | 3270 | 8061 |

O valor da estatística de Pearson (4.1) correspondente aos dados da Tabela 4.7 é $\chi^2 = 15$; com base na distribuição χ^2 com $6 = (4 - 1)(3 - 1)$ graus de liberdade obtemos $p = 0,02$ o que sugere uma associação entre as duas variáveis (tipo de escola e área do conhecimento). No entanto, essa conclusão não tem significância prática, pois a estatística de Pearson terá um valor tanto maior quanto maior for o total da tabela, mesmo que a associação entre as variáveis seja muito tênue. Nesse contexto, convém avaliar essa associação por intermédio dos coeficientes de contingência de Pearson (4.2) ou de Tschuprov (4.3), entre outros. Para o exemplo, seus valores são, respectivamente, 0,043 e 0,027, sugerindo uma associação de pequena intensidade.

Para comparar as preferências de formação profissional entre alunos que frequentaram diferentes tipos de escola, consideramos as frequências relativas tomando como base os totais das linhas; os resultados estão dispostos na Tabela 4.8.

Tabela 4.8: Frequências relativas de preferências por área de conhecimento (por tipo de escola)

| Tipo de escola frequentada | Área do conhecimento | | | Total |
|----------------------------|----------------------|--------|---------|--------|
| | Biológicas | Exatas | Humanas | |
| Pública | 20,5% | 35,7% | 43,8% | 100,0% |
| Privada | 24,4% | 35,9% | 39,7% | 100,0% |
| Principalmente pública | 23,0% | 36,2% | 40,8% | 100,0% |
| Principalmente privada | 23,2% | 38,2% | 38,6% | 100,0% |
| Total | 23,4% | 36,0% | 40,6% | 100,0% |

Grosso modo podemos dizer que cerca de 40% dos alunos que frequentaram escolas públicas ou privadas, mesmo que parcialmente, matricularam-se em cursos de Ciências Humanas, cerca de 36% de alunos com as mesmas características matricularam-se em cursos de Ciências Exatas e os demais 24% em cursos de Ciências Biológicas. Note que foi necessário um ajuste em algumas frequências relativas (por exemplo, o valor correspondente à cela Escola Pública/Ciências Biológicas deveria ser 20,4% e não 20,5%) para que o total somasse 100% mantendo a aparência da tabela com apenas uma casa decimal.

Se, por outro lado, o objetivo for avaliar o tipo de escola frequentado por alunos matriculados em cada área do conhecimento, devemos calcular as frequências relativas tomando como base o total da colunas; os resultados estão dispostos na Tabela 4.9 e sugerem que dentre os alunos que optaram por qualquer das três áreas, cerca de 21% são oriundos de escolas públicas, cerca de 68% de escolas privadas com os demais 11% tendo cursado escolas públicas ou privadas parcialmente.

Tabela 4.9: Frequências relativas tipo de escola cursada (por área do conhecimento)

| Tipo de escola frequentada | Área do conhecimento | | | Total |
|----------------------------|----------------------|--------|---------|--------|
| | Biológicas | Exatas | Humanas | |
| Pública | 18,1% | 20,5% | 22,4% | 20,7% |
| Privada | 70,3% | 67,4% | 66,2% | 67,6% |
| Principalmente pública | 5,3% | 5,4% | 5,4% | 5,4% |
| Principalmente privada | 6,3% | 6,7% | 6,0% | 6,3% |
| Total | 100,0% | 100,0% | 100,0% | 100,0% |

Em muitas áreas do conhecimento há interesse em avaliar a associação entre um ou mais **fatores de risco** e uma variável resposta. Num estudo epidemiológico, por exemplo, pode haver interesse em avaliar a associação entre o hábito tabagista (fator de risco) e a ocorrência de algum tipo de câncer pulmonar (variável resposta). Um exemplo na área de Seguros pode envolver a avaliação da associação entre estado civil e sexo (considerados

como fatores de risco) e o envolvimento em acidente automobilístico (variável resposta).

No primeiro caso, os dados obtidos de uma amostra de 50 fumantes e 100 não fumantes, por exemplo, para os quais se observa a ocorrência de câncer pulmonar após um determinado período podem ser dispostos no formato da Tabela 4.10. Esse tipo de estudo em que se fixam os níveis do fator de risco (hábito tabagista) e se observa a ocorrência do evento de interesse (câncer pulmonar) após um determinado tempo é conhecido como **estudo prospectivo**.

Tabela 4.10: Frequências de doentes observados num estudo prospectivo

| Hábito tabagista | Câncer pulmonar | | Total |
|---------------------|-----------------|-----|-------|
| | sem | com | |
| não fumante | 80 | 20 | 100 |
| fumante | 35 | 15 | 50 |

Para a população da qual essa amostra é considerada oriunda (e para a qual se quer fazer inferência), a tabela correspondente pode ser expressa como na Tabela 4.11.

Tabela 4.11: Probabilidades de ocorrência de doença

| Hábito tabagista | Câncer pulmonar | | Total |
|---------------------|-----------------|---------|-------|
| | sem | com | |
| não fumante | $1 - \pi_0$ | π_0 | 1 |
| fumante | $1 - \pi_1$ | π_1 | 1 |

O parâmetro π_0 corresponde à proporção (ou probabilidade) de indivíduos que contraem câncer pulmonar dentre os que SABEMOS ser não fumantes; analogamente, π_1 corresponde à proporção (ou probabilidade) de indivíduos que contraem câncer pulmonar dentre os que SABEMOS ser fumantes.

Nesse contexto podemos definir algumas medidas de associação (entre o fator de risco e a variável resposta).

- i) **Risco atribuível:** $d = \pi_1 - \pi_0$ que corresponde à diferença entre as probabilidades de ocorrência do evento de interesse para expostos e não expostos ao fator de risco.
- ii) **Risco relativo:** $r = \pi_1/\pi_0$ que corresponde ao quociente entre as probabilidades de ocorrência do evento de interesse para expostos e não expostos ao fator de risco.
- iii) **Razão de chances (odds ratio)**¹: $\omega = [\pi_1/(1 - \pi_1)]/[\pi_0/(1 - \pi_0)]$ que

¹Lembremos que **probabilidade** é uma medida de frequência de ocorrência de um evento (quanto maior a probabilidade de um evento, maior a frequência com que ele ocorre) cujos valores variam entre 0 e 1 (ou entre 0% e 100%). Uma medida de frequência

corresponde ao quociente entre as chances de ocorrência do evento de interesse para expostos e não expostos ao fator de risco.

No exemplo da Tabela 4.10 essas medidas de associação podem ser estimadas como

- i) Risco atribuível: $d = 0,30 - 0,20 = 0,10$ (o risco de ocorrência de câncer pulmonar aumenta de 10% para fumantes relativamente aos não fumantes).
- ii) Risco relativo: $r = 0,30/0,20 = 1,50$ (o risco de ocorrência de câncer pulmonar para fumantes é 1,5 vezes o risco correspondente para não fumantes).
- iii) Chances: a chance de ocorrência de câncer pulmonar para fumantes é $0,429 = 0,30/0,70$; a chance de ocorrência de câncer pulmonar para não fumantes é $0,250 = 0,20/0,80$.
- iv) Razão de chances: $\omega = 0,429/0,250 = 1,72$ (a chance de ocorrência de câncer pulmonar para fumantes é 1,71 vezes a chance correspondente para não fumantes).

Em geral, a medida de associação de maior interesse prático pela facilidade de interpretação, seja o risco relativo, a razão de chances talvez seja a mais utilizada na prática. Primeiramente, observemos que

$$\omega = \frac{\pi_1/(1 - \pi_1)}{\pi_0/(1 - \pi_0)} = r \frac{1 - \pi_0}{1 - \pi_1} \longrightarrow r, \text{ quando } \pi_0 \text{ e } \pi_1 \longrightarrow 0$$

ou seja, para eventos raros [cujas probabilidade π_1 ou π_0 são muito pequenas], a razão de chances serve como uma boa aproximação do risco relativo.

Em geral, estudos prospectivos com a natureza daquele que motivou a discussão acima não são praticamente viáveis em função do tempo decorrido até o diagnóstico da doença. Uma alternativa é a condução de **estudos retrospectivos** em que, por exemplo, são selecionados 35 pacientes com e 115 pacientes sem câncer pulmonar e se determinam quais dentre eles eram fumantes e não fumantes. Nesse caso, os papéis das variáveis explicativa e resposta se invertem, sendo o *status* relativo à presença da moléstia encarado como variável explicativa e o hábito tabagista, como variável resposta. A Tabela 4.12 contém dados hipotéticos de um estudo retrospectivo planejado com o mesmo intuito do estudo prospectivo descrito acima, ou seja, avaliar a associação entre tabagismo e ocorrência de câncer de pulmão.

equivalente mas com valores entre 0 e ∞ é conhecida como **chance** (*odds*). Por exemplo, se um evento ocorre com probabilidade 0.8 (80%), a chance de ocorrência é 4 (= 80% / 20%) ou mais comumente de 4 para 1, indicando que em cinco casos, o evento ocorre em 4 e não ocorre em 1.

Tabela 4.12: Frequências de fumantes observados num estudo retrospectivo

| Hábito | Câncer pulmonar | |
|-------------|-----------------|-----|
| | sem | com |
| tabagista | | |
| não fumante | 80 | 20 |
| fumante | 35 | 15 |
| Total | 115 | 35 |

A Tabela 4.13 representa as probabilidades pertinentes.

Tabela 4.13: Probabilidades de hábito tabagista

| Hábito | Câncer pulmonar | |
|-------------|-----------------|-----------|
| | sem | com |
| tabagista | | |
| não fumante | $1 - p_0$ | $1 - p_1$ |
| fumante | p_0 | p_1 |
| Total | 1 | 1 |

O parâmetro p_0 corresponde à proporção (ou probabilidade) de fumantes DENTRE os indivíduos que SABEMOS não ter câncer pulmonar; analogamente, p_1 corresponde à proporção (ou probabilidade) de não fumantes DENTRE os indivíduos que SABEMOS ter câncer pulmonar. Nesse caso, não é possível calcular nem o risco atribuível nem o risco relativo, pois não se conseguem estimar as probabilidades de ocorrência de câncer pulmonar, π_1 ou π_0 . No entanto, pode-se demonstrar (ver Nota de Capítulo 1) que a razão de chances obtida por meio de um estudo retrospectivo é igual àquela que seria obtida por intermédio de um estudo prospectivo correspondente ou seja

$$\omega = \frac{p_1/(1 - p_1)}{p_0/(1 - p_0)} = \frac{\pi_1/(1 - \pi_1)}{\pi_0/(1 - \pi_0)}.$$

Num estudo retrospectivo, pode-se afirmar que a chance de ocorrência do evento de interesse (câncer pulmonar, por exemplo) para indivíduos expostos ao fator de risco é ω vezes a chance correspondente para indivíduos não expostos, embora não se possa estimar quanto valem essas chances. A partir das frequências da Tabela 4.12 podemos estimar a chance de um indivíduo ser fumante dado que tem câncer pulmonar como $0,751 = 0,429/0,571$ e a chance de um indivíduo ser fumante dado que não tem câncer pulmonar como $0,437 = 0,304/0,696$; a razão de chances correspondente é $\omega = 0,751/0,437 = 1,72$. Essas chances não são aquelas de interesse pois gostaríamos de conhecer as chances de ter câncer pulmonar para indivíduos fumantes e não fumantes. No entanto a razão de chances tem o mesmo valor que aquela calculada por meio de um estudo prospectivo, ou seja, a partir da análise dos dados da Tabela 4.12, não é possível calcular a chance de ocorrência de câncer pulmonar nem para fumantes nem para não fumantes mas podemos concluir que a primeira é 1,72 vezes a segunda.

Dados provenientes de estudos planejados com o objetivo de avaliar a capacidade de testes laboratoriais ou exames médicos para diagnóstico de alguma doença envolvem a classificação de indivíduos segundo duas variáveis; a primeira corresponde ao verdadeiro *status* relativamente à presença da moléstia (doente ou não doente) e a segunda ao resultado do teste (positivo ou negativo). Dados correspondentes aos resultados de um determinado teste aplicado a n indivíduos podem ser dispostos no formato da Tabela 4.14.

Tabela 4.14: Frequência de pacientes submetidos a um teste diagnóstico

| Verdadeiro status | Resultado do teste | | Total |
|----------------------|--------------------|---------------|----------|
| | positivo (T+) | negativo (T-) | |
| doente (D) | n_{11} | n_{12} | n_{1+} |
| não doente (ND) | n_{21} | n_{22} | n_{2+} |
| Total | n_{+1} | n_{+2} | n |

Aqui, n_{ij} corresponde à frequência de indivíduos com o i -ésimo *status* relativo à doença ($i = 1$ para doentes e $i = 2$ para não doentes) e j -ésimo *status* relativo ao resultado do teste ($j = 1$ para resultado positivo e $j = 2$ para resultado negativo). Além disso, $n_{i+} = n_{i1} + n_{i2}$ e $n_{+j} = n_{1j} + n_{2j}$, $i, j = 1, 2$. As seguintes características associadas aos testes diagnóstico são bastante utilizadas na prática.

- i) **Sensibilidade:** corresponde à probabilidade de resultado positivo para pacientes doentes [$S = P(T+|D)$] e pode ser estimada por $s = n_{11}/n_{1+}$;
- ii) **Especificidade:** corresponde à probabilidade de resultado negativo para pacientes não doentes [$E = P(T-|ND)$] e pode ser estimada por $e = n_{22}/n_{2+}$;
- iii) **Falso positivo:** corresponde à probabilidade de resultado positivo para pacientes não doentes [$FP = P(ND|T+)$] e pode ser estimada por $fp = n_{21}/n_{+1}$;
- iv) **Falso negativo:** corresponde à probabilidade de resultado negativo para pacientes doentes [$FN = P(D|T-)$] e pode ser estimada por $fn = n_{12}/n_{+2}$;
- v) **Valor preditivo positivo:** corresponde à probabilidade de que o paciente seja doente dado que o resultado do teste é positivo [$VPP = P(D|T+)$] e pode ser estimada por $vpp = n_{11}/n_{+1}$;
- vi) **Valor preditivo negativo:** corresponde à probabilidade de que o paciente não seja doente dado que o resultado do teste é negativo [$VPN = P(ND|T-)$] e pode ser estimada por $vpn = n_{22}/n_{+2}$;
- vii) **Acurácia:** corresponde à probabilidade de resultados corretos [$AC = P\{(D \cap T+) \cup (ND \cap T-)\}$] e pode ser estimada por $ac = (n_{11} + n_{22})/n$.

A sensibilidade de um teste corresponde à proporção de doentes identificados por seu intermédio, ou seja, é um indicativo da capacidade de o teste

detectar a doença. Por outro lado, a especificidade de um teste corresponde à sua capacidade de identificar indivíduos que não têm a doença.

Quanto maior a sensibilidade de um teste, menor é a possibilidade de que indique falsos positivos. Um teste com sensibilidade de 95%, por exemplo, consegue identificar um grande número de pacientes que realmente têm a doença e por esse motivo testes com alta sensibilidade são utilizados em triagens. Quanto maior a especificidade de um teste, maior é a probabilidade de apresentar um resultado negativo para pacientes que não têm a doença. Se, por exemplo, a especificidade de um teste for de 99% dificilmente um paciente que não tem a doença terá um resultado positivo. Um bom teste é aquele que apresenta alta sensibilidade e alta especificidade, mas nem sempre isso é possível.

O valor preditivo positivo indica a probabilidade de um indivíduo ter a doença dado que o resultado do teste é positivo e valor preditivo negativo indica a probabilidade de um indivíduo não ter a doença dado um resultado negativo no teste.

Sensibilidade e especificidade são características do teste, mas tanto o valor preditivo positivo quanto o valor preditivo negativo dependem da **prevalência** (porcentagem de indivíduos doentes) da doença. Consideremos um exemplo em que o mesmo teste diagnóstico é aplicado em duas comunidades com diferentes prevalências de uma determinada doença. A Tabela 4.15 contém os dados da comunidade em que a doença é menos prevalente e a Tabela 4.16 contém os dados da comunidade em que a doença é mais prevalente.

Tabela 4.15: Frequência de pacientes submetidos a um teste diagnóstico (prevalência da doença = 15%)

| Verdadeiro status | Resultado do teste | | Total |
|----------------------|--------------------|---------------|-------|
| | positivo (T+) | negativo (T-) | |
| doente (D) | 20 | 10 | 30 |
| não doente (ND) | 80 | 90 | 170 |
| Total | 100 | 100 | 200 |

Tabela 4.16: Frequência de pacientes submetidos a um teste diagnóstico (prevalência da doença = 30%)

| Verdadeiro status | Resultado do teste | | Total |
|----------------------|--------------------|---------------|-------|
| | positivo (T+) | negativo (T-) | |
| doente (D) | 40 | 20 | 60 |
| não doente (ND) | 66 | 74 | 140 |
| Total | 106 | 94 | 200 |

Os valores estimados para a sensibilidade, especificidade, valores preditivo positivo e negativo além da acurácia estão dispostos na Tabela 4.17

Tabela 4.17: Características do teste aplicado aos dados das Tabelas 4.15 e 4.16

| Característica | População com doença | |
|----------------|----------------------|-----------------|
| | menos prevalente | mais prevalente |
| Sensibilidade | 67% | 67% |
| Especificidade | 53% | 53% |
| VPP | 20% | 38% |
| VPN | 90% | 79% |
| Acurácia | 55% | 57% |

4.3 Duas variáveis quantitativas

Uma das principais ferramentas para avaliar a associação entre duas variáveis quantitativas é o **gráfico de dispersão**. Consideremos um conjunto de n pares de valores (x_i, y_i) de duas variáveis X e Y , o gráfico de dispersão correspondente é um gráfico cartesiano em que os valores de uma das variáveis são colocados no eixo das abscissas e os da outra, no eixo das ordenadas.

Exemplo 4.3 Os dados contidos na Tabela 4.18 correspondem a um estudo cujo objetivo principal era avaliar a associação entre o volume (cm^3) do lobo direito de fígados humanos medido ultrassonograficamente e o seu peso (g). Um objetivo secundário era avaliar a concordância de medidas ultrassonográficas do volume (Volume1 e Volume2) realizadas por dois observadores. O volume foi obtido por meio da média das duas medidas ultrassonográficas. Os dados estão disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/figado.xls> e detalhes podem ser obtidos em Zan (2005).

O gráfico de dispersão correspondente às variáveis Volume e Peso está apresentado na Figura 4.1. Nesse gráfico pode-se notar que a valores menores do volume correspondem valores menores do peso e a valores maiores do volume correspondem valores maiores do peso, sugerindo uma associação positiva e possivelmente linear entre as duas variáveis. Além disso, o gráfico permite identificar um possível ponto discrepante (*outlier*) correspondente à unidade amostral em que o volume é $725cm^3$ e o peso é $944,7g$. A utilização desses resultados para a construção de um modelo que permita estimar o peso como função do volume é o objeto da técnica conhecida como Análise de Regressão que será considerada no Capítulo 6.

Dado um conjunto de n pares (x_i, y_i) , a associação (linear) entre as variáveis quantitativas X e Y pode ser quantificada por meio do **coeficiente de correlação (linear)** de Pearson, definido por

$$r_P = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{[\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2]^{1/2}}. \quad (4.4)$$

Pode-se mostrar que $-1 \leq r_P \leq 1$ e, na prática, se o valor r_P estiver próximo

Tabela 4.18: Peso e volume do lobo direito de enxertos de fígado

| Volume1 (cm^3) | Volume2 (cm^3) | Volume (cm^3) | Peso (g) |
|--------------------|--------------------|-------------------|----------|
| 672,3 | 640,4 | 656,3 | 630 |
| 686,6 | 697,8 | 692,2 | 745 |
| 583,1 | 592,4 | 587,7 | 690 |
| 850,1 | 747,1 | 798,6 | 890 |
| 729,2 | 803,0 | 766,1 | 825 |
| 776,3 | 823,3 | 799,8 | 960 |
| 715,1 | 671,1 | 693,1 | 835 |
| 634,5 | 570,2 | 602,3 | 570 |
| 773,8 | 701,0 | 737,4 | 705 |
| 928,3 | 913,6 | 920,9 | 955 |
| 916,1 | 929,5 | 922,8 | 990 |
| 983,2 | 906,2 | 944,7 | 725 |
| 750,5 | 881,7 | 816,1 | 840 |
| 571,3 | 596,9 | 584,1 | 640 |
| 646,8 | 637,4 | 642,1 | 740 |
| 1021,6 | 917,5 | 969,6 | 945 |

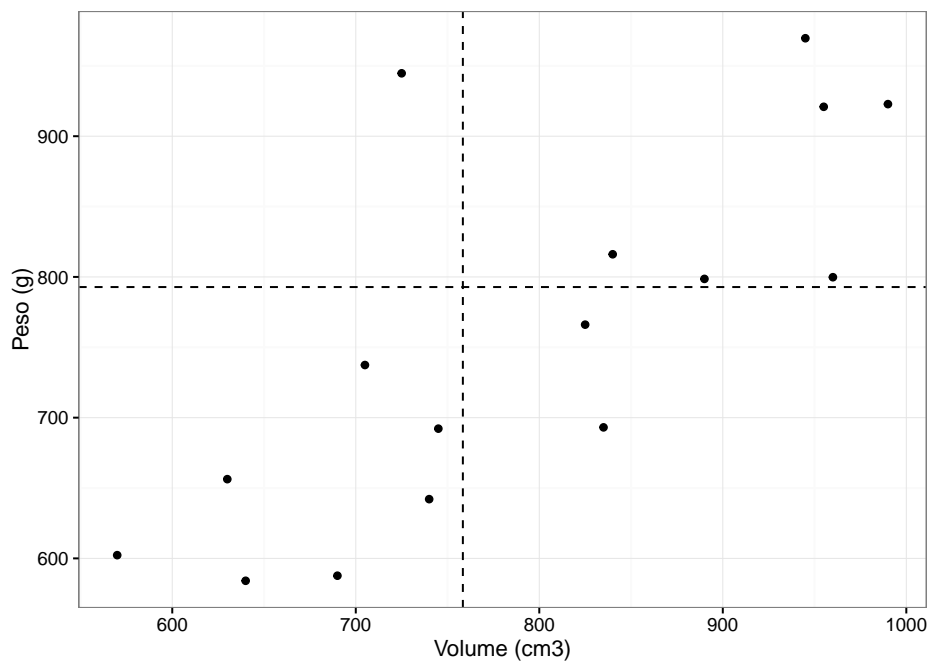


Figura 4.1: Gráfico de dispersão entre peso e volume do lobo direito de enxertos de fígado.

de -1 ou $+1$, pode-se dizer que as variáveis são fortemente associadas ou linearmente correlacionadas; por outro lado, se o valor de r_P estiver próximo de zero, dizemos que as variáveis são não correlacionadas. Quanto mais próximos de uma reta estiverem os pontos (x_i, y_i) , maior será a intensidade da correlação (linear) entre elas.

Não é difícil mostrar que

$$r_P = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{[(\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2)(\sum_{i=1}^n y_i^2 - n\bar{y}^2)]^{1/2}}. \quad (4.5)$$

Essa expressão é mais conveniente que (4.4), pois basta calcular: (a) as médias amostrais \bar{x} e \bar{y} ; (b) a soma dos produtos $x_i y_i$ e (c) a soma dos quadrados dos x_i e a soma dos quadrados dos y_i .

Para os dados do Exemplo 4.3, o coeficiente de correlação de Pearson é 0,76. Se excluirmos o dado discrepante identificado no gráfico de dispersão, o valor do coeficiente de correlação de Pearson é 0,89, evidenciando a falta de robustez desse coeficiente relativamente a observações com essa natureza. Nesse contexto, uma medida de associação mais robusta é o coeficiente de correlação de Spearman, cuja expressão é similar à (4.4) com os valores das variáveis X e Y substituídos pelos respectivos postos.² Mais especificamente, o coeficiente de correlação de Spearman é

$$r_S = \frac{\sum_{i=1}^n (R_i - \bar{R})(S_i - \bar{S})}{[\sum_{i=1}^n (R_i - \bar{R})^2 \sum_{i=1}^n (S_i - \bar{S})^2]^{1/2}}, \quad (4.6)$$

em que R_i corresponde ao posto da i -ésima observação da variável X entre seus valores e \bar{R} à média desses postos e S_i e \bar{S} têm interpretação similar para a variável Y . Para efeito de cálculo pode-se mostrar que a expressão (4.6) é equivalente a

$$r_S = 1 - 6 \sum_{i=1}^n (R_i - S_i)^2 / [n(n^2 - 1)]. \quad (4.7)$$

Os dados correspondentes à Figura 4.2 foram gerados a partir da expressão $z_i = 1 + 0,25x_i + e_i$ com e_i simulado a partir de uma distribuição Normal padrão e com as três últimas observações acrescidas de 15. Para esses dados obtemos $r_P = 0.73$ e $r_S = 0.90$. Eliminando as três observações com valores discrepantes, os coeficientes de correlação correspondentes são $r_P = 0.85$ e $r_S = 0.84$, indicando que o primeiro é mais afetado do que o segundo.

Além disso, o coeficiente de correlação de Spearman também é mais apropriado para avaliar associações não lineares, desde que sejam monotônicas,

²O posto de uma observação x_i é o índice correspondente à sua posição no conjunto ordenado $x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}$. Por exemplo, dado o conjunto de observações $x_1 = 4$, $x_2 = 7$, $x_3 = 5$, $x_4 = 13$, $x_5 = 6$, $x_6 = 5$, o posto correspondente à x_5 é 4. Quando há observações com o mesmo valor, o posto correspondente a cada uma delas é definido como a média dos postos correspondentes. No exemplo, os postos das observações x_3 e x_6 são iguais a $2,5 = (2 + 3)/2$.

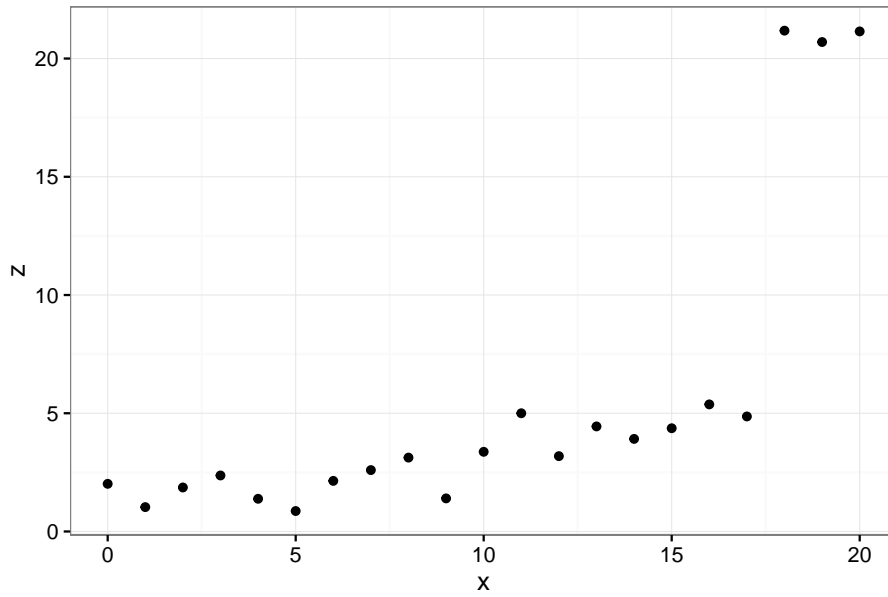


Figura 4.2: Gráfico de dispersão entre valores de duas variáveis X e Z .

i.e., em que os valores de uma das variáveis só aumentam ou só diminuem conforme a segunda variável aumenta (ou diminui). Os dados representados na Figura 4.3 foram gerados a partir da expressão $y_i = \exp(0.4x_i)$, $i = 1, \dots, 20$.

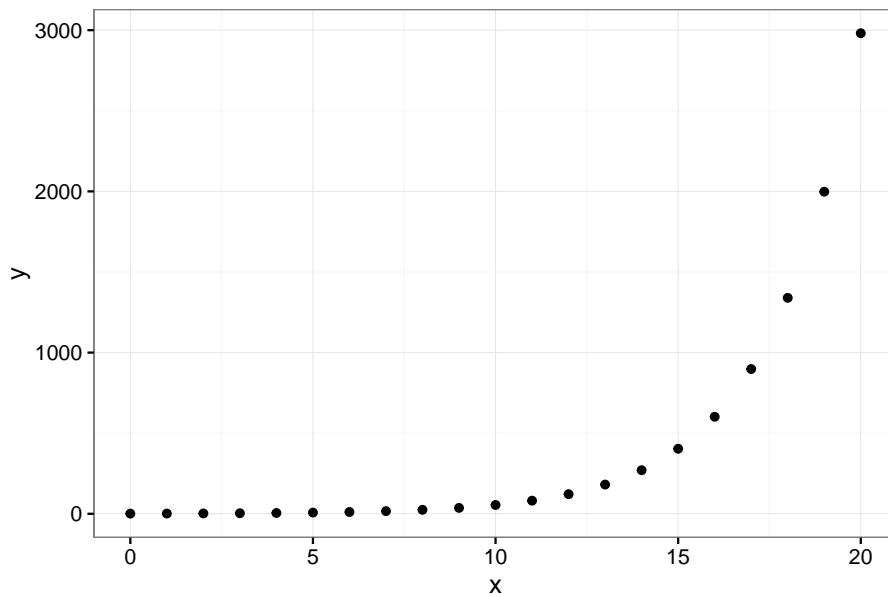


Figura 4.3: Gráfico de dispersão entre valores de duas variáveis X e Y .

Nesse caso, os valores dos coeficientes de correlação de Pearson e de

Spearman são, respectivamente, $r_P = 0.75$ e $r_S = 1$ indicando que apenas este último é capaz de realçar a associação perfeita entre as duas variáveis.

Uma ferramenta adequada para comparar as distribuições de uma característica observada sob duas condições diferentes é o gráfico QQ utilizado na Seção 3.7 para a comparação de uma distribuição empírica com uma distribuição teórica. Um exemplo típico é aquele referente ao objetivo secundário mencionado na descrição do Exemplo 4.3, em que se pretende avaliar a concordância entre as duas medidas ultrassonográficas do volume do lobo direito do fígado.

Denotando por X uma das medidas e por Y , a outra, sejam $Q_X(p)$ e $Q_Y(p)$ os quantis de ordem p das duas distribuições que pretendemos comparar. O gráfico QQ é um gráfico cartesiano de $Q_X(p)$ em função de $Q_Y(p)$ (ou vice-versa) para diferentes valores de p . Se as distribuições de X e Y forem iguais, os pontos nesse gráfico devem estar sobre a reta $x = y$. Se uma das variáveis for uma função linear da outra, os pontos também serão dispostos sobre uma reta, porém com intercepto possivelmente diferente de zero e com inclinação possivelmente diferente de 1.

Quando os números de observações das duas variáveis for igual, o gráfico QQ é essencialmente um gráfico dos dados ordenados de X , ou seja $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$, *versus* os dados ordenados de Y , nomeadamente, $y_{(1)} \leq \dots \leq y_{(n)}$.

Quando os números de observações das duas variáveis forem diferentes, digamos $m > n$, calculam-se os quantis amostrais referentes àquela variável com menos observações utilizando $p_i = (i - 0,5)/n$, $i = 1, \dots, n$ e obtêm-se os quantis correspondentes à segunda variável por meio de interpolações como aquelas indicadas em (3.5). Consideremos, por exemplo os conjuntos de valores $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$ e $y_{(1)} \leq \dots \leq y_{(m)}$. Primeiramente, determinemos $p_i = (i - 0,5)/n$, $i = 1, \dots, n$ para obter os quantis $Q_X(p_i)$; em seguida, devemos obter índices j tais que

$$\frac{j - 0,5}{m} = \frac{i - 0,5}{n} \text{ ou seja } j = \frac{m}{n}(i - 0,5) + 0,5.$$

Se j obtido dessa forma for inteiro, o ponto a ser disposto no gráfico QQ será $(x_{(i)}, y_{(j)})$; em caso contrário, teremos $j = [j] + f_j$ em que $[j]$ é o maior inteiro contido em j e $0 < f_j < 1$ é a correspondente parte fracionária ($f_j = j - [j]$). O quantil correspondente para a variável Y será:

$$Q_Y(p_i) = (1 - f_j)y_{([j])} + f_j y_{([j]+1)}.$$

Por exemplo, sejam $m = 45$ e $n = 30$; então, para $i = 1, \dots, 30$ temos

$$p_i = (i - 0,5)/30 \text{ e } Q_X(p_i) = x_{(i)}$$

logo $j = 45/30(i - 0,5) + 0,5 = 1,5i - 0,25$ e $[j] = [1,5i]$ e $r = -0,25$. Consequentemente o quantil $Q_Y(p_i) = 1,25y_{([1,5i])} - 0,25y_{([1,5i]+1)}$. Os pontos correspondentes ao gráfico QQ serão

$$\begin{aligned}
 x_{(1)} & \text{ vs } [1, 25y_{(1)} - 0, 25y_{(2)}], \\
 x_{(2)} & \text{ vs } [1, 25y_{(3)} - 0, 25y_{(4)}], \\
 x_{(3)} & \text{ vs } [1, 25y_{(4)} - 0, 25y_{(5)}], \\
 x_{(4)} & \text{ vs } [1, 25y_{(6)} - 0, 25y_{(7)}], \\
 & \text{etc.}
 \end{aligned}$$

Suponha, por exemplo, que duas variáveis, X e Y , sejam tais que $Y = aX + b$, indicando que suas distribuições são iguais, exceto por uma transformação linear. Então,

$$p = P(X \leq Q_X(p)) = P(aX + b \leq aQ_X(p) + b) = P(Y \leq Q_Y(p)),$$

ou seja, $Q_Y(p) = aQ_X(p) + b$, indicando que o gráfico QQ correspondente mostrará uma reta com inclinação a e intercepto b .

Para a comparação das distribuições do volume ultrassonográfico do lobo direito do fígado medidas pelos dois observadores mencionados no Exemplo 4.3, o gráfico QQ está disposto na Figura 4.4.

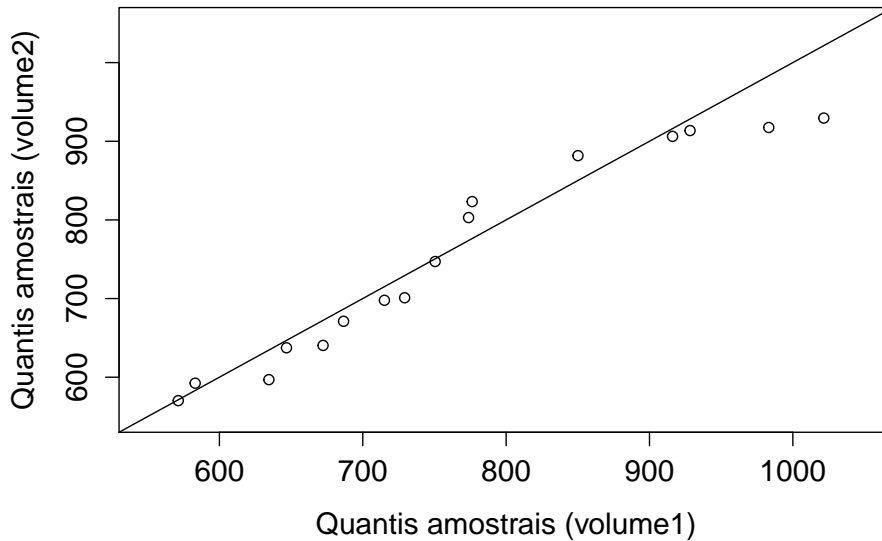


Figura 4.4: Gráfico QQ para avaliação da concordância de duas medidas ultrassonográficas do lobo direito do fígado.

Os pontos distribuem-se em torno da reta $x = y$ sugerindo que as medidas realizadas pelos dois observadores tendem a ser similares. Em geral os gráficos QQ são mais sensíveis a diferenças nas caudas das distribuições, se estas forem aproximadamente simétricas e com a aparência de uma normal. Enquanto os diagramas de dispersão mostrem uma relação sistemática global entre X e Y , os gráficos QQ relacionam valores pequenos de X com valores pequenos de Y , valores medianos de X com valores medianos de Y e valores grandes de X com valores grandes de Y .

Outra ferramenta utilizada para a mesma finalidade é o **gráfico de médias/diferenças** originalmente proposto por Tukey e popularizado como **gráfico de Bland-Altman**. Essencialmente, essa ferramenta consiste num gráfico das diferenças entre as duas observações pareadas ($v_{2i} - v_{1i}$) em função das médias correspondentes $[(v_{1i} + v_{2i})/2]$, $i = 1, \dots, n$. Esse procedimento transforma a reta com coeficiente angular igual 1 apresentada no gráfico QQ numa reta horizontal passando pelo ponto zero no gráfico de médias/diferenças de Tukey e facilita a percepção das diferenças entre as duas medidas da mesma característica.

O gráfico de médias/diferenças de Tukey (Bland-Altman) correspondente aos volumes medidos pelos dois observadores e indicados na Tabela 4.18 está apresentado na Figura 4.5.

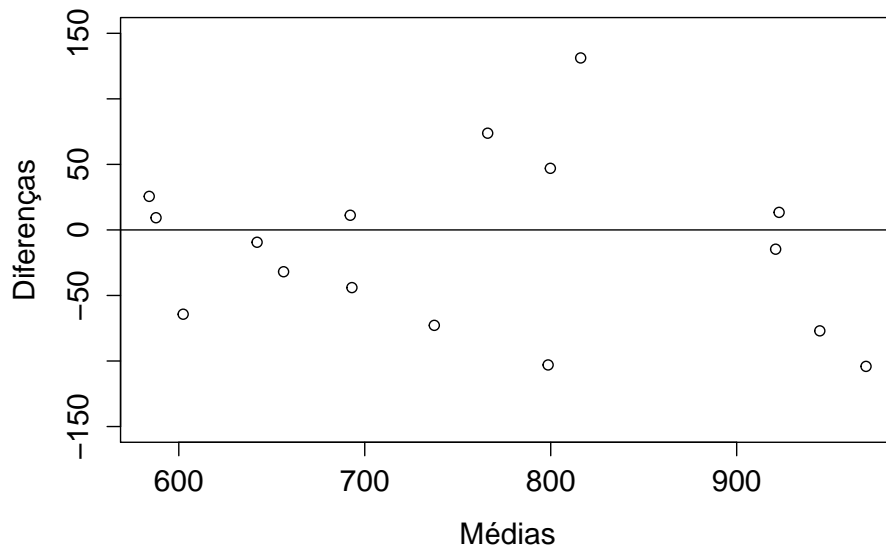


Figura 4.5: Gráfico de médias/diferenças de Tukey (Bland-Altman) para avaliação da concordância de duas medidas ultrassonográficas do lobo direito do fígado.

Os pontos no gráfico de médias/diferenças de Tukey distribuem-se de forma não regular em torno do valor zero e não sugerem evidências de diferenças entre as distribuições correspondentes. Por essa razão, para diminuir a variabilidade, decidiu-se adotar a média das medidas obtidas pelos dois observadores como volume do lobo direito do fígado para avaliar sua associação com o peso correspondente.

Exemplo 4.4 Os dados contidos na Tabela 4.19 foram extraídos de um estudo para avaliação de insuficiência cardíaca e correspondem à frequência cardíaca em repouso e no limiar anaeróbio de um exercício em esteira para 20 pacientes.

Tabela 4.19: Frequência cardíaca em repouso (fcrep) e no limiar anaeróbio (fclan) de um exercício em esteira

| paciente | fcrep | fclan | paciente | fcrep | fclan |
|----------|-------|-------|----------|-------|-------|
| 1 | 89 | 110 | 11 | 106 | 157 |
| 2 | 69 | 100 | 12 | 83 | 127 |
| 3 | 82 | 112 | 13 | 90 | 104 |
| 4 | 89 | 104 | 14 | 75 | 82 |
| 5 | 82 | 120 | 15 | 100 | 117 |
| 6 | 75 | 112 | 16 | 97 | 122 |
| 7 | 89 | 101 | 17 | 76 | 140 |
| 8 | 91 | 135 | 18 | 77 | 97 |
| 9 | 101 | 131 | 19 | 85 | 101 |
| 10 | 120 | 129 | 20 | 113 | 150 |

Os gráficos QQ e de médias/diferenças de Tukey correspondentes aos dados da Tabela 4.19 estão apresentados nas Figuras 4.6 e 4.7.

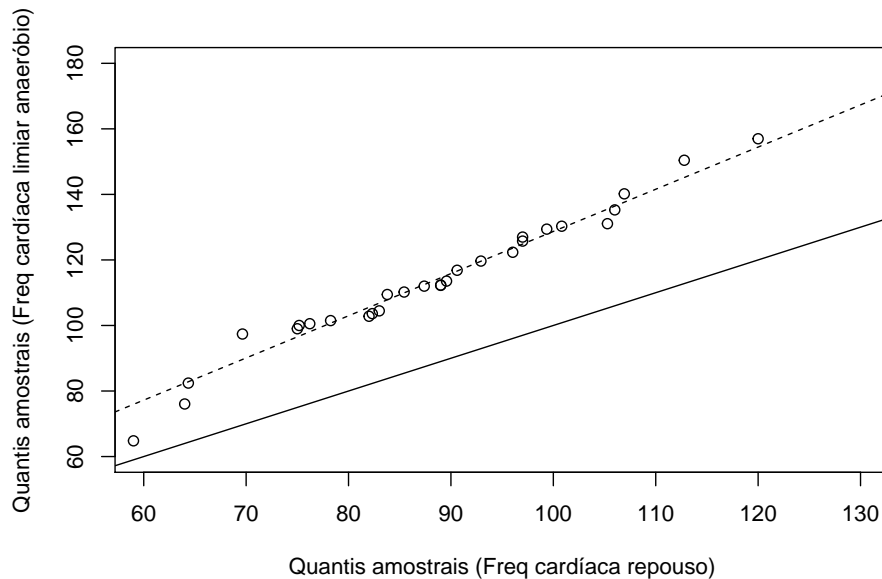


Figura 4.6: Gráfico QQ para comparação das distribuições de frequência cardíaca em repouso e no limiar anaeróbio.

Na Figura 4.6, a curva pontilhada corresponde à reta $Q_Y(p) = 1.29Q_X(p)$ sugerindo que a frequência cardíaca no limiar anaeróbio (Y) tende a ser cerca de 30% maior que aquela em repouso (X) em toda faixa de variação. Isso também pode ser observado, embora com menos evidência, no gráfico de Bland-Altman da Figura 4.7.

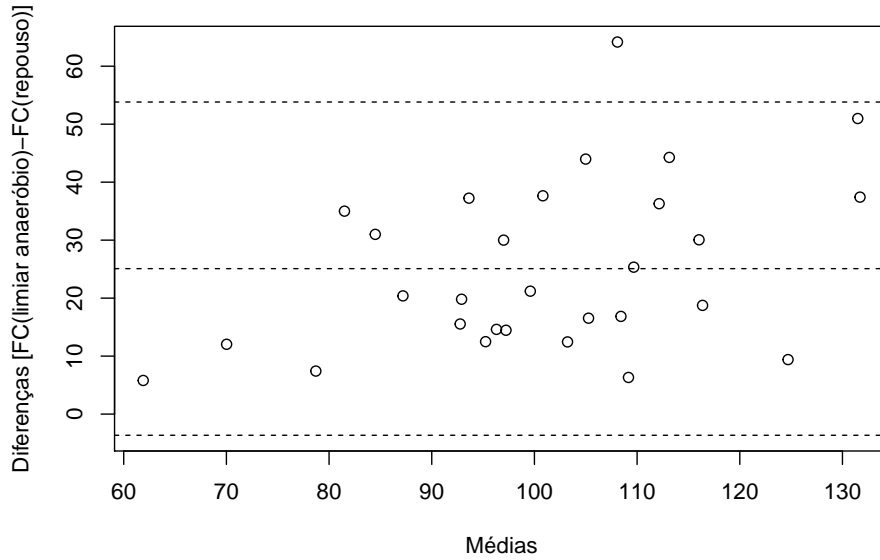


Figura 4.7: Gráfico de médias/diferenças de Tukey (Bland-Altman) para comparação das distribuições de frequência cardíaca em repouso e no limiar anaeróbio.

Exemplo 4.5. Considere o CD-Temperaturas, com os dados de temperatura para Ubatuba e Cananéia. O gráfico QQ está na Figura 4.8. Observamos que a maioria dos pontos está acima da reta $y = x$, mostrando que as temperaturas de Ubatuba são em geral maiores do que as de Cananéia para valores maiores do que 17 graus.

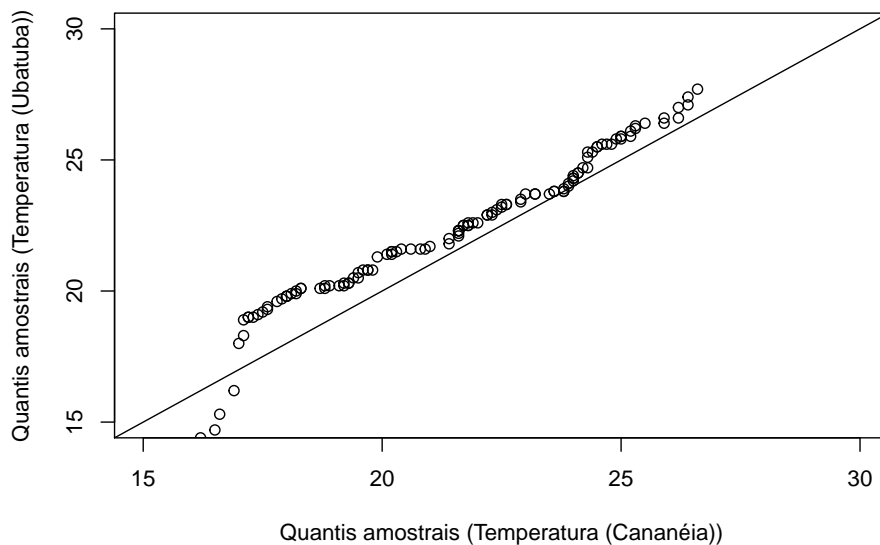


Figura 4.8: Gráfico QQ para comparação das distribuições de temperaturas de Ubatuba e Cananéia.

O gráfico de Bland-Altman correspondente, apresentado na Figura 4.9, sugere que acima de 17 graus, em média Ubatuba tende a ser 1 grau mais quente que Cananéia.

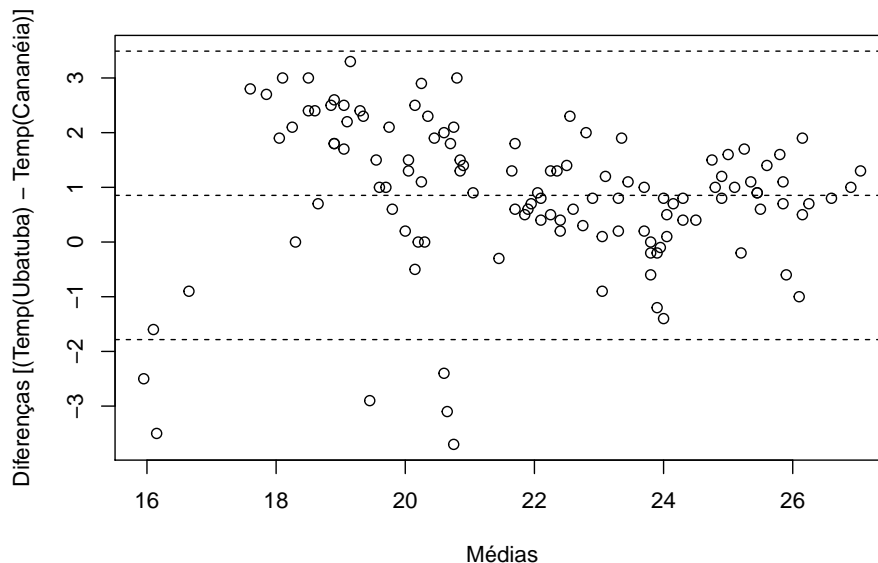


Figura 4.9: Gráfico de médias/diferenças de Tukey (Bland-Altman) para comparação das distribuições de temperaturas de Ubatuba e Cananéia.

4.4 Uma variável qualitativa e outra quantitativa

Um estudo da associação entre uma variável quantitativa e uma qualitativa consiste essencialmente em comparar as distribuições da primeira nos diversos níveis da segunda. Essa análise pode ser conduzida por meio de medidas resumo, histogramas, *boxplots* etc.

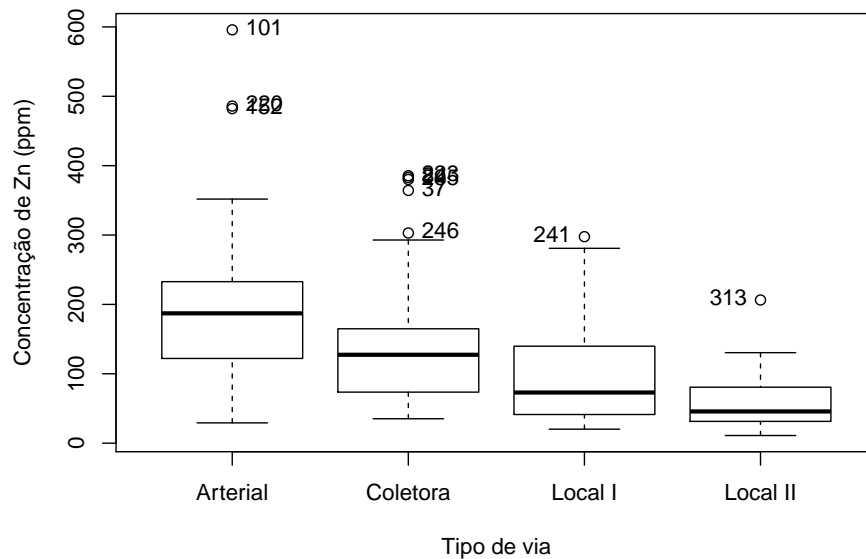
Exemplo 4.6. Num estudo coordenado pelo Laboratório de Poluição Atmosférica Experimental da USP, foram colhidos dados de concentração de vários elementos captados nas cascas de árvores em diversos pontos do centro expandido do município de São Paulo com o intuito de avaliar sua associação com a poluição atmosférica oriunda do tráfego. Os dados disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/arvores.xls> foram extraídos desse estudo e contêm a concentração de Zn (ppm) em 497 árvores classificadas segundo a espécie (*alfeneiro*, *sibipiruna* e *tipuana*) e a localização em termos da proximidade do tipo de via (arterial, coletora, local I, local II, em ordem decrescente da intensidade de tráfego). Para efeito didático, consideramos primeiramente as 193 *tipuana*s. Medidas resumo para a concentração de Zn segundo os níveis de espécie e tipo de via estão indicadas na Tabela 4.20.

Tabela 4.20: Medidas resumo para a concentração de Zn (ppm) em cascas de *tipuanas*

| Tipo de via | Desvio | | Min | Q1 | Mediana | Q3 | Max | n |
|-------------|--------|--------|------|-------|---------|-------|-------|----|
| | Média | padrão | | | | | | |
| Arterial | 199,4 | 110,9 | 29,2 | 122,1 | 187,1 | 232,8 | 595,8 | 59 |
| Coletora | 139,7 | 90,7 | 35,2 | 74,4 | 127,4 | 164,7 | 385,5 | 52 |
| Local I | 100,6 | 73,4 | 20,1 | 41,9 | 73,0 | 139,4 | 297,7 | 48 |
| Local II | 59,1 | 42,1 | 11,0 | 31,7 | 45,7 | 79,0 | 206,4 | 34 |

Min: mínimo Max: máximo
Q1: primeiro quartil Q3: terceiro quartil

Os resultados indicados na Tabela 4.20 mostram que tanto a concentração média e mediana de Zn quanto o correspondente desvio padrão decrescem à medida que a intensidade de tráfego diminui, sugerindo que esse processo pode ser utilizado como um indicador da poluição produzida por veículos automotores. Os *boxplots* apresentados na Figura 4.10 confirmam essas conclusões e também indicam que as distribuições apresentam uma leve assimetria, especialmente para as vias coletoras e locais I além de alguns pontos discrepantes.

Figura 4.10: *Boxplots* para comparação das distribuições da concentração de Zn nas cascas de *tipuanas*.

Outro tipo de gráfico útil para avaliar a associação entre a variável quantitativa (concentração de Zn, no exemplo) e a variável qualitativa (tipo de via, no exemplo) especialmente quando esta tem níveis ordinais (como no exemplo) é o **gráfico de perfis médios**. Nesse gráfico cartesiano as médias

(e barras representando desvios padrões, erros padrões ou intervalos de confiança)³ da variável quantitativa são representadas no eixo das ordenadas e os níveis da variável quantitativa, no eixo das abscissas. O gráfico de perfis médios para a concentração de Zn medida nas cascas de *Tipuanas* está apresentado na Figura 4.11 e reflete as mesmas conclusões obtidas com as análises anteriores.

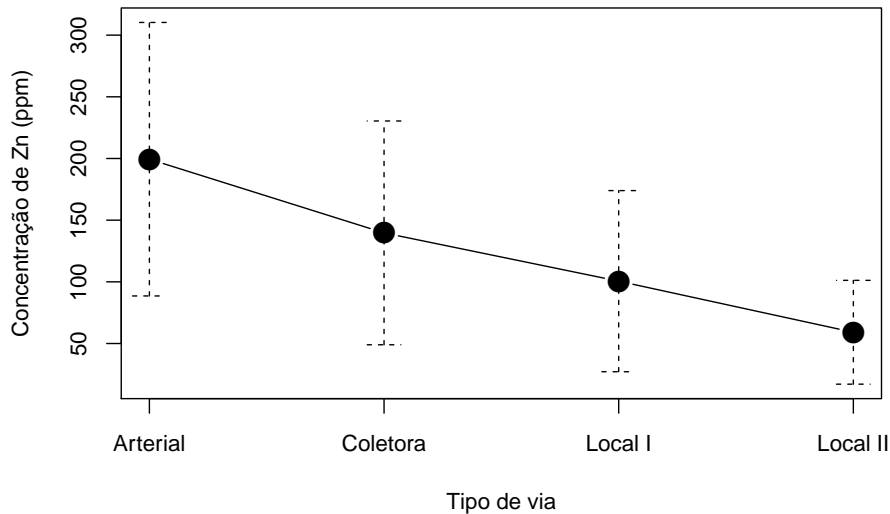


Figura 4.11: Gráfico de perfis médios (com barras de desvios padrões) para comparação das distribuições da concentração de Zn nas cascas de *tipuanas*.

No título do gráfico, deve-se sempre indicar o que representam as barras; desvios padrões são úteis para avaliar como a dispersão dos dados em torno da média correspondente varia com os níveis da variável quantitativa (e não dependem do número de observações utilizadas para o cálculo da média); erros padrões são indicados para avaliação da precisão das médias (e dependem do número de observações utilizadas para o cálculo delas); intervalos de confiança servem para comparação das médias populacionais correspondentes e dependem de suposições sobre a distribuição da variável quantitativa.

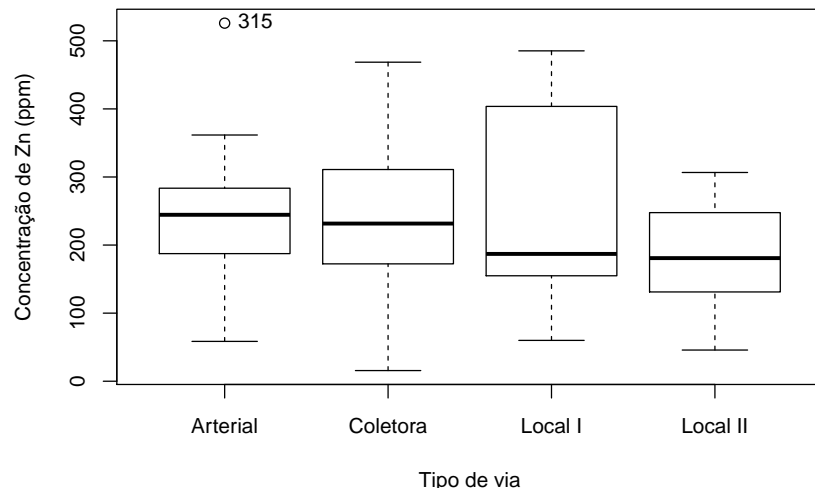
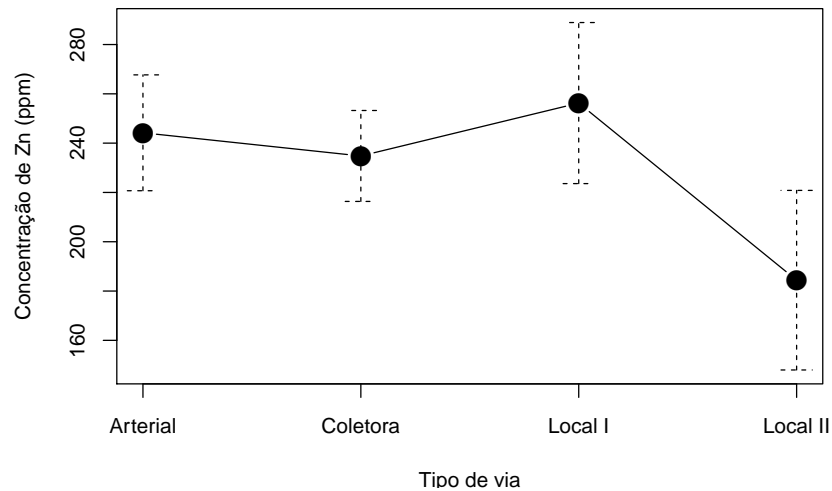
Uma análise similar para os 76 *alfeneiros* está resumida na Tabela 4.21, e Figuras 4.12 e 4.13.

³Ver Nota de Capítulo 6

Tabela 4.21: Medidas resumo para a concentração de Zn (ppm) em cascas de *alfeneiros*

| Tipo de via | Desvio | | Min | Q1 | Mediana | Q3 | Max | n |
|-------------|--------|--------|------|-------|---------|-------|-------|----|
| | Média | padrão | | | | | | |
| Arterial | 244,2 | 102,4 | 58,5 | 187,4 | 244,5 | 283,5 | 526,0 | 19 |
| Coletora | 234,8 | 102,7 | 15,6 | 172,4 | 231,6 | 311,0 | 468,6 | 31 |
| Local I | 256,3 | 142,4 | 60,0 | 154,9 | 187,0 | 403,7 | 485,3 | 19 |
| Local II | 184,4 | 96,4 | 45,8 | 131,1 | 180,8 | 247,6 | 306,6 | 7 |

Min: mínimo Max: máximo
Q1: primeiro quartil Q3: terceiro quartil

Figura 4.12: *Boxplots* para comparação das distribuições da concentração de Zn nas cascas de *alfeneiros*.Figura 4.13: Gráfico de perfis médios (com barras de desvios padrões) para comparação das distribuições da concentração de Zn nas cascas de *alfeneiros*.

Os resultados da Tabela 4.21 e das Figuras 4.12 e 4.13 indicam que as concentrações de Zn em *alfeneiros* tendem a ser maiores que aquelas encontradas em *tipuanas* porém são menos sensíveis a variações na intensidade de tráfego com exceção de vias locais II; no entanto, convém lembrar que apenas 7 *alfeneiros* foram avaliados nas proximidades desse tipo de via.

Exemplo 4.7. Consideremos os dados da planilha disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/salarios.xls> referentes à informações sobre 36 funcionários de uma certa empresa. Nosso objetivo é avaliar a associação entre as variáveis “Salário” (S) expressa em número de salários mínimos e “Grau de instrução” (GI), com a classificação “fundamental”, “médio” ou “superior”.

Medidas resumo para “Salário” em função dos níveis de “Grau de instrução” são apresentadas na Tabela 4.22.

Tabela 4.22: Medidas resumo para a variável “Salário” (número de salários mínimos)

| Grau de instrução | n | Média \bar{S} | Variância $\text{var}(S)$ | Min | Q1 | Q2 | Q3 | Max |
|-------------------|-----|-----------------|---------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Fundam | 12 | 7,84 | 7,77 | 4,00 | 6,01 | 7,13 | 9,16 | 13,65 |
| Médio | 18 | 11,54 | 13,10 | 5,73 | 8,84 | 10,91 | 14,48 | 19,40 |
| Superior | 6 | 16,48 | 16,89 | 10,53 | 13,65 | 16,74 | 18,38 | 23,30 |
| Todos | 36 | 11,12 | 20,46 | 4,00 | 7,55 | 10,17 | 14,06 | 23,30 |

Min: mínimo

Max: máximo

Q1: primeiro quartil

Q2: mediana

Q3: terceiro quartil

A leitura desses resultados sugere associação entre salários e grau de instrução: o salário médio tende a aumentar conforme aumenta o grau de instrução. O salário médio dos funcionários é 11,12 salários mínimos; para funcionários com curso superior, o salário médio passa a ser 16,48 salários mínimos, enquanto que funcionários com primeiro grau completo recebem, em média, 7,82 salários mínimos.

Como nos casos anteriores, é conveniente poder contar com uma medida que quantifique o grau de associação entre as duas variáveis. Com esse intuito, convém observar que as variâncias podem ser usadas como insumos para construir essa medida. A variância da variável quantitativa (“Salário”) para todos os dados, *i.e.*, calculada sem usar a informação da variável qualitativa (“Grau de instrução”), mede a dispersão dos dados em torno da média global. Se as variâncias da variável “Salário” calculadas dentro de cada categoria da variável qualitativa forem pequenas (comparativamente à variância global), essa variável pode ser usada para melhorar o conhecimento da distribuição da variável quantitativa, sugerindo a existência de uma associação entre ambas.

Na Tabela 4.22 pode-se observar que as variâncias do salário dentro das três categorias são menores do que a variância global e além disso, que

umentam com o grau de instrução. Uma medida resumo da variância **entre** as categorias da variável qualitativa é a média das variâncias ponderada pelo número de observações em cada categoria, ou seja,

$$\overline{\text{var}(S)} = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \text{var}_i(S)}{\sum_{i=1}^k n_i}, \quad (4.8)$$

em que k é o número de categorias ($k = 3$ no exemplo) e $\text{var}_i(S)$ denota a variância de S dentro da categoria i , $i = 1, \dots, k$. Pode-se mostrar que $\overline{\text{var}(S)} \leq \text{var}(S)$, de modo que podemos definir o grau de associação entre as duas variáveis como o ganho relativo na variância obtido pela introdução da variável qualitativa. Explicitamente,

$$R^2 = \frac{\text{var}(S) - \overline{\text{var}(S)}}{\text{var}(S)} = 1 - \frac{\overline{\text{var}(S)}}{\text{var}(S)}. \quad (4.9)$$

Além disso, pode-se mostrar que $0 \leq R^2 \leq 1$. O símbolo R^2 é usual em análise de variância e regressão, tópicos a serem abordados nos Capítulos 5 e 6, respectivamente.

Para os dados do Exemplo 4.7, temos

$$\overline{\text{var}(S)} = \frac{12 \times 7,77 + 18 \times 13,10 + 6 \times 16,89}{12 + 18 + 6} = 11,96.$$

Como $\text{var}(S) = 20,46$, obtemos $R^2 = 1 - (11,96/20,46) = 0,415$, sugerindo que 41,5% da variação total do salário é **explicada** pelo grau de instrução.

4.5 Notas de capítulo

1) Probabilidade condicional e razões de chances

Considere a seguinte tabela 2x2

| | Doente (D) | Não doentes (\bar{D}) | Total |
|---------------------------|----------------|---------------------------|----------|
| Exposto (E) | n_{11} | n_{12} | n_{1+} |
| Não exposto (\bar{E}) | n_{21} | n_{22} | n_{2+} |
| Total | n_{+1} | n_{+2} | n_{++} |

correspondente a um estudo em que o interesse é avaliar a associação entre a exposição de indivíduos a um certo fator de risco e a ocorrência de uma determinada moléstia. Em **estudos prospectivos** (*prospective, follow-up, cohort*) o planejamento envolve a escolha de amostras de tamanhos n_{1+} e n_{2+} de indivíduos expostos e não expostos ao fator de risco, respectivamente e a observação da ocorrência ou não da moléstia após um certo intervalo de tempo. A razão de chances (de doença entre indivíduos expostos e não expostos) é definida como:

$$\omega_1 = \frac{P(D|E)P(\bar{D}|\bar{E})}{P(\bar{D}|E)P(D|\bar{E})}.$$

Em **estudos retrospectivos** ou **caso-controle**, o planejamento envolve a escolha de amostras de tamanhos $n_{\bullet 1}$ e $n_{\bullet 2}$ de indivíduos não doentes (controles) e doentes (casos), respectivamente e a observação retrospectiva de sua exposição ou não ao fator de risco. Nesse caso, a razão de chances é definida por:

$$\omega_2 = \frac{P(E|D)P(\bar{E}|\bar{D})}{P(\bar{E}|D)P(E|\bar{D})}.$$

Utilizando a definição de probabilidade condicional [ver Bussab e Morettin (2017), por exemplo], temos

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{[P(D \cap E)/P(E)][P(\bar{D} \cap \bar{E})/P(\bar{E})]}{[P(\bar{D} \cap E)/P(E)][P(D \cap \bar{E})/P(\bar{E})]} = \frac{P(D \cap E)P(\bar{D} \cap \bar{E})}{P(\bar{D} \cap E)P(D \cap \bar{E})} \\ &= \frac{[P(E|D)/P(D)][P(\bar{E}|\bar{D})/P(\bar{D})]}{[P(E|\bar{D})/P(\bar{D})][P(\bar{E}|D)/P(D)]} = \omega_2 \end{aligned}$$

Embora não se possa calcular o risco relativo de doença em estudos retrospectivos, a razão de chances obtida por meio desse tipo de estudo é igual àquela que seria obtida por intermédio de um estudo prospectivo, que em muitas situações práticas não pode ser realizado devido ao custo.

2) Medidas de dependência entre duas variáveis

Dizemos que X e Y são **comonotônicas** se Y (ou X) for uma função estritamente crescente de X (ou Y) e são **contramonotônicas** se a função for estritamente decrescente.

Consideremos duas variáveis X e Y e seja $\delta(X, Y)$ uma medida de dependência entre elas. As seguintes propriedades são desejáveis para δ (Embrechts et al., 2003):

- (i) $\delta(X, Y) = \delta(Y, X)$;
- (ii) $-1 \leq \delta(X, Y) \leq 1$;
- (iii) $\delta(X, Y) = 1$ se X e Y são comonotônicas e $\delta(X, Y) = -1$ se X e Y são contramonotônicas;
- (iv) Se T for uma transformação monótona,

$$\delta(T(X), Y) = \begin{cases} \delta(X, Y), & \text{se } T \text{ for crescente,} \\ -\delta(X, Y), & \text{se } T \text{ for decrescente.} \end{cases}$$

- (v) $\delta(X, Y) = 0$ se e somente se X e Y são independentes.

O coeficiente de correlação de Pearson entre X e Y é definido por

$$\rho_P = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{DP(X)DP(Y)}$$

com $\text{Cov}(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y)$. Pode-se provar que $-1 \leq \rho_P \leq 1$ e que satisfaz as propriedades (i)-(ii). Além disso, ρ_P requer que as variâncias de X e Y sejam finitas e $\rho = 0$ não implica independência entre X e Y , a não ser que (X, Y) tenha uma distribuição normal bivariada. Também, ρ_P não é invariante sob transformações não lineares estritamente crescentes.

3) Dependência linear entre duas variáveis

Convém reafirmar que $\rho_P(X, Y)$ mede dependência linear entre X e Y e não outro tipo de dependência. De fato, suponha que uma das variáveis possa ser expressa linearmente em termos da outra, por exemplo $X = aY + b$, e seja $d = E(|X - aY - b|^2)$. Então, pode-se provar (veja Exercício 13) que o mínimo de d ocorre quando

$$a = \frac{\sigma_X}{\sigma_Y} \rho_P(X, Y), \quad b = E(X) - aE(Y), \quad (4.10)$$

e é dado por

$$\min d = \sigma_X^2(1 - \rho_P(X, Y)^2). \quad (4.11)$$

Portanto, quanto maior o valor absoluto do coeficiente de correlação entre X e Y , melhor a acurácia com que uma das variáveis pode ser representada como uma combinação linear da outra. Obviamente, este mínimo se anula se e somente se $\rho_P = 1$ ou $\rho_P = -1$. Então de (4.11) temos

$$\rho_P(X, Y) = \frac{\sigma_X^2 - \min_{a,b} E(|X - aY - b|^2)}{\sigma_X^2}, \quad (4.12)$$

ou seja, $\rho_P(X, Y)$ mede a redução relativa na variância de X por meio de uma regressão linear de X sobre Y .

4) Medidas de dependência robustas

O coeficiente de correlação não é uma medida resistente. Uma medida robusta para a associação entre duas variáveis quantitativas é construída como segue. Considere as variáveis padronizadas

$$\tilde{x}_k = \frac{x_k}{S_x(\alpha)}, \quad \tilde{y}_k = \frac{y_k}{S_y(\alpha)}, \quad k = 1, \dots, n,$$

em que $S_x^2(\alpha)$ e $S_y^2(\alpha)$ são as α -variâncias aparadas para os dados x_i e y_i , respectivamente. Um coeficiente de correlação robusto é definido por

$$r(\alpha) = \frac{S_{\tilde{x}+\tilde{y}}^2(\alpha) - S_{\tilde{x}-\tilde{y}}^2(\alpha)}{S_{\tilde{x}+\tilde{y}}^2(\alpha) + S_{\tilde{x}-\tilde{y}}^2(\alpha)}, \quad (4.13)$$

em que, por exemplo, $S_{\tilde{x}+\tilde{y}}^2(\alpha)$ é a α -variância aparada da soma dos valores padronizados de x_i e y_i . Pode-se mostrar que $r(\alpha) = r_P$ se $\alpha = 0$. Esse método é denominado de **somas e diferenças padronizadas**.

Exemplo 4.8. Consideremos os dados (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, n$ apresentados na Tabela 4.23.

Tabela 4.23: Valores hipotéticos de duas variáveis X e Y

| x | y | x | y |
|--------|------|------|------|
| 20,2 | 24,0 | 19,3 | 18,5 |
| 3 50,8 | 38,8 | 19,3 | 18,5 |
| 12,0 | 11,5 | 19,3 | 18,5 |
| 25,6 | 25,8 | 10,2 | 11,1 |
| 20,2 | 24,0 | 12,0 | 12,9 |
| 7,2 | 7,2 | 7,2 | 7,2 |
| 7,2 | 7,2 | 13,5 | 12,9 |
| 7,2 | 7,2 | | |

Para $\alpha = 0,05$, obtemos:

$$\bar{x}(\alpha) = 14,86, \quad \bar{y}(\alpha) = 15,33, \quad S_x(\alpha) = 5,87, \quad S_y(\alpha) = 6,40,$$

$$(\bar{\tilde{x}} + \bar{\tilde{y}})(\alpha) = 4,93, \quad (\bar{\tilde{x}} - \bar{\tilde{y}})(\alpha) = 0,14,$$

$$S_{\bar{\tilde{x}} + \bar{\tilde{y}}}^2(\alpha) = 3,93, \quad S_{\bar{\tilde{x}} - \bar{\tilde{y}}}^2(\alpha) = 0,054.$$

Então de (4.13) obtemos $r(\alpha) = 0,973$, o que indica uma alta correlação entre os dois conjuntos de dados. Na Figura 4.14 temos o diagrama de dispersão correspondente.

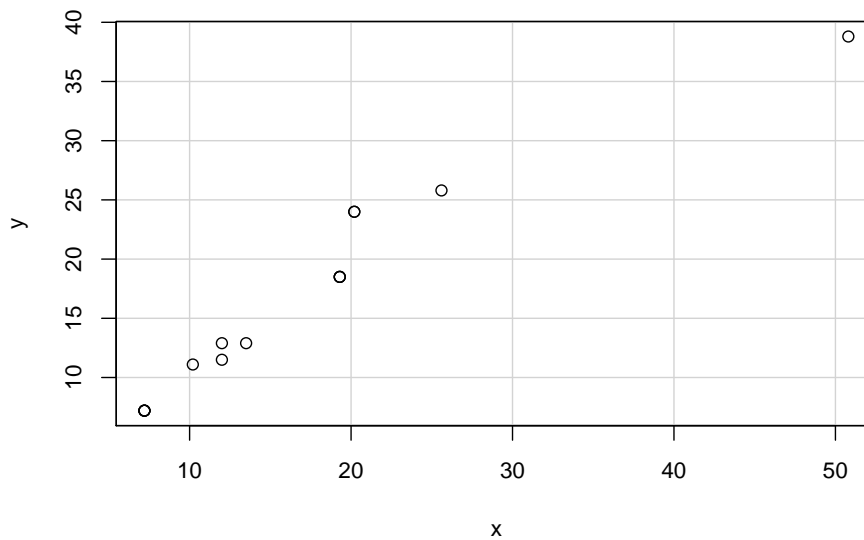


Figura 4.14: Gráfico de dispersão para os dados do Exemplo 4.8.

5) Gráficos PP

Na Figura 4.15, observe que $p_x(q) = P(X \leq q) = F_X(q)$ e que $p_y(q) = P(Y \leq q) = F_Y(q)$, de modo que os pares $[p_x(q), p_y(q)]$, para qualquer

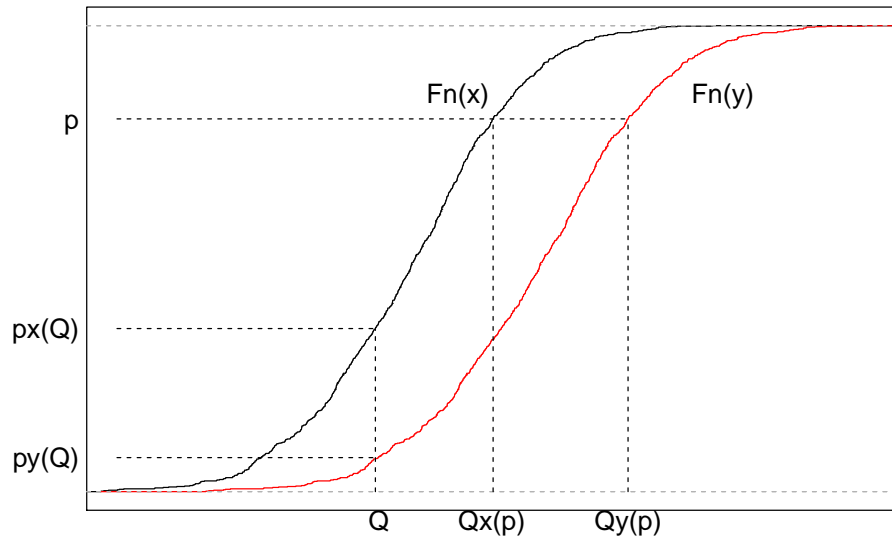


Figura 4.15: Quantis e probabilidades associados a duas distribuições.

q real, formam um gráfico de probabilidades ou **gráfico PP**. Os pares $(Q_X(p), Q_Y(p))$ para $0 < p < 1$, formam o gráfico de quantis *versus* quantis (gráfico QQ).

Se as distribuições de X e Y forem iguais, então $F_X = F_Y$ e os pontos dos gráficos PP e QQ se situam sobre a reta $x = y$. Em geral os gráficos QQ são mais sensíveis a diferenças nas caudas das distribuições se estas forem aproximadamente simétricas e com a aparência de uma distribuição normal. Suponha que $Y = aX + b$, ou seja, que as distribuições de X e Y são as mesmas, exceto por uma transformação linear. Então,

$$p = P(X \leq Q_X(p)) = P(aX + b \leq aQ_X(p) + b) = P(Y \leq Q_Y(p)),$$

ou seja,

$$Q_Y(p) = aQ_X(p) + b.$$

O gráfico QQ correspondente será representado por uma reta com inclinação a e intercepto b . Essa propriedade não vale para gráficos PP.

Gráficos PP e QQ para a distribuição da concentração de Zn em cascas de árvores da espécie *Tipuana*, disponíveis no CD-árvores estão dispostos na Figura 4.16 e salientam a maior capacidade dos últimos para detectar assimetrias em distribuições de frequência.

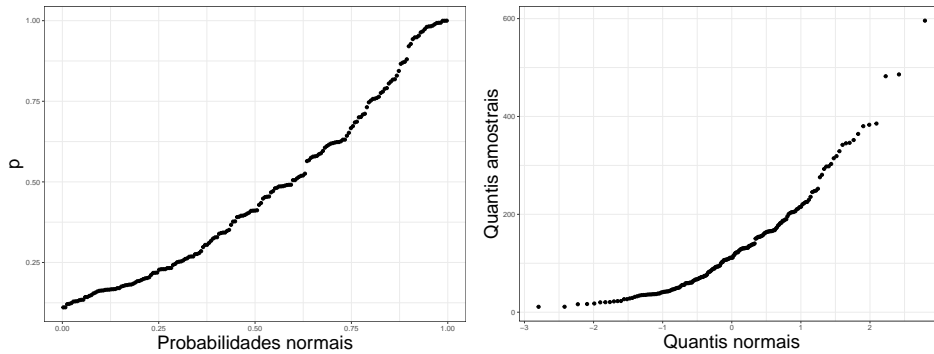


Figura 4.16: Gráficos PP e QQ para concentração de Zn em cascas de árvores da espécie *Tipuana*.

6) Diferenças significativas

Consideremos a distribuição de uma variável X (pressão arterial, por exemplo) em duas populações, A e B e admitamos que as médias de X sejam μ_A e μ_B (desconhecidas), respectivamente. Além disso, admitamos que ambas as distribuições tenham desvios padrões iguais a $\sigma = 10$ (conhecido). Nosso objetivo é saber se existem evidências de que $\mu_A = \mu_B$ com base em amostras aleatórias X_{A1}, \dots, X_{An} da população A e X_{B1}, \dots, X_{Bn} da população B . Admitamos que $n = 100$ e que as correspondentes médias amostrais sejam $\bar{X}_A = 13$ e $\bar{X}_B = 10$, respectivamente. Nesse caso, dizemos que a diferença $|\bar{X}_A - \bar{X}_B| = 3$ é **significativa** com $p < 0,05$, concluindo que há evidências de que para acreditar que $\mu_A \neq \mu_B$. Consideremos agora uma amostra de tamanho $n = 25$ de cada população, com médias $\bar{X}_A = 15$ e $\bar{X}_B = 10$. Nesse caso, dizemos que a diferença $|\bar{X}_A - \bar{X}_B| = 5$ **não é significativa** com $p > 0,05$, concluindo que não há razão para acreditar que $\mu_A \neq \mu_B$, embora a diferença entre as médias amostrais \bar{X}_A e \bar{X}_B seja maior que no primeiro caso. Essencialmente, queremos saber qual é a interpretação da expressão “a diferença entre as médias é significativa”.

O cerne do problema é que não queremos tirar conclusões sobre as médias amostrais, \bar{X}_A e \bar{X}_B (cuja diferença é evidente, pois a conhecemos) e sim sobre as médias populacionais μ_A e μ_B , que desconhecemos. Para associar as amostras às populações, precisamos de um modelo probabilístico. No caso do exemplo, um modelo simples supõe que as distribuições de frequências da variável X nas populações A e B são Normais, independentes com médias μ_A e μ_B , respectivamente e desvio padrão comum $\sigma = 10$.

No primeiro caso ($n = 100$), admitindo que as duas distribuições têm médias iguais ($\mu_A = \mu_B$), a probabilidade de que a diferença (em valor

absoluto) entre as médias amostrais seja maior ou igual a 2 é

$$P(|\bar{X}_A - \bar{X}_B| \geq 3) = P(|Z| > 3/(\sqrt{2}\sigma/\sqrt{100}) = P(|Z| \geq 2,82) < 0,05$$

em que Z representa uma distribuição Normal padrão, *i.e.*, com média zero e variância 1. Em outras palavras, se as médias populacionais forem iguais, a probabilidade de se obter uma diferença de magnitude 3 entre as médias de amostras de tamanho $n = 100$ é menor que 5% e então dizemos que a diferença (entre as médias amostrais) é significativa ($p < 0,05$), indicando que a evidência de igualdade entre as médias populacionais μ_A e μ_B é pequena.

No segundo caso ($n = 25$), temos

$$P(|\bar{X}_A - \bar{X}_B| \geq 5) = P(|Z| > 5/(\sigma/\sqrt{25}) = P(|Z| > 1,76) > 0,05,$$

e então dizemos que a diferença (entre as médias amostrais) não é significativa ($p > 0,05$), indicando que não há evidências fortes o suficiente para acreditarmos que as médias populacionais μ_A e μ_B sejam diferentes.

Observemos que apesar de que no segundo caso, a diferença amostral é maior do que aquela do primeiro caso, concluímos que a evidência de diferença entre as médias populacionais são menores. Isso ocorre por que o tamanho amostral desempenha um papel importante nesse processo; quanto maior o tamanho amostral, mais fácil será detectar diferenças entre as médias populacionais em questão.

Grosso modo, afirmar que uma diferença entre duas médias amostrais é significativa é dizer que as médias das populações de onde as amostras foram extraídas não devem ser iguais; por outro lado, dizer que a diferença entre as médias amostrais não é significativa é dizer que não há razões para acreditar que exista diferença entre as médias populacionais correspondentes.

4.6 Exercícios

- 1) Para o conjunto de dados disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/empresa.xls>, compare as distribuições de frequências de cada variável para indivíduos residentes na capital e interior.
- 2) Para o conjunto de dados disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/regioes.xls> considere as variáveis “Região” e “Densidade populacional”. Avalie a relação entre elas.
- 3) Construa um gráfico QQ para as variáveis “Salário de professor secundário” e “Salário de administrador” do conjunto de dados disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/salarios.xls>.

- 4) Calcule o coeficiente de correlação, r e o coeficiente de correlação robusto, $r(0, 10)$, para os dados do exercício anterior.
- 5) Construa um gráfico QQ para os dados de temperatura de Cananéia e Ubatuba, disponíveis em
<http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/temperaturas.xls>,
 desprezando os 15 dados finais de Ubatuba.
- 6) Para os dados do CD-salarios, considere a variável “Região”, com as classes “América do Norte”, “América Latina”, “Europa” e “Outros” e a variável “Salário de professor secundário”. Analise as duas variáveis.
- 7) Analise as variáveis “Temperatura” e “Umidade” do CD-poluicao.
- 8) Analise a variável “Preço de veículos” segundo as categorias N (nacional) e I (importado) para o conjunto de dados disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/viculoss.xls>.
- 9) Prove que se $\alpha = 0$, então $r(\alpha) = r$.
- 10) Prove que (4.1) pode ser escrita como

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \frac{(n_{ij} - n_{ij}^*)^2}{n_{ij}^*},$$

em que n_{ij} é a frequência absoluta observada na linha i e coluna j e n_{ij}^* é a respectiva frequência esperada.

- 11) Prove que (4.1) pode ser escrita em termos de frequências relativas como

$$\chi^2 = n \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \frac{(f_{ij} - f_{ij}^*)^2}{f_{ij}^*},$$

com notação similar à do problema anterior.

- 12) Prove que (4.6) e (4.7) são equivalentes.
- 13) Prove as relações (4.10)-(4.12).
- 14) Os dados da Tabela 4.24 são provenientes de um estudo em que um dos objetivos era avaliar o efeito da dose de radiação gama (em centigrays) na formação de múltiplos micronúcleos em células de indivíduos normais. Analise os dados descritivamente, calculando o risco relativo de ocorrência de micronúcleos para cada dose tomando como base a dose nula. Repita a análise calculando as razões de chances correspondentes. Quais as conclusões de suas análises?

Tabela 4.24: Número de células

| Dose de radiação gama (cGy) | Frequência de células com múltiplos micronúcleos | Total de células examinadas |
|--------------------------------|---|--------------------------------|
| 0 | 1 | 2373 |
| 20 | 6 | 2662 |
| 50 | 25 | 1991 |
| 100 | 47 | 2047 |
| 200 | 82 | 2611 |
| 300 | 207 | 2442 |
| 400 | 254 | 2398 |
| 500 | 285 | 1746 |

- 15) De uma tabela construída para avaliar a associação entre tratamento (ativo e placebo) e cura (sim ou não) de uma certa moléstia obteve-se uma razão de chances igual a 2.0. Explique por que não se pode concluir daí que a probabilidade de cura para pacientes submetidos ao tratamento ativo é 2 vezes a probabilidade de cura para pacientes submetidos ao placebo.
- 16) Um criminologista desejava estudar a relação entre: X (densidade populacional = número de pessoas por unidade de área) e Y (índice de assaltos = número de assaltos por 100000 pessoas) em grandes cidades. Para isto sorteou 10 cidades observando em cada uma delas os valores de X e Y. Os resultados obtidos estão dispostos na Tabela 4.25

Tabela 4.25: Densidade populacional e índice de assaltos em grandes cidades

| Cidade | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|--------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X | 59 | 49 | 75 | 65 | 89 | 70 | 54 | 78 | 56 | 60 |
| Y | 190 | 180 | 195 | 186 | 200 | 204 | 192 | 215 | 197 | 208 |

- a) Classifique as variáveis envolvidas.
- b) Calcule a média, mediana, desvio-padrão e a distância interquartil para cada variável.
- c) Construa o diagrama de dispersão entre Y e X. Comente.
- 17) Os dados da seguinte tabela sugerem que tipo de relação entre as variáveis X e Y?

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|----|----|
| X | 1 | 3 | 4 | 6 | 8 | 9 | 11 | 14 |
| Y | 1 | 2 | 4 | 4 | 5 | 7 | 8 | 9 |

- a) Não há associação entre X e Y.
- b) Há relação linear positiva.

- c) Há relação linear negativa.
- d) Há relação quadrática.
- 18) Em um teste de esforço cardiopulmonar aplicado a 55 mulheres e 104 homens, foram medidas entre outras, as seguintes variáveis:
- Grupo: Normais, Cardiopatas ou DPOC (portadores de doença pulmonar obstrutiva crônica).
 - VO2MAX: consumo máximo de O2 (ml/min).
 - VCO2MAX: consumo máximo de CO2 (ml/min).

Algumas medidas descritivas e gráficos são apresentados abaixo nas Tabelas 4.26 e 4.27 e Figura 4.17

Tabela 4.26: VO2MAX

| Grupo | n | Média | Mediana | Desvio Padrão |
|-------------|----|-------|---------|---------------|
| Normais | 56 | 1845 | 1707 | 795 |
| Cardiopatas | 57 | 1065 | 984 | 434 |
| DPOC | 46 | 889 | 820 | 381 |

Tabela 4.27: VCO2MAX

| Grupo | n | Média | Mediana | Desvio Padrão |
|-------------|----|-------|---------|---------------|
| Normais | 56 | 2020 | 1847 | 918 |
| Cardiopatas | 57 | 1206 | 1081 | 479 |
| DPOC | 46 | 934 | 860 | 430 |

Coefficiente de correlação entre VO2MAX e VCO2MAX = 0,92.

- a) Que grupo tem a maior variabilidade?
- b) Compare as médias e as medianas dos 3 grupos.
- c) Compare as distâncias interquartis dos 3 grupos para cada variável. Você acha razoável usar a distribuição normal para esse conjunto de dados?
- d) O que representam os asteriscos nos *boxplots*?
- e) Que tipo de função você ajustaria para modelar a relação entre o consumo máximo de CO2 e o consumo máximo de O2? Por quê?
- f) Há informações que necessitam verificação quanto a possíveis erros? Quais?

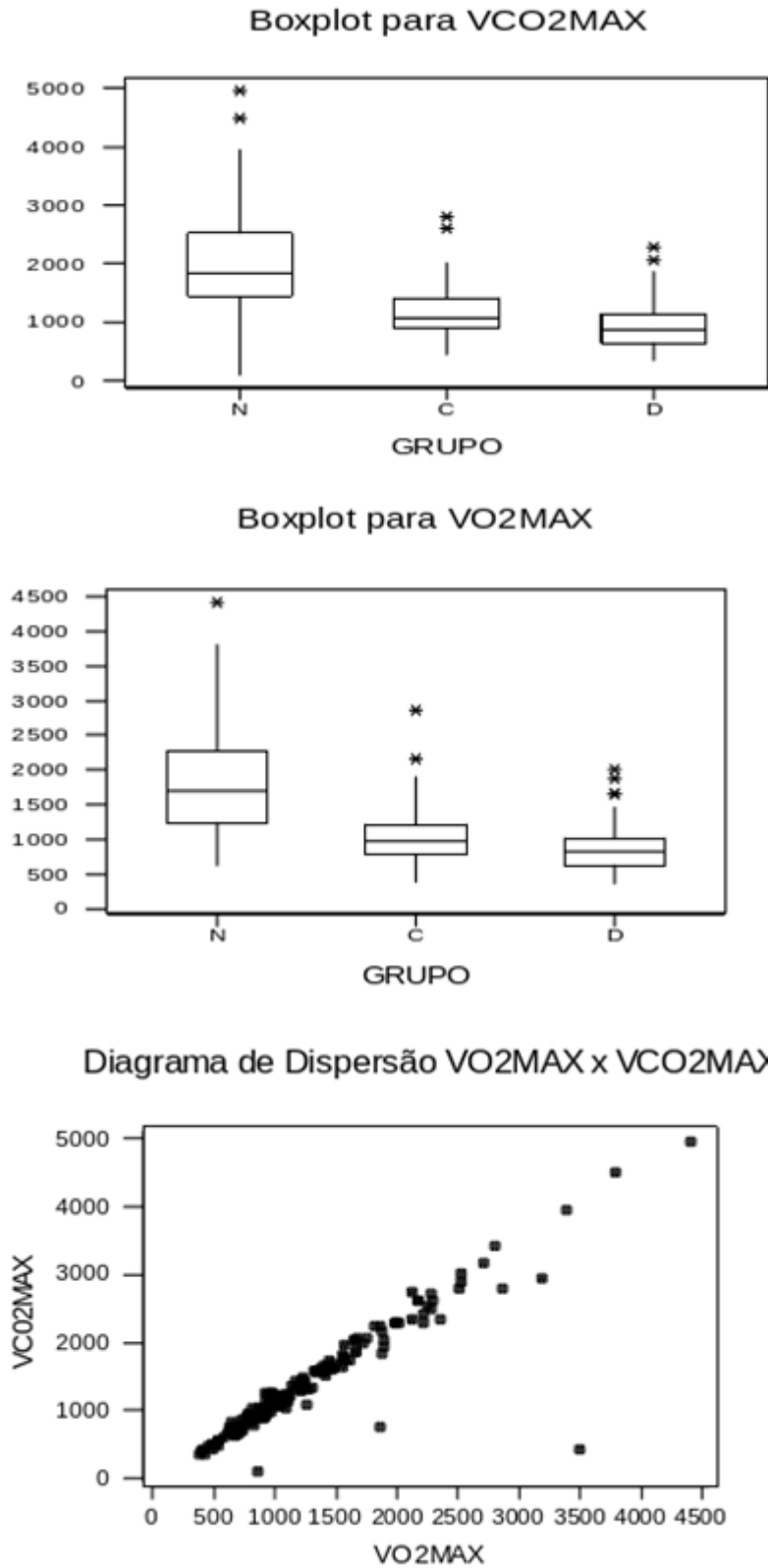


Figura 4.17: Gráficos para o Exercício 18.

Tabela 4.28: Frequências absolutas e relativas de óbitos e hemorragia intracraniana em recém-nascidos

| PCA | Óbito | | | Hemorragia intracraniana | | |
|----------|-------|-----|-------|--------------------------|-----|-------|
| | Sim | Não | Total | Sim | Não | Total |
| Presente | 8 | 13 | 21 | 7 | 14 | 21 |
| Ausente | 1 | 39 | 40 | 7 | 33 | 40 |
| Total | 9 | 52 | 61 | 14 | 44 | 61 |

- 19) Para avaliar a associação entre a persistência do canal arterial (PCA) em recém-nascidos pré-termo (RNPT) e óbito ou hemorragia intracraniana, um pesquisador obteve os dados dispostos na Tabela 4.28

Os resultados da análise estão resumidos na Tabela 4.29.

Tabela 4.29: Resumo das análises para óbitos e hemorragia intracraniana

| Variável | valor p | Razão de chances e Intervalo de confiança (95%) | | |
|--------------------------|---------|--|---------|---------|
| | | Estimativa | Lim inf | Lim sup |
| Óbito | 0,001 | 24,0 | 2,7 | 210,5 |
| Hemorragia intracraniana | 0,162 | 2,4 | 0,7 | 8,0 |

- Interprete as estimativas das razões de chances, indicando claramente a que pacientes elas se referem.
- Analogamente, interprete os intervalos de confiança correspondentes, indicando claramente a que pacientes eles se referem.
- Com base nos resultados anteriores, o que você pode concluir sobre a associação entre persistência do canal arterial e óbito para RNPT em geral? E sobre a associação entre a persistência do canal arterial e a ocorrência de hemorragia interna? Justifique suas respostas.
- Qual a hipótese nula testada em cada caso?
- Qual a interpretação dos níveis descritivos (p-value) em cada caso?

Detalhes podem ser obtidos em Afione (2000).

- 20) Em um estudo comparativo de duas drogas para hipertensão os resultados indicados nas Tabelas 4.30, 4.31 e 4.32 e Figura 4.18 foram usados para descrever a eficácia e a tolerabilidade das drogas ao longo de 5 meses de tratamento.

Tabela 4.30: Frequências absoluta e relativa do efeito colateral para as duas drogas

| Efeito Colateral | Droga 1 | | Droga 2 | |
|------------------|---------|-------|---------|-------|
| | n | % | n | % |
| não | 131 | 61,22 | 144 | 65,45 |
| sim | 83 | 38,79 | 76 | 34,54 |

Tabela 4.31: Distribuição de frequências para as drogas 1 e 2

| Variação Pressão | Droga 1 | | Droga 2 | |
|---------------------|---------|---------|---------|---------|
| | n | % | n | % |
| 0 † 5 | 9 | 4,20561 | 5 | 2,27273 |
| 5 † 10 | 35 | 16,3551 | 29 | 13,1818 |
| 10 † 20 | 115 | 53,7383 | 125 | 56,8181 |
| 20 † 30 | 54 | 25,2336 | 56 | 25,4545 |
| 30 † 40 | 1 | 0,46729 | 5 | 2,27273 |

Tabela 4.32: Medidas resumo das drogas 1 e 2

| Droga | Média | DP | Mediana |
|-------|-------|------|---------|
| 1 | 15,58 | 6,09 | 15,49 |
| 2 | 16,82 | 6,37 | 17,43 |

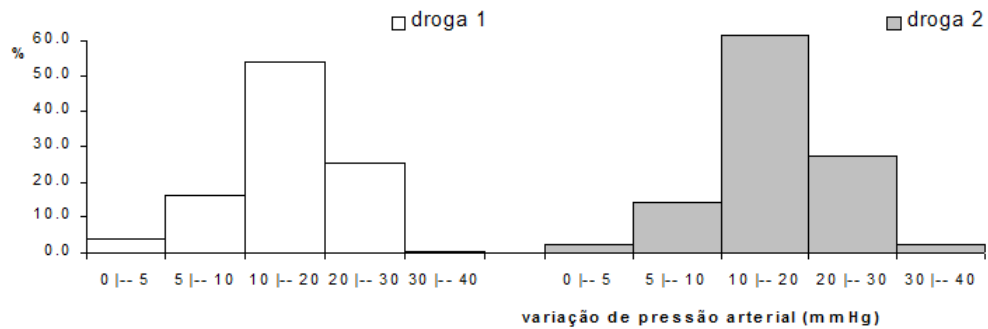


Figura 4.18: Histogramas para a variação de pressão arterial.

- Com a finalidade de melhorar a apresentação dos resultados, faça as alterações que você julgar necessárias em cada uma das tabelas e figura.
- Calcule a média, o desvio padrão e a mediana da variação de pressão arterial para cada uma das duas drogas por meio do histograma.

- c) Compare os resultados obtidos no item b) com aqueles obtidos diretamente dos dados da amostra (Tabela 4.32).
- 21) Numa cidade A em que não foi veiculada propaganda, a porcentagem de clientes que desistem do plano de TV a cabo depois de um ano é 14%. Numa cidade B, em que houve uma campanha publicitária, essa porcentagem é de 6%. Então, considerando uma aproximação de 2 casas decimais, podemos dizer a razão de chances (rc) de desistência entre as cidades A e B é
- a) $rc = 2,33$ b) $rc = 2,55$ c) $rc = 8,00$ d) $rc = 1,75$ e) Nenhuma das respostas anteriores está correta.
- 22) Em um estudo realizado para avaliar o efeito do tabagismo nos padrões de sono foram consideradas amostras de tamanhos 12 e 15 de duas populações: Fumantes e Não Fumantes, respectivamente. A variável observada foi o tempo, em minutos, que se leva para dormir. Os *boxplots* construídos com base nos dados obtidos e gráficos de probabilidade normal são apresentados nas Figuras 4.19 e 4.20.

Esses gráficos sugerem que:

- a) a variabilidade do tempo é a mesma nas duas populações estudadas;
- b) as suposições para a aplicação do teste t-Student para comparar as médias dos tempos nas duas populações estão válidas;
- c) os fumantes tendem a apresentar um tempo maior para dormir do que os não fumantes;
- d) as informações fornecidas permitem concluir que o estudo foi bem planejado;
- e) nenhuma das respostas anteriores está correta.

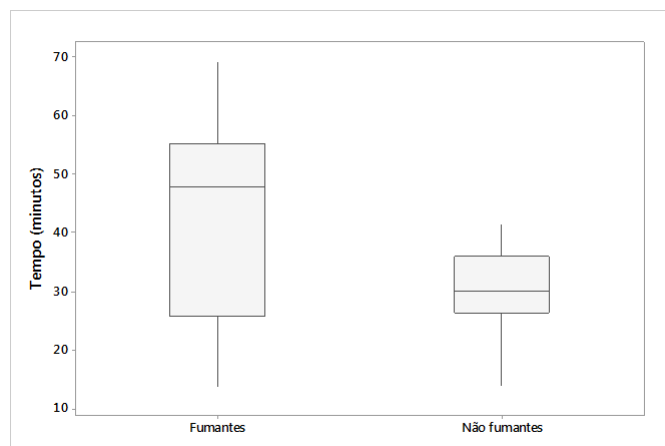


Figura 4.19: *Boxplots* do tempo até dormir nas populações Fumantes e Não Fumantes.

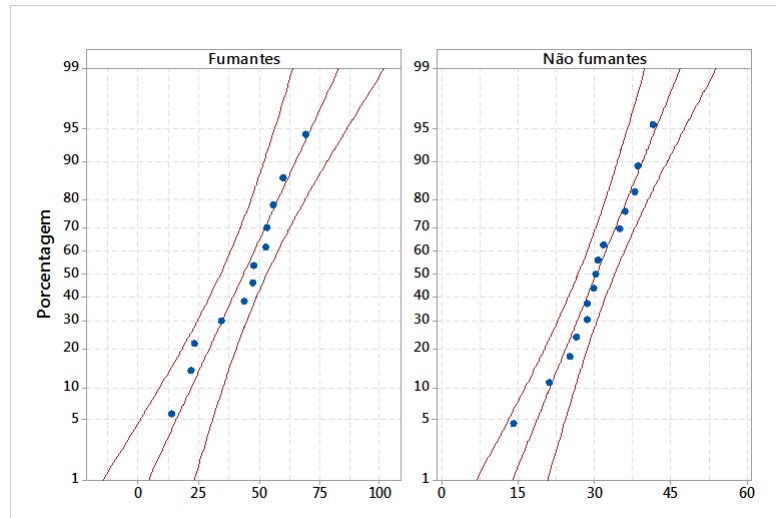


Figura 4.20: Gráfico QQ para as populações Fumantes e Não Fumantes.

Análise de dados de várias variáveis

5.1 Introdução

Em várias situações práticas, os valores de mais de duas variáveis são observados em cada unidade amostral (ou populacional). Por exemplo, o conjunto de dados disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/veiculos.xls> corresponde a uma amostra de 30 veículos fabricados no Brasil ou importados em cada qual foram observadas 4 variáveis: “Preço” (preco), “Comprimento” (comp), “Potência do motor” (motor) e “Procedência” (proc). As três primeiras são variáveis quantitativas contínuas e a quarta é uma variável qualitativa nominal. No conjunto de dados disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/poluicao.xls>, temos observações de 4 variáveis quantitativas contínuas, nomeadamente, concentrações atmosféricas de CO (monóxido de carbono), O₃ (ozônio) além de temperatura (temp) e umidade do ar (umid) ao longo de 120 dias.

Modelos probabilísticos para esse tipo de dados envolvem distribuições conjuntas para as p variáveis, digamos X_1, \dots, X_p , sob investigação. No caso discreto, eles envolvem funções de probabilidade $P(X_1 = x_1, \dots, X_p = x_p)$, e no caso contínuo, funções densidade de probabilidade, $f(x_1, \dots, x_p)$. Medidas resumo (média, variância, correlação etc.) são extensões daquelas estudadas no Capítulo 3 e são abordadas na Seção 5.4.

Quando todas as p variáveis são observadas em cada uma de n unidades amostrais, podemos dispo-las em uma matriz $n \times p$, chamada **matriz de dados**. No exemplo dos veículos, temos uma matriz 30×4 , na qual nem todos os dados são numéricos. No conjunto de dados de poluição, a matriz de dados correspondente tem dimensão 120×4 .

A análise de dados com essa estrutura deve levar em consideração a provável correlação (intraunidades amostrais) entre as variáveis estudadas. Em geral, as observações de uma mesma variável em duas unidades amostrais diferentes não são correlacionadas; no entanto, isso pode não ser verdade em alguns casos. No exemplo de dados de poluição, as unidades amostrais são os diferentes dias e o conjunto das n observações de cada variável corresponde

a uma série temporal. Nesse contexto, também se esperam correlações entre as observações realizadas entre unidades amostrais.

Embora seja possível considerar cada variável separadamente e aplicar as técnicas do Capítulo 3, a análise da relação entre elas precisa ser avaliada de forma conjunta. Muitas análises desse tipo de dados consistem na redução de sua dimensionalidade, considerando algum tipo de transformação que reduza o número de variáveis mas conserve a maior parte da informação do conjunto original. Com essa finalidade, uma técnica de análise de dados multivariados (dados de várias variáveis) bastante utilizada é a **Análise de Componentes Principais**, também conhecida por Análise de Funções Empíricas Ortogonais, em muitas ciências físicas. Esse tópico será discutido no Capítulo 12.

Recursos gráficos para representar as relações entre as variáveis são mais complicados quando temos mais de duas variáveis. Neste livro trataremos apenas de alguns casos, com ênfase em três variáveis. Mais opções e detalhes podem ser encontrados em Chambers et al. (1983).

5.2 Gráficos para três variáveis

Gráfico do desenhista (*Draftsman's display*)

Esse tipo de gráfico consiste de uma matriz (ou dos componentes situados abaixo ou acima da diagonal principal) cujos elementos são gráficos de dispersão para cada par de variáveis. Muitas vezes incluem-se coeficientes de correlação de Pearson entre os diferentes pares de variáveis nos painéis situados acima ou abaixo da diagonal.

Exemplo 5.1. O gráfico do desenhista para as variáveis Preço, Comprimento e Potência do motor do CD-veículos está apresentado na Figura 5.1. Observam-se associações positivas tanto entre Potência do motor e Comprimento quanto entre potência do motor e preço: maiores potências do motor estão associadas tanto com maiores comprimentos quanto com preços maiores. Esse tipo de relação não está tão aparente quanto consideramos as variáveis Preço e Comprimento: para comprimentos entre 3,5 m e 4 m, os preços situam-se entre 10.000 e 15.000 enquanto maiores preços são observados para comprimentos entre 4 e 5 metros. A Figura 5.2 contém o mesmo tipo de gráfico para as variáveis CO, O₃ e temp do CD-poluicao. Não há evidências de associações entre cada par dessas variáveis.

Gráfico de dispersão simbólico

Gráficos de dispersão simbólicos ou estéticos (*aesthetic*) são essencialmente gráficos de dispersão em que mais do que duas variáveis são representadas. Para distingui-las usam-se diferentes símbolos, cores ou forma dos pontos.

Exemplo 5.2. Consideremos novamente os dados do CD-veículos, concentrando a atenção em duas variáveis quantitativas, como Preço (y) e Comprimento

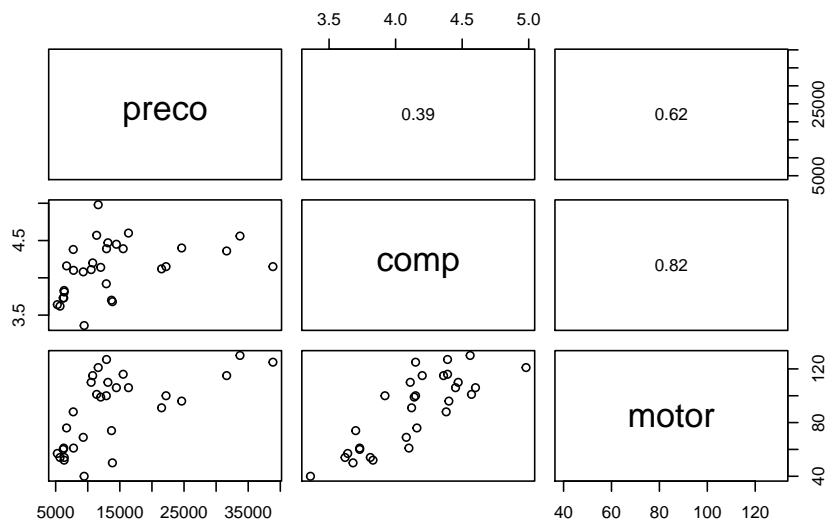


Figura 5.1: Gráfico do desenhista para os dados do CD-veiculos.

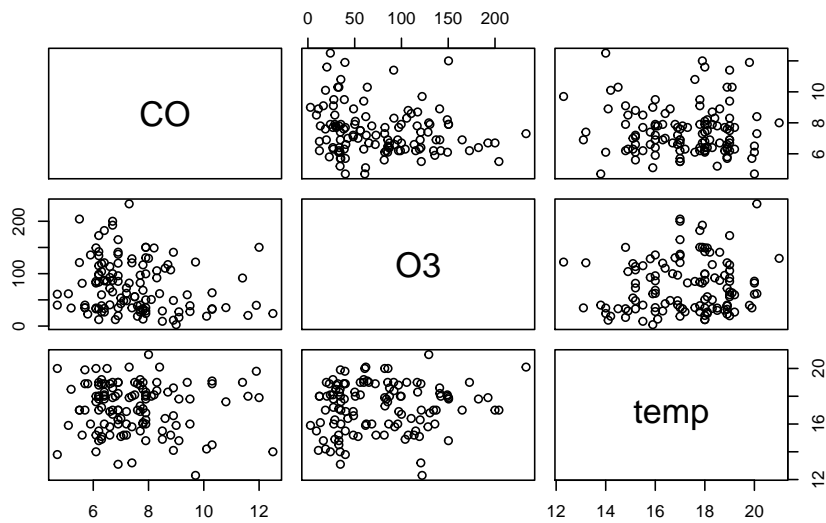


Figura 5.2: Gráfico do desenhista para os dados do CD-poluicao.

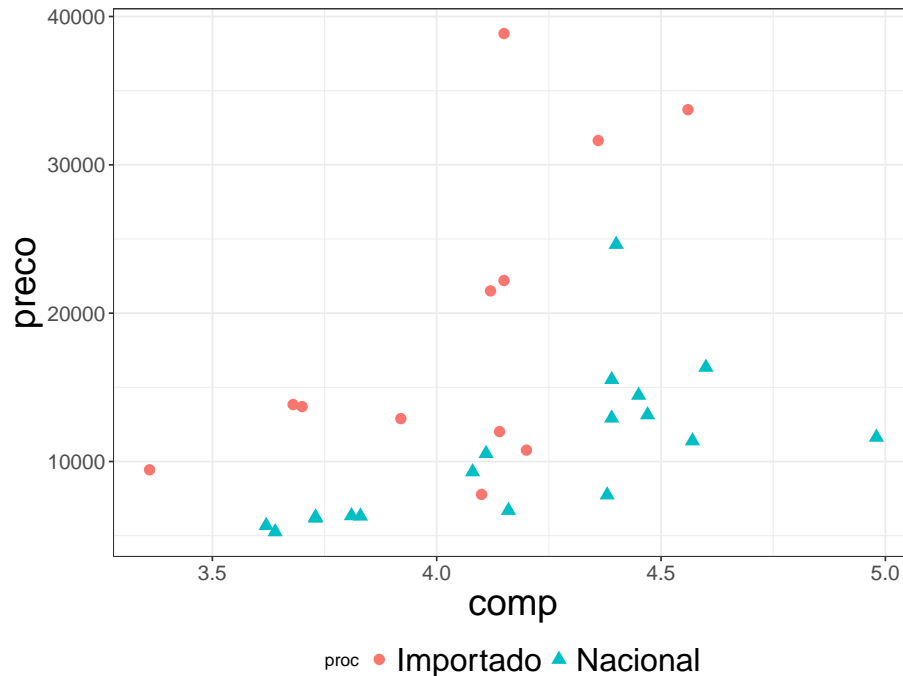


Figura 5.3: Gráfico de dispersão simbólico para os dados do CD-veículos.

mento (x) e uma terceira variável qualitativa, como Procedência (nacional ou importado). Para cada par (x, y) , usamos um símbolo, como Δ , para representar a categoria nacional e \circ , para indicar a categoria importado. Essa escolha permite-nos construir o gráfico de dispersão disposto na Figura 5.3, em que se pode notar que os preços maiores correspondem, de modo geral, a carros importados, o que era esperado. Os carros nacionais pequenos têm os menores preços.

Os comandos do pacote `ggplot2` do R utilizados para a construção do gráfico disposto na Figura 5.3 são

```
library(ggplot2)
library{gdata}

veiculos<-read.xls("/home/jmsinger/Dropbox/CienciaDados/dados/veiculos.xls",
sep="," ,dec="," ,h=T)

g1 <- ggplot(veiculos,aes(comp,preco))
  + geom_point(aes(shape=proc, colour=proc), size=3)
  + theme_bw()
g2 <- g1 + theme(axis.title = element_text(size=23))
g3 <- g2 + theme(legend.position="bottom",
  legend.direction="horizontal",
  legend.text=element_text(size=20))
```

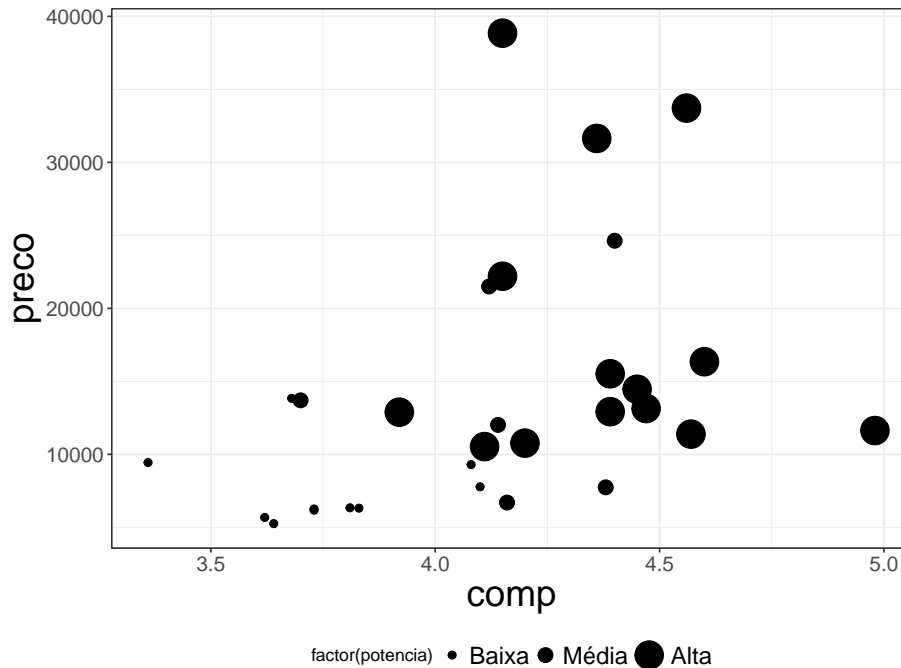



Figura 5.4: Gráfico de dispersão simbólico para os dados do CD-veiculos com potência do motor.

```
g4 <- g3 + theme(axis.text.x = element_text(face="plain", size=13),
                 axis.text.y = element_text(face="plain", size=13))
```

Outra alternativa para a representação gráfica das associações entre três variáveis quantitativas desse conjunto de dados consiste em adotar um símbolo com diversos tamanhos para representar cada uma delas. Por exemplo, na Figura 5.4, apresentamos o gráfico de dispersão de Preço versus Comprimento, com a variável Capacidade do Motor representada por círculos com tamanhos variando conforme a potência: círculos menores para potências entre 40 e 70, círculos médios para potências entre 70 e 100 e círculos maiores para potências entre 100 e 130. O gráfico permite evidenciar que carros com maior capacidade do motor são em geral mais caros e têm maior comprimento.

Os comandos do pacote `ggplot2` do R utilizados para a construção do gráfico disposto na Figura 5.4 são

```
library(ggplot2)
library(gdata)

veiculos<-read.table("/Dropbox/CienciaDados/dados/veiculos.xls",
                    sep="," ,dec="," ,h=T)
```

```

categ_motor=rep(NA,length(motor))
categ_motor[motor>=40 & motor<70]="Baixa Potencia"
categ_motor[motor>=70 & motor<100]="Media Potencia"
categ_motor[motor>=100 & motor<=130]="Alta Potencia"
categ_motor=factor(categ_motor)

potencia = 2*c(categ_motor == "Baixa Potencia")+
  4*c(categ_motor == "Media Potencia")+
  8*c(categ_motor=="Alta Potencia")

ggplot(veiculos, aes(comp,preco))
  + geom_point(aes(size = factor(potencia)))

g1 <- ggplot(veiculos,aes(comp,preco))
  + geom_point(aes(size = factor(potencia))) + theme_bw()
g2 <- g1 + theme(axis.title = element_text(size=23))
g3 <- g2 + theme(legend.position="bottom",
  legend.direction="horizontal",
  legend.text=element_text(size=15))
g4 <- g3 + theme(axis.text.x = element_text(face="plain",
  size=13), axis.text.y = element_text(face="plain",
  size=13))
g5 <- g4 + scale_size_manual(labels = c("Baixa", "Media", "Alta"),
  values = c(2, 4, 8))

```

Exemplo 5.3. No pacote `ggplot2` encontramos o conjunto de dados `mpg`, que consiste de observações de 38 modelos de carros nos EUA, com várias variáveis, dentre as quais destacamos: `displ`=capacidade do motor, `hwy`=eficiência do carro em termos de gasto de combustível, `class`=tipo do carro (duas portas, compacto, SUV etc.) e `drv`=tipo de tração (4 rodas, rodas dianteiras e rodas traseiras).

Consideremos o comando

```

ggplot(data=mpg)+geom_point(mapping=aes(x=displ,y=hwy,color=drv))+
  geom_smooth(mapping=aes(x=displ,y=hwy,color=drv))

```

que usa a opção `geom_smooth` para ajustar curvas suaves aos dados (usando o `lowess`) de cada conjunto de pontos da variável `drv` (*drive*), ou seja uma curva para os pontos com o valor 4 (*four-wheel drive*), outra para os pontos com o valor f (*front-wheel drive*) e uma curva para os pontos com valor r (*rear-wheel drive*). O resultado está apresentado na Figura 5.5. Detalhes sobre curvas `lowess` podem ser obtidos na Nota de Capítulo 2.

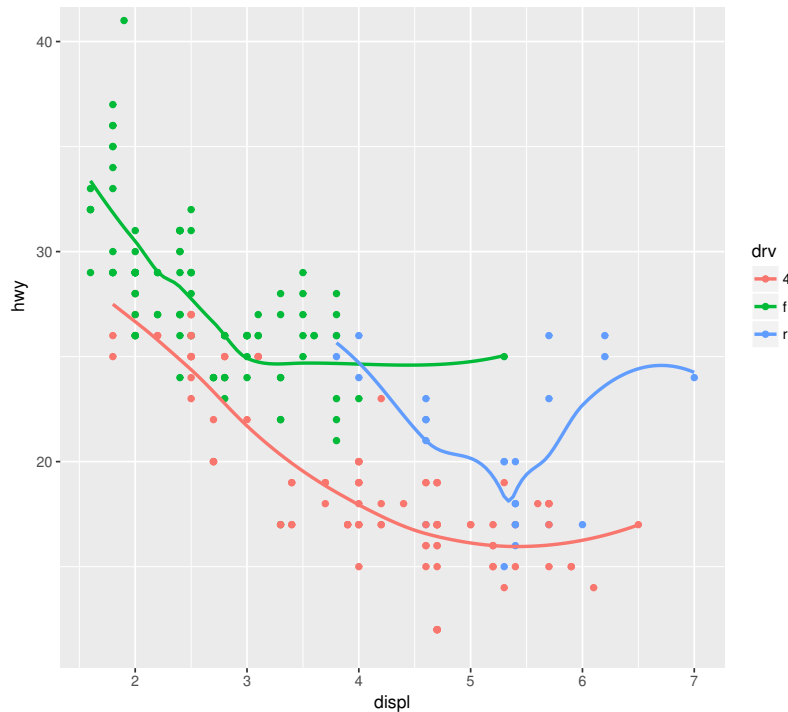


Figura 5.5: Gráfico de dispersão simbólico das variáveis hwy versus displ, categorizado pela variável drv com pontos e curvas.

Partição e Janelamento

Uma abordagem alternativa aos gráficos de dispersão simbólicos consiste em dividir as n observações disponíveis em subconjuntos de acordo com os valores de uma das variáveis e construir um gráfico de dispersão envolvendo as outras duas variáveis para cada subconjunto.

Por exemplo, no CD-veiculos, podemos construir gráficos de dispersão para Preço e Comprimento de acordo com a procedência (nacional ou importado), como na Figura 5.3 ou construir gráficos de dispersão para Preço e Comprimento segundo as classes em que foram divididas as unidades amostrais com base na variável quantitativa Capacidade de motor. Esse gráfico está apresentado na [Figura 5.Y](#).

Gráfico de perfis médios

Voltemos nossa atenção para estudos em que se deseja avaliar o “efeito” de “interação” entre duas variáveis explicativas categorizadas, usualmente denominadas **fatores**, digamos, A (droga, por exemplo) e B (faixa etária, por exemplo), o primeiro com a e o segundo com b níveis, na distribuição de uma resposta contínua (pressão diastólica, por exemplo). Admitamos que m unidades amostrais tenham sido observadas sob cada tratamento, *i.e.*, para cada combinação dos níveis dos fatores A e B . Esse é típico figurino dos problemas analisados por meio da técnica de **Análise de Variância**,

comumente cognominada ANOVA (do inglês, *ANalysis Of VAriance*). Admitamos que o “efeito” de cada um dos fatores e a interação entre eles possam ser definidos em termos dos valores esperados das distribuições da resposta sob os diferentes tratamentos (combinações dos níveis dos dois fatores). Um modelo comumente considerado para análise de dados com essa estrutura é

$$y_{ijk} = \mu_{ij} + e_{ijk}, \quad (5.1)$$

$i = 1, \dots, a$, $j = 1, \dots, b$, $k = 1, \dots, m$, em que $E(e_{ijk}) = 0$, $\text{Var}(e_{ijk}) = \sigma^2$ e $E(e_{ijk}e_{i'j'k'}) = 0$, $i \neq i'$ ou $j \neq j'$ ou $k \neq k'$, ou seja, os e_{ijk} são erros não correlacionados. Esta é a parametrização conhecida como de “médias de celas” pois o parâmetro de localização μ_{ij} pode ser interpretado como o valor esperado (médio) da resposta de unidades amostrais submetidas ao tratamento correspondente ao nível i do fator A e nível j do fator B .

Tomando $a = b = 2$ para facilidade de exposição, o “efeito” do fator A (droga) para unidades amostrais no nível j do fator B (faixa etária) pode ser definido como a diferença $\mu_{1j} - \mu_{2j}$, que, por exemplo, corresponde à diferença entre o valor esperado da pressão diastólica de unidades amostrais na faixa etária j submetidas à droga 1 e o valor esperado da pressão diastólica de unidades amostrais na faixa etária j submetidas à droga 2. Analogamente, o “efeito” do fator B (faixa etária) para unidades amostrais no nível i do fator A (droga) pode ser definido como a diferença $\mu_{i1} - \mu_{i2}$.

A interação entre os fatores A e B pode ser definida como a diferença entre o efeito do fator A para unidades amostrais no nível 1 do fator B e o efeito do fator A para unidades amostrais no nível 2 do fator B , nomeadamente, $(\mu_{11} - \mu_{21}) - (\mu_{12} - \mu_{22})$. Outras definições equivalentes, como $(\mu_{22} - \mu_{12}) - (\mu_{21} - \mu_{11})$ também podem ser utilizadas. A escolha entre as alternativas deve ser feita em função dos detalhes do problema; por exemplo, se a droga 1 for uma droga padrão e a faixa etária 1 corresponder a indivíduos mais jovens, esta última proposta pode ser mais conveniente.

Quando a interação é nula, o efeito do fator A é o mesmo para unidades amostrais submetidas a qualquer dos níveis do fator B e pode-se definir o **efeito principal** do fator A como $(\mu_{11} + \mu_{12})/2 - (\mu_{21} + \mu_{22})/2$, que corresponde à diferença entre o valor esperado da resposta para unidades amostrais submetidas ao nível 1 do fator A e o valor esperado da resposta para unidades amostrais submetidas ao nível 2 do fator A (independentemente do nível do fator B). Similarmente, o efeito principal do fator B pode ser definido como $(\mu_{11} + \mu_{21})/2 - (\mu_{12} + \mu_{22})/2$.

Em muitos casos, essas definições de efeitos principais podem ser consideradas mesmo na presença de interação, desde que ela seja **não essencial**. A interação entre os fatores A e B é não essencial quando as diferenças $\mu_{11} - \mu_{21}$ e $\mu_{12} - \mu_{22}$ têm o mesmo sinal, mas magnitudes diferentes. Por exemplo, se $\mu_{11} - \mu_{21} = K_1 > 0$ e $\mu_{12} - \mu_{22} = K_2 > 0$ com $K_1 \neq K_2$, a resposta esperada sob o nível 1 do fator A é maior que a resposta esperada sob o nível 2 do fator A tanto no nível 1 quanto no nível 2 do fator B , embora as magnitudes das diferenças não sejam iguais. Se essas magnitudes tiverem

siniais diferentes, a interação é essencial. Por outro lado, se $K_1 = K_2$, não há interação. O leitor pode consultar Kutner et al. (2004) para uma discussão sobre a consideração de efeitos principais em situações com interação não essencial. Na Figura 5.6 apresentamos gráficos de perfis médios (populacionais) com interações essencial e não essencial entre dois fatores, A e B , cada um com dois níveis.

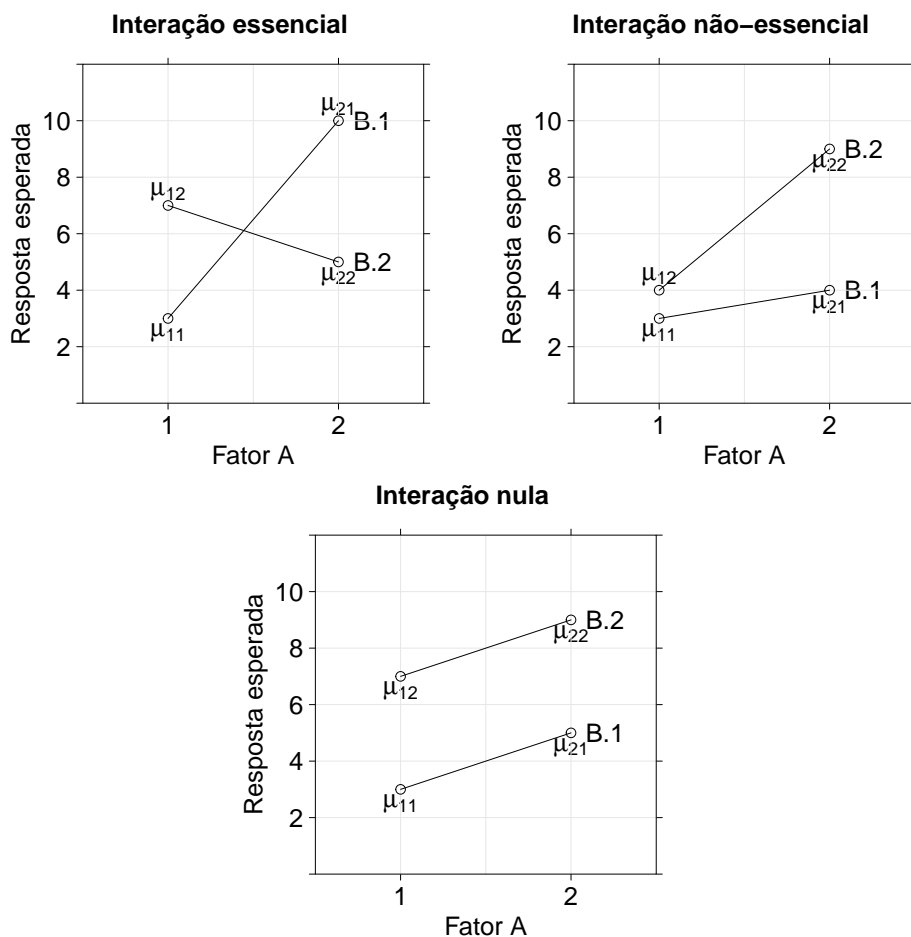


Figura 5.6: Gráfico de perfis médios (populacionais) com diferentes tipos de interação.

Na prática, gráficos de perfis médios são construídos com as médias e desvios padrões (ou erros padrões) amostrais e servem para sugerir possíveis interações e/ou efeitos principais dos fatores envolvidos.

Exemplo 5.4. Consideremos um estudo cujo objetivo era avaliar o efeito de dois fatores, nomeadamente, tipo de adesivo odontológico e instante em que foi aplicada uma carga cíclica na resistência à tração de corpos de prova odontológicos. O fator Adesivo tem três níveis (CB, RX e RXQ) e o fator Instante tem três níveis (início, após 15 minutos e após 2 horas) para os adesivos CB e RXQ e quatro níveis (após fotoativação além de início, após

15 minutos e após 2 horas) para o cimento RX. Os dados estão dispostos na Tabela 5.1 e contêm omissões causadas pela quebra acidental dos corpos de prova. Uma planilha com esses dados está disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/adensivo.xls> e detalhes sobre o estudo podem ser encontrados em Witzel et al. (2000).

Tabela 5.1: Resistência à tração de corpos de prova de um estudo sobre cimentos odontológicos

| Adesivo | Instante | | | Adesivo | Instante | | |
|---------|----------|-------|--------|---------|----------|-------|--------|
| | carga | Repet | Resist | | carga | Repet | Resist |
| CB | inic | 1 | 8,56 | RX | 2h | 1 | 16,76 |
| CB | inic | 2 | 5,01 | RX | 2h | 2 | 16,80 |
| CB | inic | 3 | 2,12 | RX | 2h | 3 | 13,07 |
| CB | inic | 4 | 1,70 | RX | 2h | 4 | 11,47 |
| CB | inic | 5 | 4,78 | RX | 2h | 5 | 15,86 |
| CB | 15min | 1 | 5,67 | RX | fativ | 1 | 13,42 |
| CB | 15min | 2 | 4,07 | RX | fativ | 2 | 13,82 |
| CB | 15min | 3 | 5,99 | RX | fativ | 3 | 19,63 |
| CB | 15min | 4 | 5,52 | RX | fativ | 4 | 15,60 |
| CB | 15min | 5 | | RX | fativ | 5 | 17,87 |
| CB | 2h | 1 | 8,57 | RXQ | inic | 1 | 3,95 |
| CB | 2h | 2 | 6,94 | RXQ | inic | 2 | 6,49 |
| CB | 2h | 3 | | RXQ | inic | 3 | 4,60 |
| CB | 2h | 4 | | RXQ | inic | 4 | 6,59 |
| CB | 2h | 5 | | RXQ | inic | 5 | 4,78 |
| RX | inic | 1 | 20,81 | RXQ | 15min | 1 | 8,14 |
| RX | inic | 2 | 12,14 | RXQ | 15min | 2 | 3,70 |
| RX | inic | 3 | 9,96 | RXQ | 15min | 3 | |
| RX | inic | 4 | 15,95 | RXQ | 15min | 4 | |
| RX | inic | 5 | 19,27 | RXQ | 15min | 5 | |
| RX | 15min | 1 | 14,25 | RXQ | 2h | 1 | 4,39 |
| RX | 15min | 2 | 14,21 | RXQ | 2h | 2 | 6,76 |
| RX | 15min | 3 | 13,60 | RXQ | 2h | 3 | 4,81 |
| RX | 15min | 4 | 11,04 | RXQ | 2h | 4 | 10,68 |
| RX | 15min | 5 | 21,08 | RXQ | 2h | 5 | |

Médias e desvios padrões da resistência à tração para as observações realizadas sob cada tratamento (correspondentes ao cruzamento dos níveis de cada fator) estão apresentados na Tabela 5.2.

O gráfico de perfis médios correspondente está apresentado na Figura 5.7. Esse gráfico sugere que não existe interação entre os dois fatores (pois os perfis são “paralelos” (lembramos que os perfis apresentados são amostrais

Tabela 5.2: Estatísticas descritivas para os dados da Tabela 5.1

| Adesivo | Instante | n | Média | Desvio Padrão |
|---------|----------|---|-------|---------------|
| CB | 0 min | 5 | 4,43 | 2,75 |
| | 15 min | 4 | 5,31 | 0,85 |
| | 120 min | 2 | 7,76 | 1,15 |
| RXQ | 0 min | 5 | 5,28 | 1,19 |
| | 15 min | 2 | 5,92 | 3,14 |
| | 120 min | 4 | 6,66 | 2,87 |
| RX | 0 min | 5 | 15,63 | 4,60 |
| | 15 min | 5 | 14,84 | 3,73 |
| | 120 min | 5 | 14,79 | 2,40 |
| | fativ | 5 | 16,07 | 2,66 |

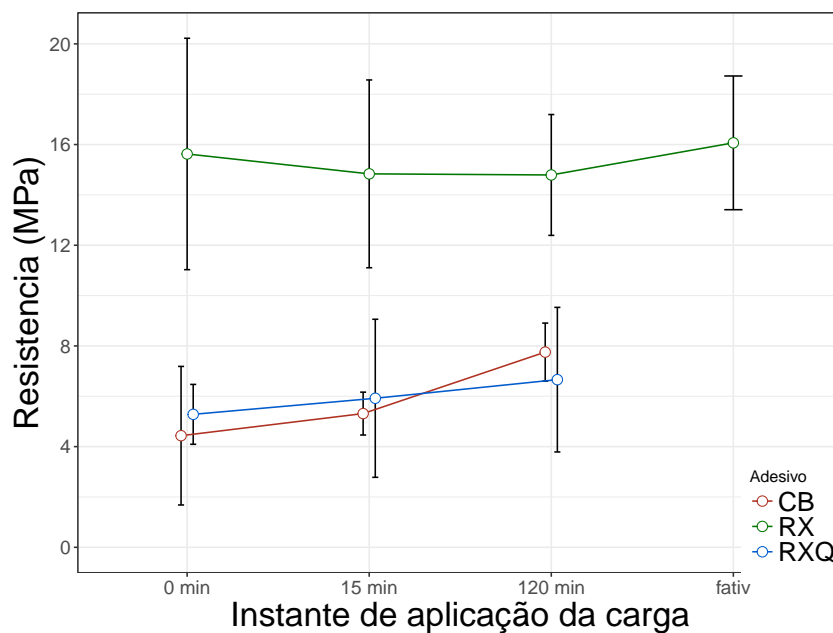


Figura 5.7: Gráfico de perfis de médias (com barras de desvios padrões) para os dados da Tabela 5.1.

e que servem apenas para sugerir o comportamento dos perfis populacionais correspondentes). Além disso, a variabilidade dos dados (aqui representada pelas barras de desvios padrões) deve ser levada em conta para avaliar as possíveis diferenças. Nesse contexto, podemos esperar um efeito principal do fator Adesivo, segundo o qual, os adesivos CB e RXQ têm valores esperados iguais, mas menores que valor esperado do adesivo RX. Também é razoável esperar que não exista um efeito principal de Instante de aplicação, dado que os três perfis são “paralelos” ao eixo das abscissas. Finalmente,

convém reafirmar que as conclusões acima são apenas exploratórias precisam ser confirmadas por técnicas de ANOVA para efeitos inferenciais. A correspondente tabela de ANOVA (obtida por meio do pacote R) apresentada a seguir indica não haver evidências nem de interação entre Adesivo e Instante de aplicação ($p = 0,737$) nem de efeito principal de Instante de aplicação ($p = 0,773$), mas sugere forte evidência de efeito de Adesivo ($p < 0,001$).

| | Df | Sum Sq | Mean Sq | F value | Pr(>F) |
|------------------|----|--------|---------|---------|--------------|
| adesivo | 2 | 987.8 | 493.9 | 59.526 | 1.65e-11 *** |
| instante | 3 | 9.3 | 3.1 | 0.373 | 0.773 |
| adesivo:instante | 4 | 16.5 | 4.1 | 0.498 | 0.737 |
| Residuals | 32 | 265.5 | 8.3 | | |

Comparações múltiplas entre os níveis de Adesivo realizadas por meio da técnica de Tukey, apresentadas a seguir, corroboram a sugestão de que os efeitos dos adesivos CB e RXQ são iguais ($p < 0,899$), porém diferentes do efeito do adesivo RXQ ($p < 0,001$).

| | diff | lwr | upr | p adj |
|--------|------------|------------|-----------|-----------|
| RX-CB | 9.9732273 | 7.316138 | 12.630317 | 0.0000000 |
| RXQ-CB | 0.5418182 | -2.476433 | 3.560069 | 0.8986306 |
| RXQ-RX | -9.4314091 | -12.088499 | -6.774319 | 0.0000000 |

5.3 Gráficos para quatro ou mais variáveis

Os mesmos tipos de gráficos examinados na seção anterior podem ser considerados para a análise conjunta de quatro ou mais variáveis. Como ilustração, consideremos dados de concentração de elementos químicos observados em cascas de diferentes espécies de árvores na cidade de São Paulo, utilizados para avaliar os níveis de poluição. Os dados estão disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/arvores.xls>.

Exemplo 5.5. Na Figura 5.8 apresentamos um gráfico do desenhista com $\binom{4}{2} = 6$ painéis correspondentes aos elementos Mn, Fe, Cu e Zn observados em árvores da espécie Tipuana localizadas junto a vias coletoras. Aqui também observam-se evidências de correlações moderadas entre as variáveis.

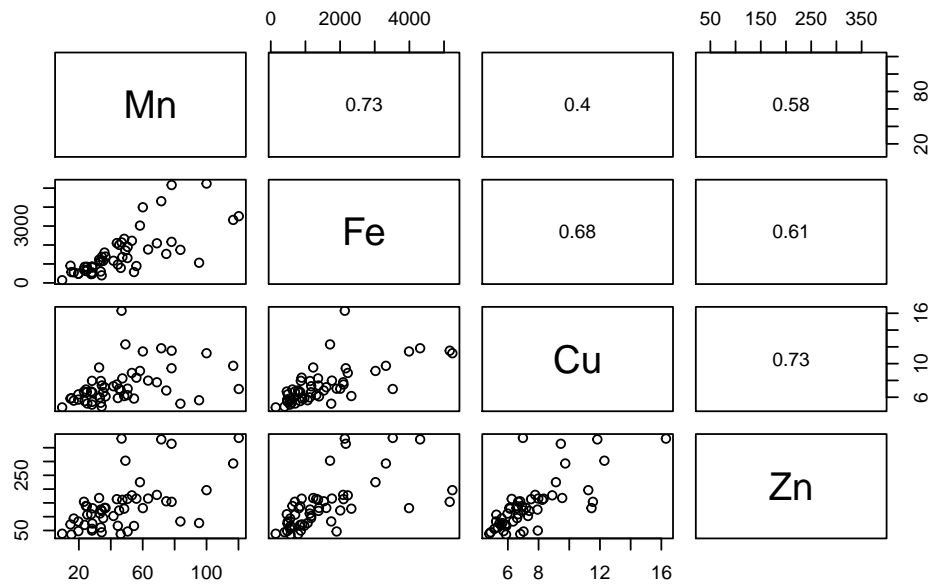


Figura 5.8: Gráfico do desenhista para os dados da concentração de elementos químicos em cascas de árvores.

Outros tipos de gráficos podem ser encontrados em Cleveland (1979) e Chambers et al. (1983), entre outros.

5.4 Medidas resumo multivariadas

Consideremos valores de p variáveis X_1, \dots, X_p , medidas em n unidades amostrais dispostos na forma de uma matriz de dados \mathbf{X} , de ordem $n \times p$, *i.e.*,

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1v} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2v} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{ii} & x_{i2} & \cdots & x_{iv} & \cdots & x_{ip} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nv} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}. \quad (5.2)$$

Para cada variável X_i podemos considerar as medidas resumo já estudadas no Capítulo 3 (média, mediana, quantis, variância etc.).

Para cada par de variáveis, X_i e X_j , também podemos considerar as medidas de correlação (linear) já estudadas no Capítulo 4, a saber, covariância e coeficiente de correlação. O vetor de dimensão $p \times 1$ contendo as p médias é chamado de **vetor de médias**.

Similarmente, a matriz simétrica com dimensão $p \times p$ contendo as variâncias ao longo da diagonal principal e as covariâncias dispostas acima e abaixo dessa diagonal é chamada de **matriz de covariâncias** de X_1, \dots, X_p ou, equivalentemente, do vetor $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)^\top$.

Exemplo 5.6 Vamos considerar as variáveis CO, O3, Temp e Umid do CD-poluicao. A matriz de covariâncias correspondente é

| | CO | O3 | Temp | Umid |
|------|--------|---------|-------|---------|
| CO | 2.38 | -14.01 | -0.14 | 1.46 |
| O3 | -14.01 | 2511.79 | 9.43 | -239.02 |
| Temp | -0.14 | 9.43 | 3.10 | 0.14 |
| Umid | 1.46 | -239.02 | 0.14 | 153.63 |

Note que $\text{Cov}(\text{CO}, \text{O3}) = -14,01 = \text{Cov}(\text{O3}, \text{CO})$ etc.

Para obter a correspondente **matriz de correlações**, basta usar a definição (4.6) para cada par de variáveis, obtendo-se a matriz

| | CO | O3 | Temp | Umid |
|------|-------|-------|-------|-------|
| CO | 1.00 | -0.18 | -0.05 | 0.08 |
| O3 | -0.18 | 1.00 | 0.11 | -0.38 |
| Temp | -0.05 | 0.11 | 1.00 | 0.01 |
| Umid | 0.08 | -0.38 | 0.01 | 1.00 |

As correlações entre as variáveis são irrelevantes, exceto para O3 e Umid.

Exemplo 5.7 Consideremos agora os dados do CD-iris, disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/iris.xls>. A matriz de correlações correspondente é

| | i1 | i2 | i3 | i4 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| i1 | 1.00 | -0.12 | 0.87 | 0.82 |
| i2 | -0.12 | 1.00 | -0.43 | -0.37 |
| i3 | 0.87 | -0.43 | 1.00 | 0.96 |
| i4 | 0.82 | -0.37 | 0.96 | 1.00 |

em que $i1 = \text{Sepal.Length}$, $i2 = \text{Sepal.Width}$, $i3 = \text{Petal.Length}$ e $i4 = \text{Petal.Width}$.

Na Figura 5.9 dispomos o gráfico do desenhista para as quatro variáveis, com o acréscimo dos coeficientes de correlação de Pearson na parte superior, confirmando a relevância das associação positiva observada entre os pares de variáveis $(i1, i3)$, $(i1, i4)$ e $(i3, i4)$.

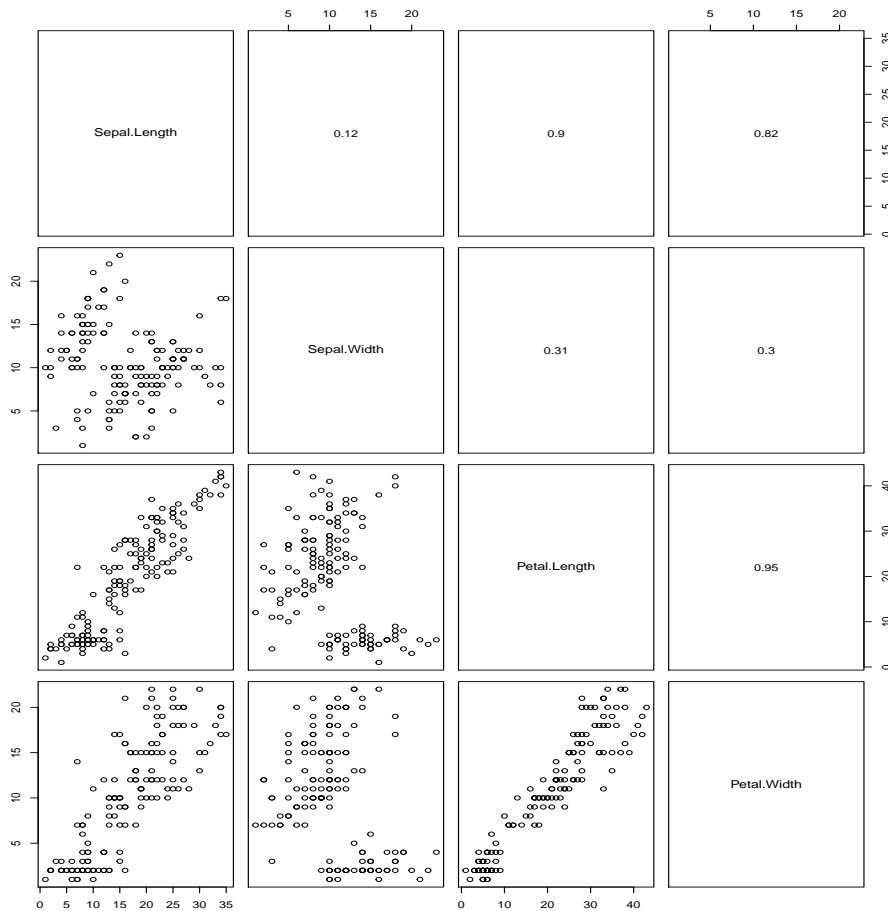


Figura 5.9: Gráfico do desenhista para os dados do CD-iris.

5.5 Notas de capítulo

1) Notação matricial para variáveis multivariadas

Nesta seção iremos formalizar a notação matricial usualmente empregada para representar medidas resumo multivariadas.

Denotemos cada coluna da matriz de dados \mathbf{X} por \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, p$, com elementos x_{ij} , $i = 1, \dots, n$. Então, definindo $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^p x_{ij}$, o vetor de médias é expresso como $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_p)^\top$.

Se denotarmos por $\mathbf{1}_n$ o vetor coluna de ordem $n \times 1$ contendo todos os elementos iguais a um, podemos escrever o vetor de médias como

$$\bar{\mathbf{x}}^\top = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n^\top \mathbf{X} = [\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_p]. \quad (5.3)$$

A matriz de desvios de cada observação em relação à média correspondente é

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} - \mathbf{1}_n \bar{\mathbf{x}}^\top \quad (5.4)$$

de forma que a matriz de covariâncias pode ser expressa como

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n} \mathbf{Y}^\top \mathbf{Y}. \quad (5.5)$$

Na diagonal principal de \mathbf{S} constam as variâncias amostrais s_{jj} , $j = 1, \dots, p$ e nas demais diagonais temos as covariâncias amostrais

$$s_{uv} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{iu} - \bar{x}_u)(x_{iv} - \bar{x}_v), \quad u, v = 1, \dots, p,$$

em que $s_{uv} = s_{vu}$, para todo u, v . Ou seja, podemos escrever

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix}.$$

O desvio padrão amostral da j -ésima componente é $s_j = (s_{jj})^{1/2}$, $j = 1, \dots, p$. Denotando por \mathbf{D} a matriz diagonal de ordem $p \times p$ com o j -ésimo elemento da diagonal igual a s_j , a **matriz de correlações** é definida por

$$\mathbf{R} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{D}^{-1} = [r_{uv}]. \quad (5.6)$$

em que $r_{vv} = r_v = 1$, $v = 1, \dots, p$ e $r_v \geq r_{uv}$ para todo $u \neq v$.

O coeficiente de correlação amostral entre as variáveis X_u e X_v é dado por

$$r_{uv} = \frac{s_{uv}}{\sqrt{s_u s_v}}, \quad (5.7)$$

com $-1 \leq r_{uv} \leq 1$ e $r_{uv} = r_{vu}$ para todo u, v .

Em muitas situações também são de interesse as somas de quadrados de desvios, nomeadamente

$$W_{vv} = \sum_{i=1}^n (x_{iv} - \bar{x}_v)^2, \quad v = 1, \dots, p \quad (5.8)$$

e as somas dos produtos de desvios, a saber,

$$W_{uv} = \sum_{i=1}^n (x_{iu} - \bar{x}_u)(x_{iv} - \bar{x}_v), \quad u, v = 1, \dots, p. \quad (5.9)$$

Exemplo 5.6. Os dados dispostos na Tabela 5.3 correspondem a cinco agentes de seguros para os quais foram observados os valores das variáveis $X_1 =$ número de anos de serviço e $X_2 =$ número de clientes.

Tabela 5.3: Número de anos de serviço e número de clientes para cinco agentes de seguros

| Agente | X_1 | X_2 |
|--------|-------|-------|
| A | 2 | 48 |
| B | 4 | 56 |
| C | 5 | 64 |
| D | 6 | 60 |
| E | 8 | 72 |

Para os dados da Tabela 5.3, a matriz de dados é

$$\mathbf{X}^\top = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 5 & 6 & 8 \\ 48 & 56 & 64 & 60 & 72 \end{bmatrix},$$

de modo que

$$\bar{x}_1 = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 x_{i1} = \frac{1}{5}(2 + 4 + 5 + 6 + 8) = 5,$$

$$\bar{x}_2 = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 x_{i2} = \frac{1}{5}(48 + 56 + 64 + 60 + 72) = 60$$

e o vetor de médias é

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 60 \end{bmatrix}.$$

A matriz de desvios em relação às médias é

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 2-5 & 48-60 \\ 4-5 & 56-60 \\ 5-5 & 64-60 \\ 6-5 & 60-60 \\ 8-5 & 72-60 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & -12 \\ -1 & -4 \\ 0 & 4 \\ 1 & 0 \\ 3 & 12 \end{bmatrix}$$

e as correspondentes matrizes de covariâncias e correlações são, respectivamente,

$$\mathbf{S} = \frac{1}{5} \mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 4 & 15,2 \\ 15,2 & 64 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & 0,95 \\ 0,95 & 1 \end{bmatrix}.$$

As variâncias e covariâncias amostrais são

$$s_{11} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 (x_{i1} - \bar{x}_1)^2 = 4,$$

$$s_{22} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 (x_{i2} - \bar{x}_2)^2 = 64,$$

$$s_{12} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2) = 15,2$$

com $s_{21} = s_{12}$ ao passo que as correlações amostrais são dadas por

$$r_{11} = r_{22} = 1,$$

$$r_{12} = \frac{s_{12}}{\sqrt{s_{11}s_{22}}} = \frac{15,2}{\sqrt{4 \times 64}} = 0,95,$$

com $r_{21} = r_{12}$.

2) Lowess

Muitas vezes, gráficos de dispersão (simbólicos ou não) são utilizados para a identificação de curvas que possam representar a relação entre as variáveis sob avaliação. Por exemplo, pode haver interesse em saber se uma variável é uma função linear ou quadrática da outra. O ajuste de uma curva suave aos dados pode ser realizado or meio da técnica conhecida como **lowess** (*locally weighted regression scatterplot smoothing*). Essa técnica de **suavização** é realizada por meio de sucessivos ajustes de retas por mínimos quadrados ponderados (ver Capítulo 6) a subconjuntos dos dados.

Consideremos, as coordenadas (x_j, y_j) , $j = 1, \dots, n$ de um conjunto de dados, por exemplo, correspondentes aos pontos associados aos veículos $\text{drv}=4$ na Figura 5.5. O ajuste de uma curva suave a esses pontos por meio da técnica lowess é baseado na substituição da coordenada y_j por um valor suavizado \hat{y}_j obtido segundo os seguintes passos:

- i) Escolha uma faixa vertical centrada em (x_j, y_j) contendo q pontos conforme ilustrado na Figura 5.10 (em que $q = 9$). Em geral, escolhemos $q = [n \times p]$ em que $0 < p < 1$, tendo em conta que quanto maior for p , maior será o grau de suavização.

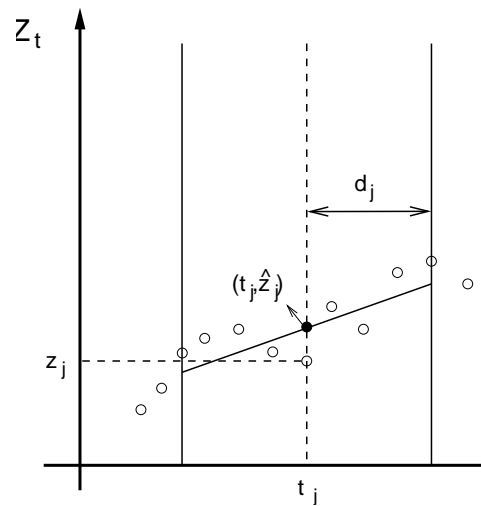


Figura 5.10: Faixa centrada em (x_j, y_j) para suavização por lowess.

- ii) Use uma função simétrica em torno de x_j para atribuir pesos aos pontos na vizinhança de (x_j, y_j) . Essa função é escolhida de forma que o maior peso seja atribuído a (x_j, y_j) e que os demais pesos diminuam à medida que x se afasta de x_j . Com essa finalidade, utiliza-se a **função tricúbica**

$$h(u) = \begin{cases} (1 - |u|^3)^3, & \text{se } |u| < 1 \\ 0, & \text{em caso contrário.} \end{cases}$$

O peso atribuído a (x_k, y_k) é $h[(x_j - x_k)/d_j]$ em que d_j é a distância entre x_j e seu vizinho mais afastado dentro da faixa selecionada em i) conforme ilustrado na Figura 5.11.

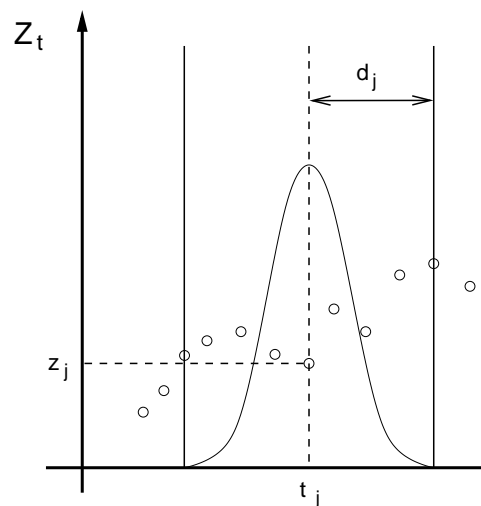


Figura 5.11: Atribuição de pesos para suavização por lowess.

- iii) Ajuste uma reta $y = \alpha + \beta x + e$ aos q pontos da faixa centrada em x_j , por meio da minimização de

$$\sum_{k=1}^q h_j(x_k)(y_k - \alpha - \beta x_k)^2,$$

obtendo os estimadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$. O valor suavizado de y_k é $\hat{y}_k = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_k$, $k = 1, \dots, q$.

- iv) Calcule os resíduos $\hat{e}_k = y_k - \hat{y}_k$, $k = 1, \dots, q$ e por meio de um gráfico de dispersão, por exemplo, identifique possíveis pontos discrepantes (*outliers*). Quando existirem, refaça os cálculos, atribuindo pesos menores aos maiores resíduos, por meio da **função biquadrática**

$$g(u) = \begin{cases} (1 - |u|^2)^2, & \text{se } |u| < 1 \\ 0, & \text{em caso contrário.} \end{cases}$$

O peso atribuído ao ponto (x_k, y_k) é $g(x_k) = g(\hat{e}_k/6m)$ em que m é a mediana dos valores absolutos dos resíduos ($|\hat{e}_k|$). Se o resíduo \hat{e}_k for muito menor do que $6m$, o peso a ele atribuído será próximo de 1; em caso contrário, será próximo de zero. A razão pela qual utilizamos o denominador $6m$ é que se os resíduos tiverem uma distribuição normal com variância σ^2 , então $m \approx 2/3$ e $6m \approx 4\sigma$. Isso implica que para resíduos normais, raramente teremos pesos pequenos.

- v) Finalmente, ajuste uma nova reta aos pontos (x_k, y_k) com pesos $h(x_k)g(x_k)$. Se (x_k, y_k) corresponder a um ponto discrepante, o resíduo \hat{e}_k será grande, mas o peso atribuído a ele será pequeno.
- vi) Repita o procedimento duas ou mais vezes, observando que a presença de pontos discrepantes exige um maior número de iterações.

Gráficos das funções tricúbica $[h(u)]$ e biquadrática $[g(u)]$ estão exibidos na Figura 5.12.

Para mais detalhes sobre o método lowess bem como sobre outros métodos de suavização o leitor poderá consultar Morettin e Tolói (2018), por exemplo.

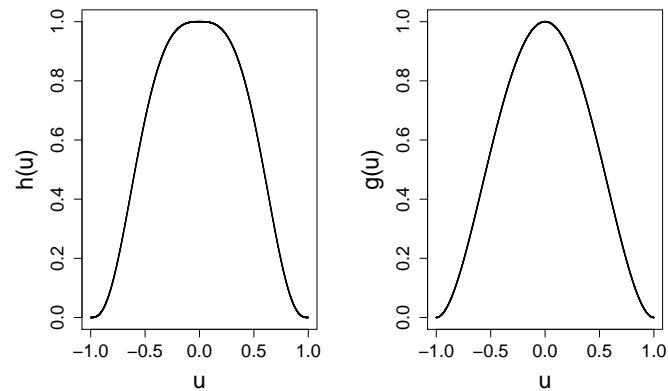


Figura 5.12: Gráficos das funções tricúbica $[h(u)]$ e biquadrática $[g(u)]$.

No gráfico disposto na Figura 5.13, apresentamos curvas lowess (com dois níveis de suavização) ajustadas aos pontos de um conjunto de dados obtidos de um estudo cujo objetivo era propor um modelo para avaliar a evolução de uma variável (Rotarod) ao longo do tempo. O gráfico sugere um modelo de **regressão segmentada**, *i.e.* em que a resposta média assume um valor constante até um ponto de mudança, a partir do qual a uma curva quadrática pode representar a sua variação temporal.

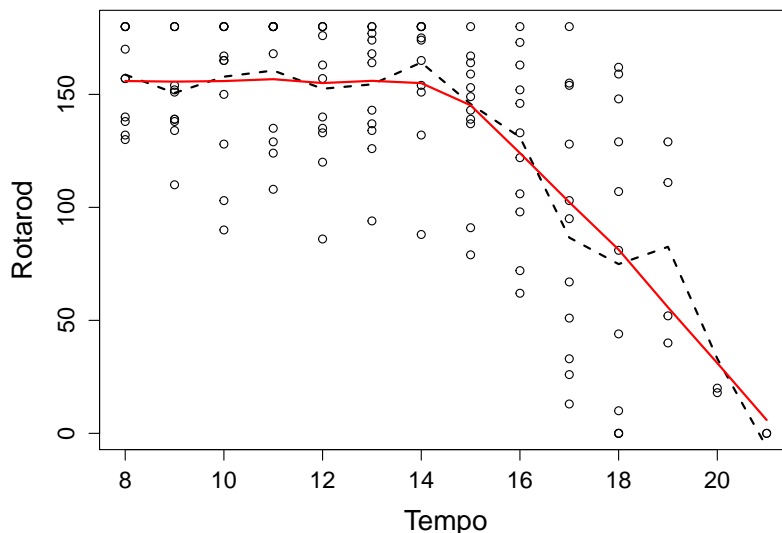


Figura 5.13: Curvas lowess com diferentes parâmetros de suavização ajustadas a um conjunto de dados.

5.6 Exercícios

- 1) Um laboratório de pesquisa desenvolveu uma nova droga para febre tifóide com a mistura de duas substâncias químicas (A e B). Foi realizado um ensaio clínico com o objetivo de estabelecer as dosagens adequadas (baixa ou média, para a substância A, e baixa, média ou alta, para a substância B) na fabricação da droga. Vinte e quatro voluntários foram aleatoriamente distribuídos em 6 grupos de 4 indivíduos e cada grupo foi submetido a um dos 6 tratamentos. A resposta observada foi o tempo para o desaparecimento dos sintomas (em dias). Os resultados obtidos estão dispostos na Tabela 5.4

Tabela 5.4: Tempo para o desaparecimento dos sintomas (dias)

| Dose da substância A | Dose da substância B | | |
|----------------------|----------------------|-------|------|
| | baixa | média | alta |
| baixa | 10,4 | 8,9 | 4,8 |
| baixa | 12,8 | 9,1 | 4,5 |
| baixa | 14,6 | 8,5 | 4,4 |
| baixa | 10,5 | 9,0 | 4,6 |
| média | 5,8 | 8,9 | 9,1 |
| média | 5,2 | 9,1 | 9,3 |
| média | 5,5 | 8,7 | 8,7 |
| média | 5,3 | 9,0 | 9,4 |

- a) Faça uma análise descritiva dos dados com o objetivo de avaliar qual a combinação de dosagens das substâncias faz com que os sintomas desapareçam em menos tempo.
- b) Especifique o modelo para a comparação dos 6 tratamentos quanto ao tempo para o desaparecimento dos sintomas. Identifique os fatores e seus níveis.
- c) Construa o gráfico dos perfis médios e interprete-o. Com base nesse gráfico, você acha que existe interação entre os fatores? Justifique sua resposta.
- 2) Um experimento foi realizado em dois laboratórios de modo independente com o objetivo de verificar o efeito de três tratamentos (A1, A2 e A3) na concentração de uma substância no sangue de animais (dados hipotéticos). As concentrações observadas nos dois laboratórios são apresentadas na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Concentração de uma substância no sangue de animais

| Laboratório 1 | | | Laboratório 2 | | | | |
|---------------|----|----|---------------|-------|----|----|----|
| A1 | A2 | A3 | A1 | A2 | A3 | | |
| 8 | 4 | 3 | 4 | 6 | 5 | | |
| 3 | 8 | 2 | 5 | 7 | 4 | | |
| 1 | 10 | 8 | 3 | 7 | 6 | | |
| 4 | 6 | 7 | 5 | 8 | 5 | | |
| Total | 16 | 28 | 20 | Total | 16 | 28 | 20 |

- a) O que você pode comentar sobre as médias dos três tratamentos nos dois laboratórios?
- b) Sem nenhum cálculo, apenas olhando os dados, em qual dos dois laboratórios será observado o maior valor da estatística F na análise de variância?
- 3) Um estudo foi realizado com o objetivo de avaliar a influência da exposição ao material particulado fino (MP_{2,5}) na capacidade vital forçada (% do predito) em indivíduos que trabalham em ambiente externo. Deseja-se verificar se o efeito da exposição depende da ocorrência de hipertensão ou diabetes. Os 101 trabalhadores na amostra foram classificados quanto à exposição e presença de diabetes ou hipertensão. As médias da capacidade vital forçada em cada combinação das categorias de diabetes ou hipertensão e exposição estão representadas na Figura 5.14.

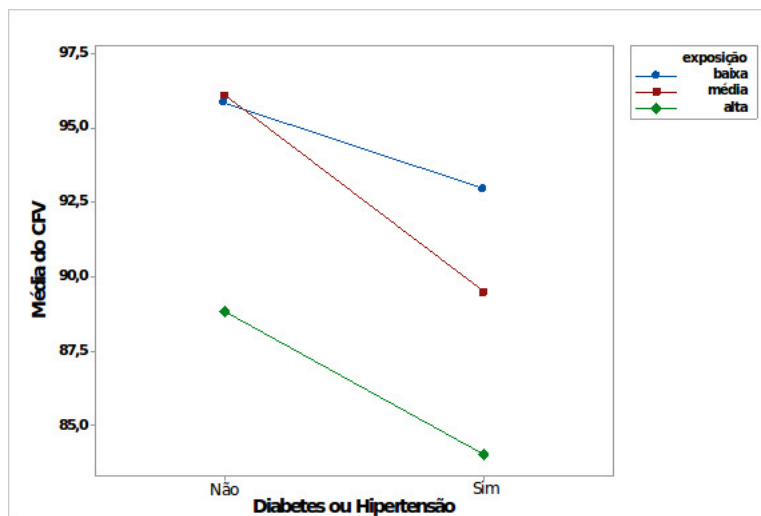


Figura 5.14: Capacidade vital forçada (% do predito).

- a) Comente os resultados obtidos.
- b) As médias amostrais sugerem a existência de efeito de interação entre exposição e diabetes ou hipertensão?

- 4) Considere os dados do CD-esforço, disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/esforco.xls>.
- Para cada etiologia, construa gráficos de dispersão simbólicos para representar a relação entre carga na esteira e VO₂ nos quatro momentos de avaliação, indicando os coeficientes de correlação de Pearson e de Spearman correspondentes.
 - Construa gráficos de perfis médios da frequência cardíaca para as diferentes combinações dos níveis de etiologia e gravidade da doença avaliada pelo critério NYHA. Avalie descritivamente as evidências de efeitos dos fatores Etiologia e Gravidade da doença e de sua interação.
- 5) Considere os dados do CD-arvores, disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/arvores.xls>. Obtenha os vetores de médias e matrizes de covariâncias e correlações entre as concentrações dos elementos Mn, Fe, Cu, Zn, Sr, Ba, Mg, Al, P, S, Cl e Ca para cada combinação dos níveis de espécie e tipo de via.
- 6) Um novo tipo de bateria está sendo desenvolvido. Sabe-se que o tipo de material da placa e a temperatura podem afetar o tempo de vida da bateria. Há três materiais possíveis a testar em três temperaturas escolhidas de forma a serem consistentes com o ambiente de uso do produto: -9 °C, 21 °C e 50 °C. Quatro baterias foram testadas em cada combinação de material e temperatura em ordem aleatória. As médias observadas do tempo de vida (h) e intervalos de confiança de 95% para as médias populacionais em cada combinação de temperatura e material estão representados no gráfico da Figura 5.15 .

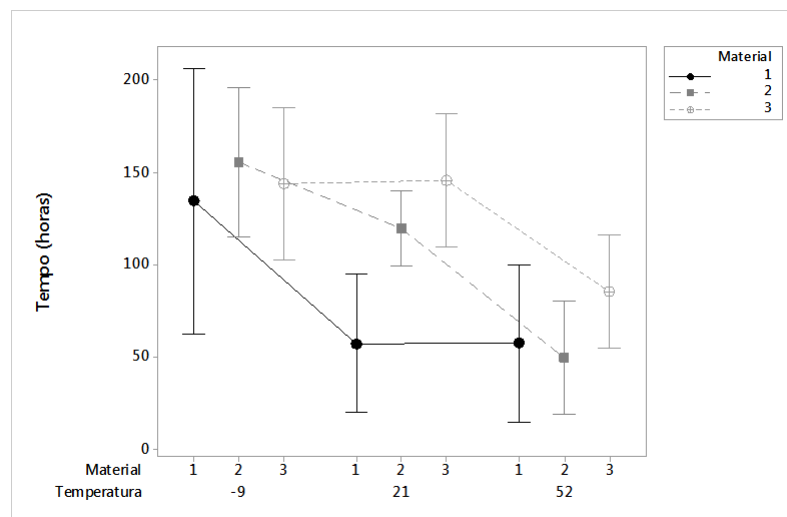


Figura 5.15: Gráfico das médias observadas do tempo de vida (h) e intervalos de confiança de 95% para as médias populacionais em cada combinação de temperatura e material.

Este gráfico sugere que:

- a) a escolha do material com o qual é obtida a maior média do tempo de vida independe da temperatura;
 - b) as menores médias de tempo de vida foram observadas quando foi utilizado o material 1;
 - c) a temperatura em que foram observadas as maiores médias do tempo de vida é a de 21 °C;
 - d) há interação entre Temperatura e Tempo de vida;
 - e) nenhuma das alternativas acima é correta.
- 7) O gráfico apresentado na Figura 5.16 considera a associação entre as variáveis pressão sistólica e idade de imigrantes com menos de dez anos (Migra1) e com mais de dez anos (Migra2) desde a migração.

A dispersão dos pontos indica que:

- a) existem muitos pontos aberrantes.
- b) existe correlação linear positiva entre as variáveis para o grupo Migra2.
- c) independentemente do tempo desde a migração as variáveis são altamente correlacionadas.
- d) existe correlação linear positiva entre as variáveis para o grupo Migra1.

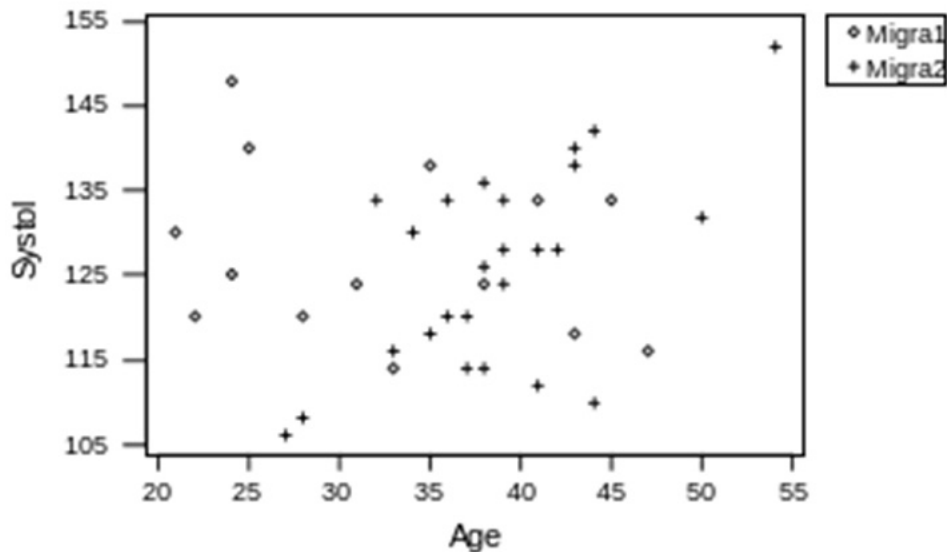


Figura 5.16: Gráfico de Pressão sistólica *versus* Idade para imigrantes.

Análise de Regressão

6.1 Introdução

Neste capítulo estaremos interessados em avaliar, de modo exploratório, um dos modelos mais utilizados na prática. O exemplo mais simples serve para a análise de dados pareados $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ de duas variáveis contínuas X e Y num contexto em que sabemos a priori que a distribuição de frequências de Y depende de X , ou seja, na linguagem introduzida no Capítulo 4, em que X é a variável explicativa e Y é a variável resposta.

Exemplo 6.1: Para efeito de ilustração considere os dados apresentados na Tabela 6.1, oriundos de um estudo cujo objetivo é avaliar como a distância com que indivíduos conseguem distinguir um determinado objeto (dora-vante indicada simplesmente como distância) varia com a idade. Aqui, a

Tabela 6.1: Distância em que se consegue distinguir certo objeto

| Ident | Idade (anos) | Distância (m) | Ident | Idade (anos) | Distância (m) |
|-------|-----------------|------------------|-------|-----------------|------------------|
| 1 | 18 | 170 | 16 | 55 | 140 |
| 2 | 20 | 197 | 17 | 63 | 117 |
| 3 | 22 | 187 | 18 | 65 | 140 |
| 4 | 23 | 170 | 19 | 66 | 100 |
| 5 | 23 | 153 | 20 | 67 | 137 |
| 6 | 25 | 163 | 21 | 68 | 100 |
| 7 | 27 | 187 | 22 | 70 | 130 |
| 8 | 28 | 170 | 23 | 71 | 107 |
| 9 | 29 | 153 | 24 | 72 | 123 |
| 10 | 32 | 137 | 25 | 73 | 93 |
| 11 | 37 | 140 | 26 | 74 | 140 |
| 12 | 41 | 153 | 27 | 75 | 153 |
| 13 | 46 | 150 | 28 | 77 | 120 |
| 14 | 49 | 127 | 29 | 79 | 103 |
| 15 | 53 | 153 | 30 | 82 | 120 |

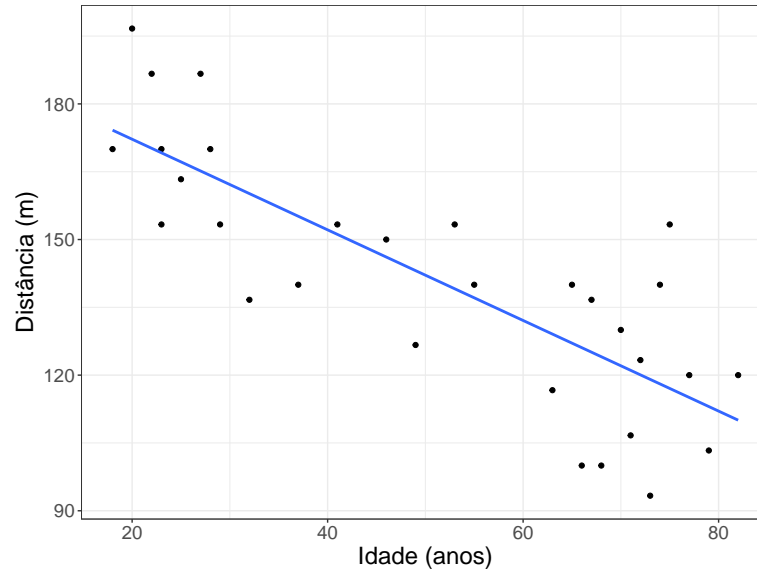


Figura 6.1: Gráfico de dispersão para os dados da Tabela 6.1.

variável resposta é a distância e a variável explicativa é a idade. O gráfico de dispersão correspondente está apresentado na Figura 6.1 e mostra uma tendência decrescente da distância com a idade. O objetivo da análise de regressão é quantificar essa tendência. Como a resposta para indivíduos com a mesma idade (ou com idade bem próximas) varia, o foco da análise é a estimação de uma tendência média (representada pela reta sobreposta aos dados na Figura 6.1).

No caso geral em que temos n pares de dados, o modelo de regressão utilizado para essa quantificação é

$$y_i = \alpha + \beta x_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (6.1)$$

em que α e β são coeficientes (usualmente chamados de **parâmetros**) desconhecidos (e que se pretende estimar com base nos dados) e e_i são erros (aleatórios) que representam desvios entre as observações y_i e a reta $\alpha + \beta x$ que corresponde à tendência esperada.¹ Em geral, supõe-se que a média (ou valor esperado) dos erros é nula, o que significa, *grosso modo*, que existe uma compensação entre erros positivos e negativos e que, conseqüentemente, o objetivo da análise é modelar a resposta média. Nesse contexto, podemos interpretar o parâmetro α como a distância esperada com que um recém-nascido, *i.e.*, um indivíduo com idade $x = 0$, consegue distinguir o determinado objeto e o parâmetro β como a diminuição esperada nessa distância para cada aumento de um ano na idade. Como a interpretação de α não faz

¹Uma notação mais elucidativa para (6.1) é $y_i|x_i = \alpha + \beta x_i + e_i$, cuja leitura como “valor observado y_i da variável resposta Y para um dado valor da variável x_i da variável explicativa X ” deixa claro que o interesse da análise está centrado na distribuição de Y e não naquela de X .

muito sentido nesse caso, um modelo mais adequado é

$$y_i = \alpha + \beta(x_i - 18) + e_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.2)$$

Para esse modelo, parâmetro α corresponde à distância esperada com que um indivíduo com idade $x = 18$ anos consegue distinguir o determinado objeto e o parâmetro β tem a mesma interpretação apresentada para o modelo (6.1).

O modelo (6.1) é chamado de **regressão linear simples** e o adjetivo **linear** refere-se ao fato que os parâmetros α e β são incluídos de forma linear. Nesse sentido, o modelo

$$y_i = \alpha + \exp(\beta x_i) + e_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (6.3)$$

seria um **modelo não linear**. Por outro lado, o modelo

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \gamma x_i^2 + e_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (6.4)$$

é também um modelo linear, pois embora a variável explicativa x esteja elevada ao quadrado, os parâmetros α , β e γ aparecem de forma linear. Modelos como esse, que envolvem uma funções polinomiais da variável explicativa, são conhecidos como **modelos de regressão polinomial** e serão analisados na Seção 6.3.

Nosso principal objetivo não é discutir em detalhes o problema da estimação dos parâmetros desses modelos, mas considerar métodos gráficos que permitam avaliar se eles são ou não adequados para descrever conjuntos de dados com a estrutura descrita. Infelizmente não poderemos prescindir de apresentar alguns detalhes técnicos. Um tratamento mais aprofundado sobre o ajuste de modelos lineares e não lineares pode ser encontrado em inúmeros textos, dentre o quais destacamos Kutner et al. (2004) para uma primeira abordagem.

Vários pacotes computacionais dispõem de códigos que permitem ajustar esses modelos. Em particular, mencionamos a função `lm()` do R. De qualquer maneira, na Seção 6.2, discutiremos com algum pormenor o ajuste de modelos da forma (6.1) e depois indicaremos como o caso geral de uma regressão linear múltipla (com mais de duas variáveis) pode ser abordado.

6.2 Regressão Linear Simples

Consideramos o modelo (6.1), supondo que os erros e_i sejam não correlacionados e tenham média 0 e variância σ^2 . A soma dos quadrados dos erros é

$$Q(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2. \quad (6.5)$$

Os estimadores de mínimos quadrados são obtidos minimizando-se (6.5) com relação a α e β . Com essa finalidade, derivamos $Q(\alpha, \beta)$ em relação a esses parâmetros e obtemos as equações de estimação igualando as expressões

resultantes a zero. A solução dessas equações são os estimadores de mínimos quadrados,

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (6.6)$$

e

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta}\bar{x} \quad (6.7)$$

em que $\bar{x} = n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i$ e $\bar{y} = n^{-1} \sum_{i=1}^n y_i$ e um estimador de σ^2 é

$$S^2 = \frac{1}{n-2} Q(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n \hat{e}_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}x_i)^2, \quad (6.8)$$

em que onde $Q(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ é a **soma dos quadrados dos resíduos**, abreviadamente, *SQRes*. Note que no denominador de (6.8) temos $n-2$, pois perdemos dois graus de liberdade em função da estimação de dois parâmetros (α e β). Alguns resultados referentes à inferência baseada nesse tipo de modelos são apresentados na Nota de Capítulo 1.

Os valores ajustados, $\hat{y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i$, são utilizados para obtenção dos resíduos

$$\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Num contexto inferencial, ou seja em que os dados correspondem a uma amostra de uma população (geralmente conceitual), os valores dos parâmetros α , β e σ^2 não podem ser conhecidos, a menos que toda a população seja avaliada. O que se pode fazer é estimar esses parâmetros, ou seja, calcular $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ e $\hat{\sigma}^2$. Como consequência, os erros e_i não são conhecidos, mas os resíduos \hat{e}_i podem ser calculados e correspondem a estimativas desses erros.

A proposta de um modelo de regressão linear simples pode ser baseada em argumentos teóricos, como no caso em que dados são coletados para a avaliação do espaço percorrido num movimento uniforme ($s = s_0 + vt$) ou num gráfico de dispersão entre a variável resposta e a variável explicativa como aquele da Figura 6.1 em que parece razoável representar a variação esperada da distância com a idade por meio de uma reta.

Uma vez ajustado o modelo, convém avaliar a qualidade do ajuste e um dos indicadores mais utilizados para essa finalidade é o **coeficiente de determinação** definido como

$$R^2 = \frac{SQTot - SQRes}{SQTot} = \frac{SQReg}{SQTot} = 1 - \frac{SQRes}{SQTot}$$

em que a soma de quadrados total é $SQTot = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$, a soma de quadrados do erro é $SQRes = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ e a soma de quadrados da regressão é $SQReg = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$. Para mais detalhes, ver a Nota de Capítulo 3. Em essência, esse coeficiente mede a porcentagem da variação total dos dados (em relação à sua média) explicada pelo modelo de regressão. O coeficiente de determinação deve ser acompanhado de outras ferramentas para a avaliação do ajuste, pois não está direcionado para identificar se todas as suposições do modelo são compatíveis com os dados sob investigação. Em

particular, mencionamos os gráficos de resíduos, gráficos de Cook e gráficos de influência local. Trataremos dos dois primeiros na sequência e remetemos os últimos para as Notas de Capítulo 4 e 5.

Uma das ferramentas mais úteis para a avaliação da qualidade do ajuste de modelos de regressão é o **gráfico de resíduos** em que os resíduos são dispostos no eixo das ordenadas e os correspondentes valores da variável explicativa, no eixo das abscissas.

Resultados do ajuste do modelo de regressão linear simples $distancia_i = \alpha + \beta(idade_i - 18) + e_i$, $i = 1, \dots, n$ aos dados da Tabela 6.1 por meio da função `lm()` do pacote MASS estão apresentados abaixo. Note que a variável preditora é especificada como `id= idade - 18`.

Call:

```
lm(formula = distancia ~ id, data = distancia)
```

Residuals:

| Min | 1Q | Median | 3Q | Max |
|---------|---------|--------|--------|--------|
| -26.041 | -13.529 | 2.388 | 11.478 | 35.994 |

Coefficients:

| | Estimate | Std. Error | t value | Pr(> t) |
|-------------|----------|------------|---------|--------------|
| (Intercept) | 174.2296 | 5.5686 | 31.288 | < 2e-16 *** |
| id | -1.0039 | 0.1416 | -7.092 | 1.03e-07 *** |

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 16.6 on 28 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.6424, Adjusted R-squared: 0.6296

F-statistic: 50.29 on 1 and 28 DF, p-value: 1.026e-07

As estimativas dos parâmetros α (distância esperada para indivíduos com 18 anos) e β (diminuição esperada da distância para cada ano adicional na idade) com erros padrões entre parênteses são, respectivamente, $\hat{\alpha} = 174,2$ (5,6) e $\hat{\beta} = -1,004$ (0,14).

A estimativa do desvio padrão dos erros (σ) é $S = 16,6$, com 30-2=28 graus de liberdade e o coeficiente de determinação é $R^2 = 0,63$. Se usássemos o modelo (6.1), a estimativa de α seria 192,3(7,8) e a de β seria a mesma.

O gráfico de resíduos correspondente ao modelo ajustado aos dados da Tabela 6.1 está apresentado na Figura 6.2.

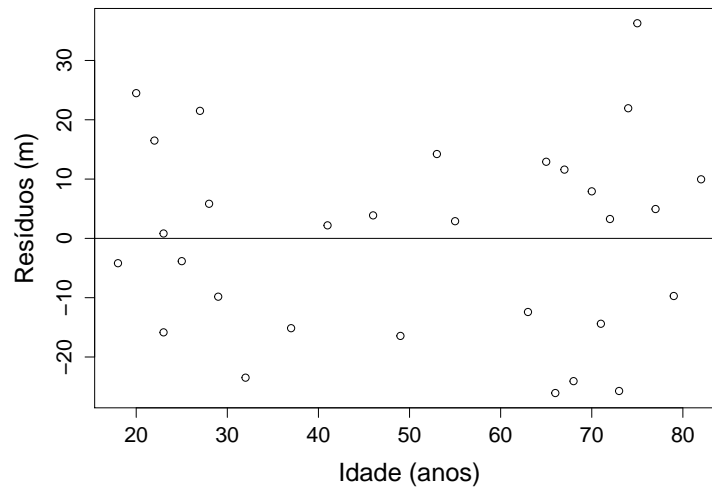


Figura 6.2: Gráfico de resíduos para o ajuste do modelo de regressão linear simples aos dados da Tabela 6.1.

Para facilitar a visualização em relação à dispersão dos resíduos e para efeito de comparação entre ajustes de modelos em que as variáveis resposta têm unidades de medida diferentes, convém padronizá-los, *i.e.*, dividi-los pelo respectivo desvio padrão para que tenham variância igual a 1. Como os resíduos (ao contrário dos erros) são correlacionados, pode-se mostrar que

$$DP(\hat{e}_i) = \sigma\sqrt{1 - h_{ii}} \quad \text{com} \quad h_{ii} = \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2},$$

de forma que os **resíduos padronizados**, também chamados de **resíduos studentizados** são definidos por

$$\hat{e}_i^* = \hat{e}_i / (S\sqrt{1 - h_{ii}}) \quad (6.9)$$

Os resíduos padronizados são adimensionais e têm variância igual a 1, independentemente da variância da variável resposta. Além disso, para erros com distribuição Normal, cerca de 99% dos resíduos padronizados têm valor entre -3 e +3.

O gráfico de resíduos padronizados correspondente àquele da Figura 6.2 está apresentado na Figura 6.3.

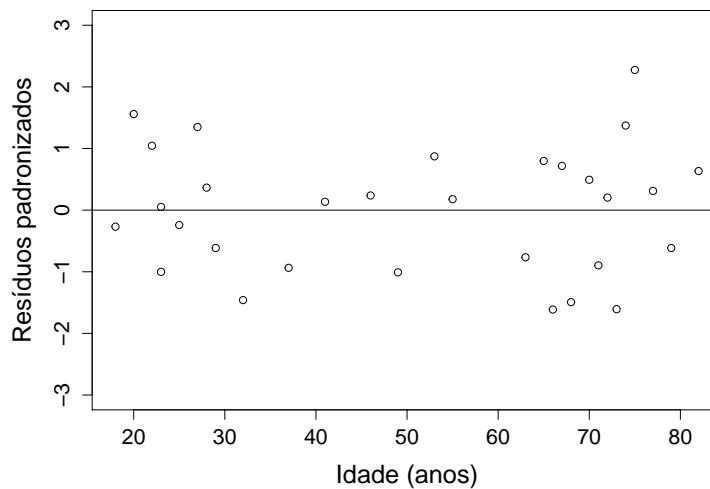


Figura 6.3: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear simples aos dados da Tabela 6.1.

Na Figura 6.3, nota-se que resíduos positivos e negativos estão distribuídos sem algum padrão sistemático e que sua variabilidade é razoavelmente uniforme ao longo dos diferentes valores da variável explicativa, sugerindo que o modelo é (pelo menos, aproximadamente) adequado.

Exemplo 6.2: Os gráficos de dispersão e de resíduos padronizados correspondentes ao ajuste do modelo $CO_i = \alpha + \beta \text{tempo}_i + e_i$, $i = 1, \dots, n$ em que CO representa a concentração atmosférica de monóxido de carbono no dia i contado a partir de 1 de janeiro de 1991 (CD-poluição) estão apresentados nas Figuras 6.4 e 6.5. Ambos sugerem uma deficiência no ajuste: no primeiro, observa-se uma curvatura não compatível com o ajuste de uma reta; no segundo, nota-se um padrão na distribuição dos resíduos, que são positivos nos primeiros dias, negativos em seguida e espalhados ao final das observações diárias. Além disso, a dispersão dos resíduos varia com o tempo.

A saída da aplicação da função `lm()` está abaixo. Na fórmula, t indica o dia, $t = 1, \dots, 120$.

Call:

```
lm(formula = co ~ t, data = poluicao)
```

Residuals:

| Min | 1Q | Median | 3Q | Max |
|---------|---------|---------|--------|--------|
| -3.7655 | -0.9157 | -0.1788 | 0.6613 | 4.5104 |

Coefficients:

| | Estimate | Std. Error | t value | Pr(> t) |
|-------------|----------|------------|---------|--------------|
| (Intercept) | 6.264608 | 0.254847 | 24.582 | < 2e-16 *** |
| t | 0.019827 | 0.003656 | 5.424 | 3.15e-07 *** |

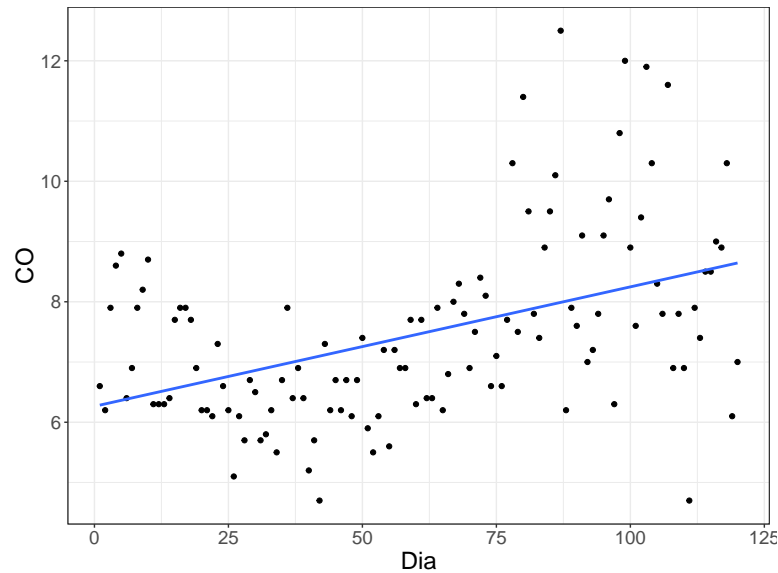


Figura 6.4: Gráfico de dispersão para os dados de monóxido de carbono (CD-poluicao).

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.387 on 118 degrees of freedom
 Multiple R-squared: 0.1996, Adjusted R-squared: 0.1928
 F-statistic: 29.42 on 1 and 118 DF, p-value: 3.148e-07

Vemos que o coeficiente de determinação é apenas 0,19. Um modelo (linear) de regressão polinomial alternativo em que termos quadrático e cúbico são incluídos, *i.e.*, $CO_i = \alpha + \beta tempo_i + \gamma tempo_i^2 + \delta tempo_i^3 + e_i$, $i = 1, \dots, n$ tem um melhor ajuste, como se pode notar tanto pelo acréscimo no coeficiente de determinação para 0,35 para o modelo alternativo quanto pelo gráfico de resíduos padronizados disposto na Figura 6.6.

Ainda assim, esse modelo não é o mais adequado em virtude da presença de **heterocedasticidade**, ou seja, de variâncias que não são constantes ao longo do tempo. Há modelos que incorporam heterogeneidade de variâncias, mas estão fora do objetivo deste texto. Para detalhes, pode-se consultar Kutner et al. (2004), por exemplo.

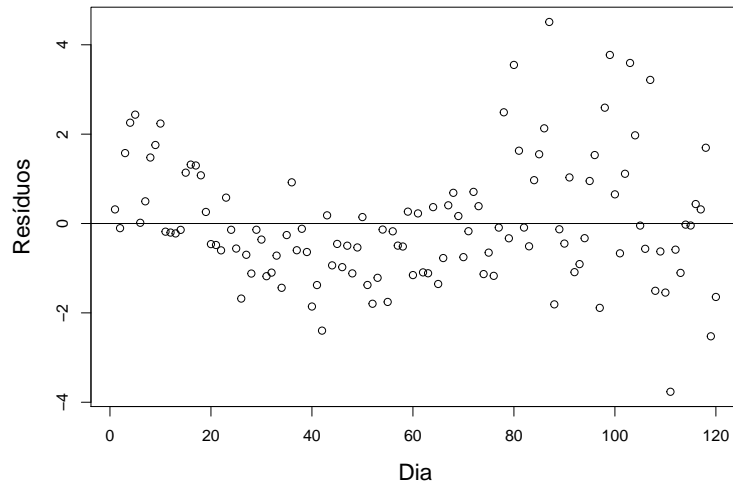


Figura 6.5: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear simples aos dados da concentração de CO (CD-poluicao).

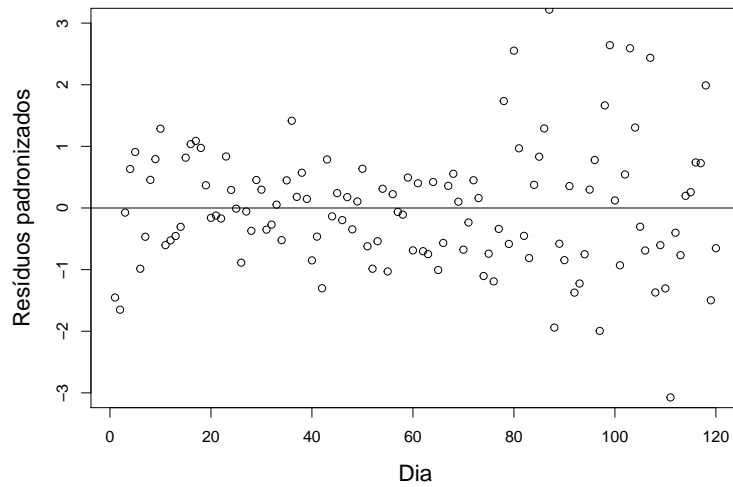


Figura 6.6: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear polinomial aos dados da concentração de CO (CD-poluicao).

Exemplo 6.3: Os dados da Tabela 6.2 são provenientes da mensuração da velocidade do vento no aeroporto de Philadelphia (EUA), sempre à uma hora da manhã, para os primeiros 15 dias de dezembro de 1974 (Graedel e Kleiner, 1985).

Tabela 6.2: Velocidade do vento no aeroporto de Philadelphia (v_t), com os resíduos obtidos do ajuste de modelos resistentes

| t | v_t | $\hat{r}_t^{(0)}$ | $\hat{r}_t^{(1)}$ |
|-----|-------|-------------------|-------------------|
| 1 | 22,2 | 1,56 | -1,11 |
| 2 | 61,1 | 41,38 | 38,90 |
| 3 | 13,0 | -5,80 | -8,10 |
| 4 | 27,8 | 9,92 | 7,81 |
| 5 | 22,2 | 5,24 | 3,31 |
| 6 | 7,4 | -8,64 | -10,39 |
| 7 | 7,4 | -7,72 | -9,28 |
| 8 | 7,4 | -6,80 | -8,18 |
| 9 | 20,4 | 7,12 | 5,93 |
| 10 | 20,4 | 8,04 | 7,03 |
| 11 | 20,4 | 8,96 | 8,13 |
| 12 | 11,1 | 0,58 | -0,06 |
| 13 | 13,0 | 3,40 | 2,94 |
| 14 | 7,4 | -1,28 | -1,55 |
| 15 | 14,8 | 7,04 | 6,95 |

O diagrama de dispersão dos dados no qual está indicada a reta obtida pelo ajuste de um modelo linear simples, nomeadamente,

$$\hat{v}_t = 30,034 - 1,454t, \quad t = 1, \dots, 15$$

e o correspondente gráfico de resíduos padronizados estão apresentados nas Figuras 6.7 e 6.8. Nesses gráficos pode-se notar que tanto a observação associada ao segundo dia ($t = 2$, com $v_t = 61,1$) quanto o resíduo correspondente destoam dos demais, gerando estimativas dos coeficientes da reta diferentes daqueles que se espera. Essa é uma observação discrepante (*outlier*). Na Nota de Capítulo 8, apresentamos um modelo alternativo com a finalidade de obter estimativas “resistentes” (também chamadas de “robustas”) a pontos desse tipo.

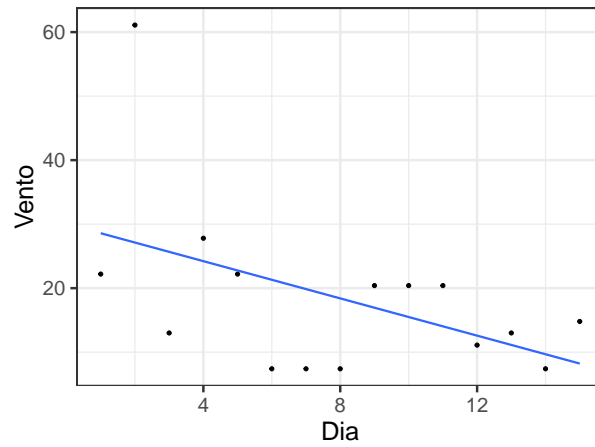


Figura 6.7: Gráfico de dispersão para os dados da Tabela 6.2 com reta de mínimos quadrados sobreposta.

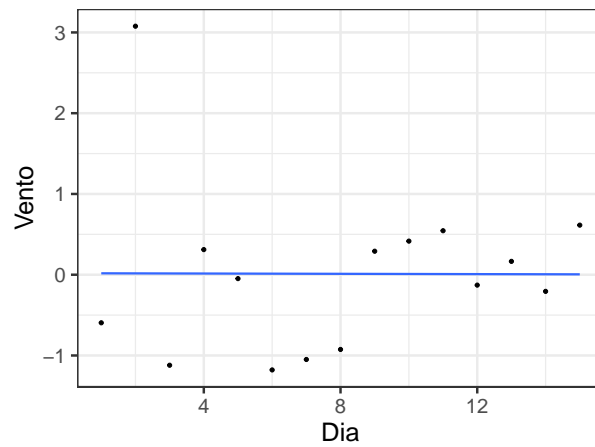


Figura 6.8: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.2.

Exemplo 6.4: Consideremos agora os dados (hipotéticos) dispostos na Tabela 6.3 aos quais ajustamos um modelo de regressão linear simples.

O gráfico de dispersão (com os dados representados por círculos e com a reta de regressão representada pela linha sólida) e o correspondente gráfico de resíduos padronizados estão apresentados nas Figuras 6.9 e 6.10.

Tabela 6.3: Dados hipotéticos

| | | | | | | | | | | | | |
|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|------|------|------|
| X | 10 | 8 | 13 | 9 | 11 | 14 | 6 | 4 | 12 | 7 | 5 | 18 |
| Y | 8,04 | 6,95 | 7,58 | 8,81 | 8,33 | 9,96 | 7,24 | 4,26 | 10,84 | 4,82 | 5,68 | 6,31 |

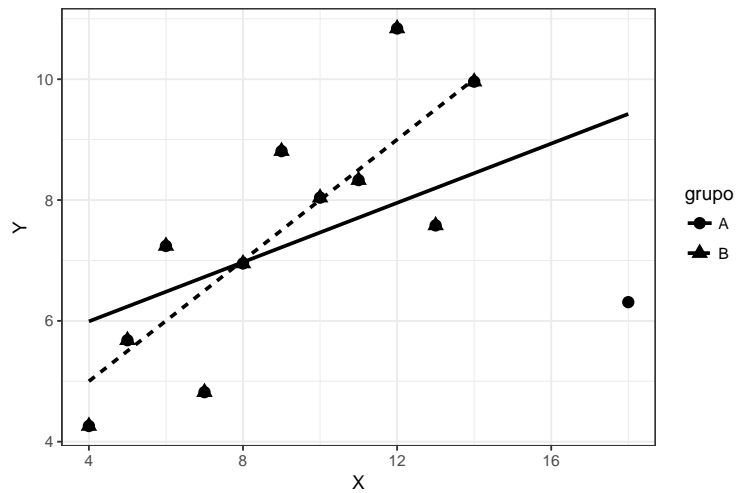


Figura 6.9: Gráfico de dispersão (com retas de regressão sobrepostas) para os dados da Tabela 6.3; curva sólida para dados completos e curva interrompida para dados com ponto influente eliminado.

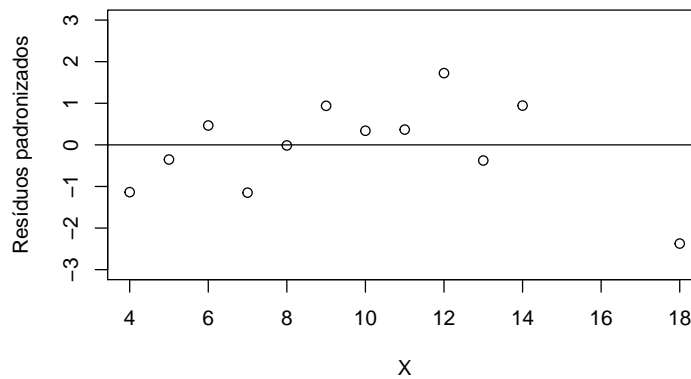


Figura 6.10: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.3.

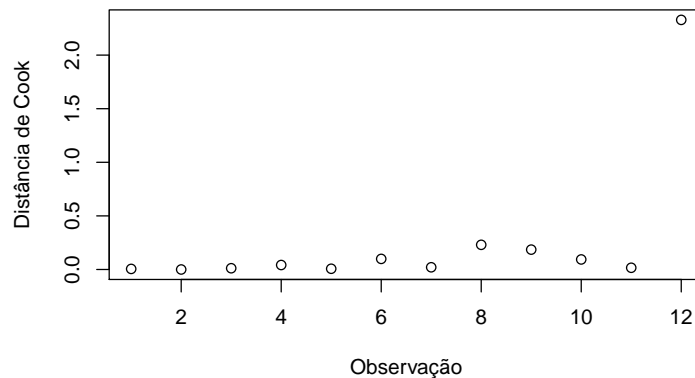


Figura 6.11: Gráfico de Cook correspondente ao ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.3.

Os dois gráficos contêm indicações de que o ponto associado aos valores ($X = 18, Y = 6.31$) pode ser um ponto discrepante. Isso fica mais evidente quando consideramos outra ferramenta diagnóstica conhecida como **gráfico de Cook** apresentado na Figura 6.11. Esse gráfico é baseado na chamada **distância de Cook** (ver Nota de Capítulo 4) que serve para indicar as observações que têm grande influência em alguma característica do ajuste do modelo. Em particular, salienta os pontos (chamados de **pontos influentes** ou **pontos alavanca** (*high leverage points*) que podem alterar de forma relevante as estimativas dos parâmetros. Em geral, como no caso estudado aqui, esses pontos apresentam valores das respectivas abscissas afastadas daquelas dos demais pontos do conjunto de dados. Neste exemplo, a eliminação do ponto mencionado altera as estimativas do intercepto [de 5,01 (1,37) para 3,00 (1,12)] e da inclinação [de 0,25 (0,13) para 0,50 (0,12)] da reta ajustada. A reta correspondente ao ajuste quando o ponto ($X = 18, Y = 6.31$) é eliminado do conjunto de dados está representada na Figura 6.9 pela curva interrompida.

Nos casos em que se supõe que os erros têm distribuição Normal, pode-se utilizar gráficos QQ com o objetivo de avaliar se os dados são compatíveis com essa suposição.

É importante lembrar que esses gráficos QQ devem ser construídos com os quantis amostrais baseados nos resíduos e não com as observações da variável resposta, pois apesar de suas distribuições também serem normais, suas médias variam com os valores associados da variável explicativa, ou seja, a média da variável resposta correspondente a y_i é $\alpha + \beta x_i$. Convém observar que sob normalidade dos erros, os resíduos padronizados seguem uma distribuição t com $n - 2$ graus de liberdade e é dessa distribuição que se devem obter os quantis teóricos para a construção do gráfico QQ. Também deve-se lembrar que para valores de n maiores que 20 ou 30, os quantis da distribuição t se aproximam daqueles da distribuição Normal, tornando-as

intercambiáveis para a construção do correspondente gráfico QQ.

Gráficos QQ (com bandas de confiança) correspondentes aos ajustes de modelos de regressão linear simples aos dados das Tabelas 6.1 e 6.3 (com e sem a eliminação da observação influente) estão respectivamente apresentados nas Figuras 6.12, 6.13 e 6.14.

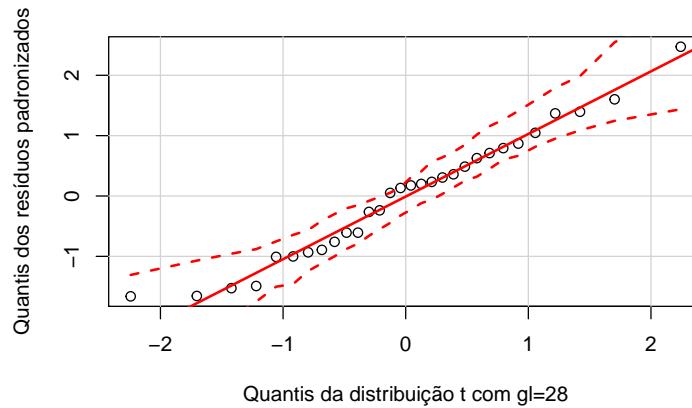


Figura 6.12: Gráfico QQ correspondente ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.1.

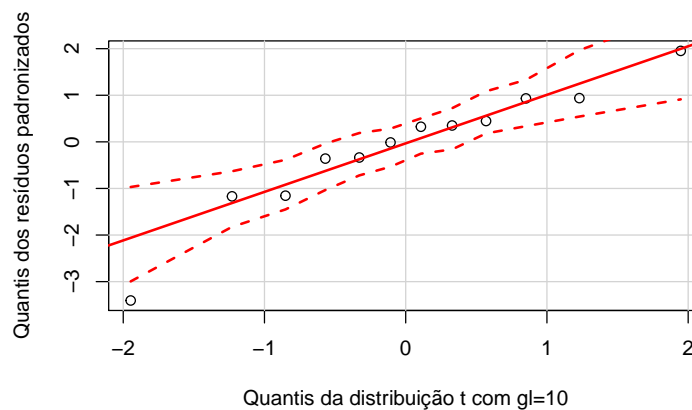


Figura 6.13: Gráfico QQ correspondente ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.3 (com todas as observações).

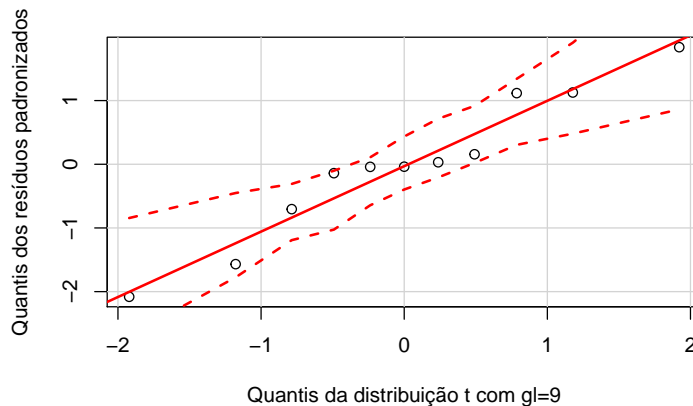


Figura 6.14: Gráfico QQ correspondente ao ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.3 (sem a observação influente).

Nos três casos, não há evidências fortes contra a suposição de normalidade dos erros (apesar do ponto fora da banda de confiança salientado na Figura 6.13). Em geral, especialmente com poucos dados, é difícil observar casos em que essa suposição não parece razoável. Convém lembrar que se o objetivo for avaliar a inclinação da reta de regressão, ou seja, avaliar a taxa com que a resposta esperada muda por unidade de variação da variável explicativa, essa suposição tem efeito marginal no estimador de mínimos quadrados desse parâmetro, que segue uma distribuição aproximadamente Normal quando o tamanho da amostra é suficientemente grande, por exemplo, 30 ou mais. Mais detalhes e uma referência estão apresentados na Nota de Capítulo 1.

Em geral, a suposição de que os erros do modelo linear são não correlacionados deve ser questionada com base no procedimento de coleta de dados. Como ilustração, consideramos dois exemplos nos quais essa característica justifica a dúvida. O primeiro exemplo é um caso simples dos problemas abordados pelas técnicas de análise de séries cronológicas; o segundo exemplo é o caso típico de análise de **dados longitudinais** e será apresentado na Seção 6.4. Ambos são apresentados aqui com a finalidade de mostrar como as técnicas de análise de regressão podem ser empregadas para analisar modelos mais gerais do que aqueles governados pelo paradigma de Gauss-Markov.

Exemplo 6.5: Na Tabela 6.4 apresentamos valores do peso de um bezerro observado a cada duas semanas após o nascimento com o objetivo de avaliar seu crescimento nesse período. O gráfico de dispersão correspondente está disposto na Figura 6.15.

Tabela 6.4: Peso (kg) de um bezerro nas primeiras 26 semanas após o nascimento

| Semana | Peso |
|--------|-------|
| 0 | 32.0 |
| 2 | 35.5 |
| 4 | 39.2 |
| 6 | 43.7 |
| 8 | 51.8 |
| 10 | 63.4 |
| 12 | 76.1 |
| 14 | 81.1 |
| 16 | 84.6 |
| 18 | 89.8 |
| 20 | 97.4 |
| 22 | 111.0 |
| 24 | 120.2 |
| 26 | 134.2 |

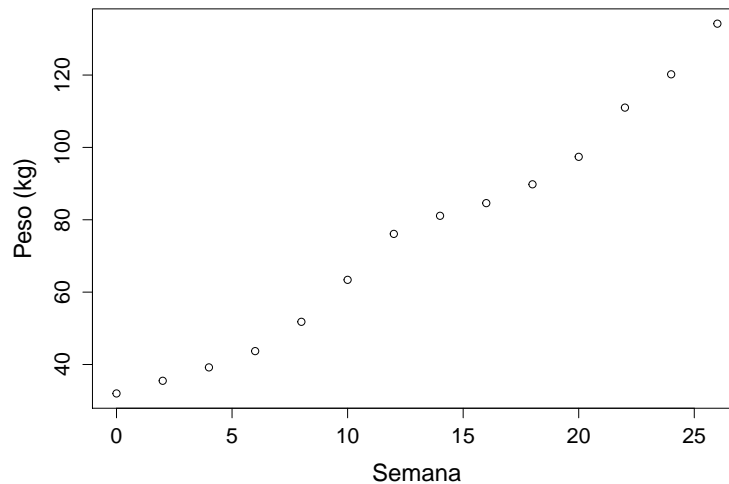


Figura 6.15: Gráfico de dispersão para os dados da Tabela 6.4

Tendo em vista o gráfico de dispersão apresentado na Figura 6.15, um possível modelo seria

$$y_t = \alpha + \beta t + \gamma t^2 + e_t, \quad (6.10)$$

em que y_t representa o peso do bezerro no instante t , α denota o valor esperado de seu peso ao nascer, β e γ representam os componentes linear e quadrático da curva que rege a variação temporal do peso no intervalo de tempo estudado e e_t denota um erro aleatório. Utilizamos t como índice para salientar que as observações são colhidas sequencialmente ao longo do tempo.

O coeficiente de determinação ajustado, $R_{aj}^2 = 0.987$ indica que o ajuste (por mínimos quadrados) do modelo com $\hat{\alpha} = 29.9$ (EP = 2.6), $\hat{\beta} = 2.7$ (EP = 2.5) e $\hat{\gamma} = 0.05$ (EP = 0.02) é excelente (sob essa ótica, obviamente). Por outro lado, o gráfico de resíduos apresentado na Figura ?? mostra seqüências de resíduos positivos seguidas de seqüências de resíduos negativos, sugerindo uma possível correlação positiva entre eles (autocorrelação).

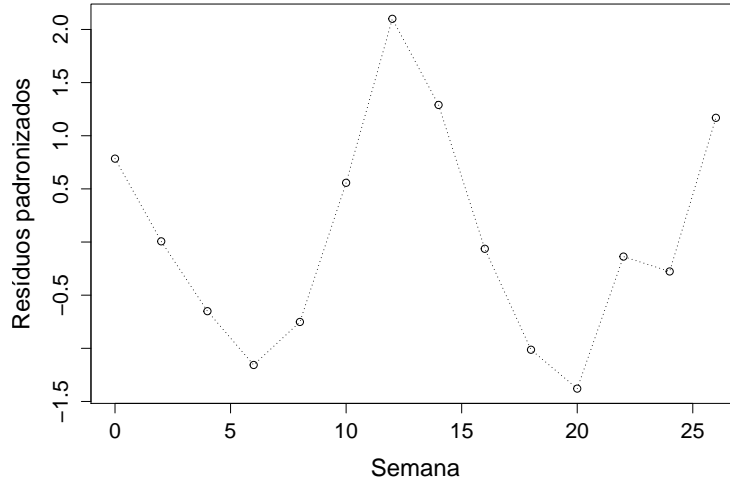


Figura 6.16: Resíduos studentizados obtidos do ajuste do modelo (6.10)

Uma maneira de contornar esse problema, é modificar os componentes aleatórios do modelo para incorporar essa possível autocorrelação nos erros. Nesse contexto, podemos considerar o modelo (6.10) com

$$e_t = \rho e_{t-1} + u_t, \quad t = 1, \dots, n \quad (6.11)$$

em que $u_t \sim N(0, \sigma^2)$, $t = 1, \dots, n$, independentes e e_0 é uma constante (geralmente igual a zero). Essas suposições implicam que $\text{Var}(e_t) = \sigma^2 / (1 - \rho^2)$ e que $\text{Cov}(e_t, e_{t-s}) = \rho^s [\sigma^2 / (1 - \rho^2)]$.

Para testar a hipótese de que os erros são não correlacionados pode-se utilizar a **estatística de Durbin-Watson**:

$$D = \frac{\sum_{t=2}^n (\hat{e}_t - \hat{e}_{t-1})^2}{\sum_{t=1}^n \hat{e}_t^2}, \quad (6.12)$$

em que \hat{e}_t , $t = 1, \dots, n$ são os resíduos obtidos do ajuste do modelo (6.10) por mínimos quadrados. Expandindo (6.12) obtemos

$$\begin{aligned} D &= \frac{\sum_{t=2}^n \hat{e}_t^2}{\sum_{t=1}^n \hat{e}_t^2} + \frac{\sum_{t=2}^n \hat{e}_{t-1}^2}{\sum_{t=1}^n \hat{e}_t^2} - 2 \frac{\sum_{t=2}^n \hat{e}_t \hat{e}_{t-1}}{\sum_{t=1}^n \hat{e}_t^2} \\ &\approx 2 - 2 \frac{\sum_{t=2}^n \hat{e}_t \hat{e}_{t-1}}{\sum_{t=1}^n \hat{e}_t^2}, \end{aligned} \quad (6.13)$$

Se os resíduos não forem correlacionados, então $\sum_{t=2}^n \hat{e}_t \hat{e}_{t-1} \approx 0$ e conseqüentemente, $D \approx 2$; se, por outro lado, os resíduos forem altamente correlacionados, esperamos que $\sum_{t=2}^n \hat{e}_t \hat{e}_{t-1} \approx \sum_{t=2}^n \hat{e}_t^2$ e então $D \approx 0$; finalmente, se os resíduos tiverem uma grande correlação negativa, esperamos que $\sum_{t=2}^n \hat{e}_t \hat{e}_{t-1} \approx -\sum_{t=2}^n \hat{e}_t^2$ e nesse caso, $D \approx 4$. Durbin and Watson (1950), Durbin and Watson (1951) e Durbin and Watson (1971) produziram tabelas da distribuição da estatística D que podem ser utilizados para avaliar a suposição de que os erros são não correlacionados.

O valor da estatística de Durbin-Watson para os dados do Exemplo 6.5 sob o modelo (6.10) é $D = 0.91$ ($p < 0.0001$), sugerindo um alto grau de autocorrelação dos resíduos. Uma estimativa do coeficiente de autocorrelação ρ é 0.50. Nesse caso, o modelo (6.10) - (6.11) poderá ser ajustado pelo método de mínimos quadrados generalizados ou por métodos de Séries Temporais.

Exemplo 6.6: Os dados dispostos na Tabela 6.5 são extraídos de um estudo conduzido na Faculdade de Odontologia da Universidade de São Paulo e correspondem a medidas de um índice de placa bacteriana obtidos de 26 crianças em idade pré-escolar, antes e depois do uso de uma escova de dentes experimental (Hugger) e de uma escova convencional. O objetivo do estudo era comparar os dois tipos de escovas com respeito à eficácia na remoção da placa bacteriana. Os dados do estudo foram analisados por Singer and Andrade (1997) e são apresentados aqui apenas com intuito didático. Analisamos somente os dados referentes à escova experimental e não incluímos a variável sexo dado que a análise completa não indicou diferenças entre meninas e meninos com relação à remoção da placa bacteriana.

Tabela 6.5: Índices de placa bacteriana antes e depois da escovação com uma escova de dentes experimental

| ident | antes | depois | ident | antes | depois |
|-------|-------|--------|-------|-------|--------|
| 1 | 2,18 | 0,43 | 14 | 1,40 | 0,24 |
| 2 | 2,05 | 0,08 | 15 | 0,90 | 0,15 |
| 3 | 1,05 | 0,18 | 16 | 0,58 | 0,10 |
| 4 | 1,95 | 0,78 | 17 | 2,50 | 0,33 |
| 5 | 0,28 | 0,03 | 18 | 2,25 | 0,33 |
| 6 | 2,63 | 0,23 | 19 | 1,53 | 0,53 |
| 7 | 1,50 | 0,20 | 20 | 1,43 | 0,43 |
| 8 | 0,45 | 0,00 | 21 | 3,48 | 0,65 |
| 9 | 0,70 | 0,05 | 22 | 1,80 | 0,20 |
| 10 | 1,30 | 0,30 | 23 | 1,50 | 0,25 |
| 11 | 1,25 | 0,33 | 24 | 2,55 | 0,15 |
| 12 | 0,18 | 0,00 | 25 | 1,30 | 0,05 |
| 13 | 3,30 | 0,90 | 26 | 2,65 | 0,25 |

Embora as duas variáveis, índices de placa bacteriana antes e depois da escovação correspondam essencialmente a variáveis respostas, é possível

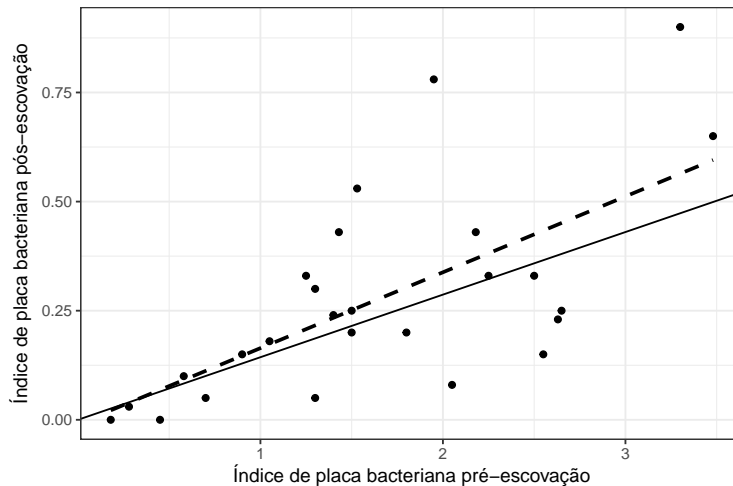


Figura 6.17: Gráfico de dispersão para os dados da Tabela 6.5; curva sólida para o modelo de regressão linear sem intercepto (6.20) e curva interrompida para o modelo (6.19).

considerar uma **análise condicional**, tomando o índice pré escovação como variável explicativa (x_i) e o índice pós escovação como variável resposta (y_i). Nesse contexto, a pergunta que se deseja responder é “qual o valor esperado do índice pós escovação **dado** um determinado valor do índice pré escovação?”.

O gráfico de dispersão dos dados da Tabela 6.5 está apresentado na Figura 6.17 (a linha tracejada corresponde ao modelo de regressão linear simples ajustado aos dados originais) em que se pode notar um aumento da dispersão do índice de placa observado pós escovação com o aumento do índice pré escovação. Isso invalida a adoção de um modelo como (6.1) cujo ajuste exige homocedasticidade (variância constante).

Singer e Andrade(1997) analisaram os dados do estudo completo por meio de um modelo não linear da forma

$$y_i = \beta x_i^\gamma e_i, \quad i = 1, \dots, 26, \quad (6.14)$$

em que $\beta > 0$ e γ são parâmetros desconhecidos e e_i são erros (multiplicativos) positivos, justificando-o por meio das seguintes constatações:

- i) os índices de placa bacteriana são positivos ou nulos;
- ii) a relação entre X e Y deve ser modelada por uma função que passa pela origem (uma medida nula de X implica uma medida nula de Y);
- iii) espera-se que a variabilidade de Y seja menor para valores menores de X , pois o índice de placa pós escovação deve ser menor ou igual ao índice pré escovação.

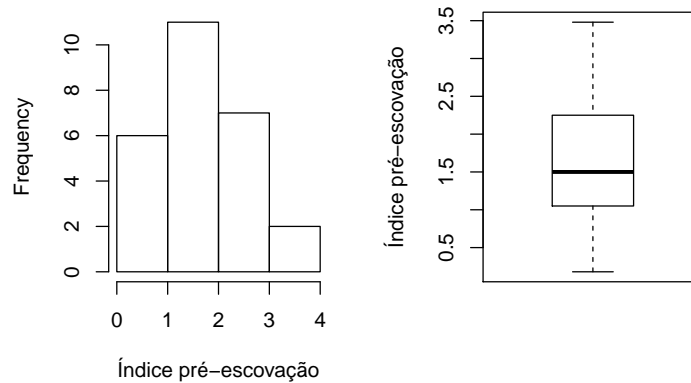


Figura 6.18: Histograma e *boxplot* para o índice de placa bacteriana pré escovação.

Note que y/x denota a taxa de redução do índice de placa e $E(y)/x$ denota a taxa esperada de redução do índice de placa. Por (6.14), temos

$$\frac{E(y_i)}{x_i} = \frac{\beta x_i^\gamma E(e_i)}{x_i} = \beta x_i^{\gamma-1} E(e_i),$$

lembrando que $E(e_i) > 0$. Logo, se $\gamma = 1$, essa taxa de redução esperada é constante; se $\gamma > 1$ a taxa de redução esperada aumenta e se $\gamma < 1$, ela diminui com o aumento do índice de placa x_i . Por outro lado, quanto menor for β (por exemplo, se $0 < \beta < 1$), maior será a redução do índice de placa.

Na Figura 6.18 apresentamos o histograma de X e o respectivo *boxplot*, mostrando que a distribuição do índice de placa pré escovação é moderadamente assimétrica à direita. Embora não faça sentido construir o histograma e o *boxplot* correspondente ao índice de placa bacteriana pós escovação Y (pois sob o modelo, sua média depende de X), é razoável supor que a distribuição condicional de Y dado X também seja assimétrica. Portanto uma transformação da forma z^θ , com $0 \leq \theta < 1$ é adequada para tornar os dados mais simétricos e estabilizar a variância (refira-se à Seção 3.8 para detalhes sobre transformações de variáveis). Podemos considerar, por exemplo, os casos $\theta = 0$, ou seja, a transformação logarítmica, $\theta = 1/3$ (raiz cúbica) ou $\theta = 1/2$ (raiz quadrada). Eliminando os dois pares para os quais $Y = 0$, ficamos com 24 observações e então podemos utilizar uma transformação logarítmica para ambas as variáveis.

Na Figura 6.19 apresentamos o diagrama de dispersão entre $\log x_i$ e $\log y_i$ sugerindo que a transformação induz uma menor dispersão dos dados, embora ainda haja um maior acúmulo de pontos para valores grandes de X .

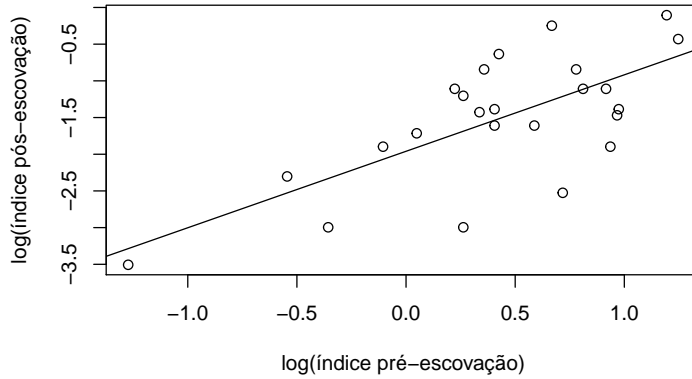


Figura 6.19: Gráfico de dispersão para os dados da Tabela 6.5 sob transformação logarítmica.

Essa transformação permite linearizar o modelo (6.14), deixando-o no formato de um modelo de regressão linear simples

$$y_i^* = \beta^* + \gamma x_i^* + e_i^*, \quad i = 1, \dots, 24, \quad (6.15)$$

com parâmetros γ e $\beta^* = \log \beta$. Usando o método de mínimos quadrados, a reta ajustada é

$$\hat{y}_i^* = -1,960 + 1,042x_i^*. \quad (6.16)$$

que corresponde a

$$\hat{y}_i = 0,141x_i^{1,042}, \quad (6.17)$$

na concepção original, já que $\hat{\beta} = \exp(\hat{\beta}^*) = \exp(-1,960) = 1,042$. Note que $\hat{\beta} < 1$ e $\hat{\gamma}$ tem valor muito próximo de 1. Podemos testar a hipótese $\gamma = 1$, para avaliar se esse resultado traz evidência suficiente para concluir que a taxa de redução do índice de placa bacteriana na população para a qual se deseja fazer inferência é constante. Para testar $H_0 : \gamma = 1$ contra a alternativa $H_A : \gamma > 1$ usamos a estatística

$$t = \frac{\hat{\gamma} - 1}{S / \sqrt{\sum (x_i^* - \bar{x}^*)^2}}$$

cuja distribuição sob H_0 é t com $n - 2$ graus de liberdade (veja a Seção 5.2 e Bussab e Morettin, 2017). O valor-p correspondente ao valor observado da estatística t é

$$p = P(\hat{\gamma} > 1,042) = P[t_{22} > \frac{1,042 - 1}{S} \sqrt{\sum (x_i^* - \bar{x}^*)^2}].$$

Como $\sum_i x_i^* = 10,246$, $\bar{x}^* = 0,427$, $\sum_i y_i^* = -36,361$, $\bar{y}^* = -1,515$, $\sum_i (x_i^* - \bar{x}^*)^2 = \sum_i (x_i^*)^2 - (24)(\bar{x}^*)^2 = 12,149 - (24)(0,182) = 7,773$, obtemos $S^2 = 7,773/22 = 0,353$ e $S = 0,594$. Então

$$p = P(t_{22} > (0,42)(2,788)/(0,594)) = P(t_{22} > 1,971) \approx 0,06$$

e então não há evidências fortes para rejeitar H_0 . Como consequência, podemos dizer que a taxa esperada de redução da placa é

$$E(y_i)/x_i = \beta E(e_i),$$

que é constante. Como concluímos que $\gamma = 1$, o modelo linear nos logaritmos das variáveis pode ser reescrito como

$$y_i^* = \beta^* + x_i^* + e_i^*, \quad (6.18)$$

e para estimar β^* basta considerar a soma de quadrados dos erros

$$Q(\beta^*) = \sum_i (y_i^* - \beta^* - x_i^*)^2,$$

derivá-la em relação a β^* e obter o estimador de mínimos quadrados de β^* como

$$\widehat{\beta}^* = \overline{y^*} - \overline{x^*}.$$

No nosso caso, $\widehat{\beta}^* = -1,515 - 0,427 = -1,942$, e o modelo ajustado é

$$\widehat{y}_i^* = -1,942 + x_i^*. \quad (6.19)$$

O modelo original corresponde à reta passando pela origem

$$\widehat{y}_i = 0,1434x_i, \quad i = 1, \dots, 24, \quad (6.20)$$

que está representada por meio de uma linha sólida na Figura 6.17.

Os resíduos dos modelos (6.14) e (6.15) estão representados nas Figuras 6.20 e 6.21, respectivamente. Esses gráficos sugerem que os resíduos dos dois modelos são aproximadamente simétricos, mas não são totalmente compatíveis com a distribuição adotada. A variabilidade desses resíduos ainda é grande. Para uma análise do conjunto de dados do qual este exemplo foi extraído, o leitor deve consultar Singer and Andrade (1997).

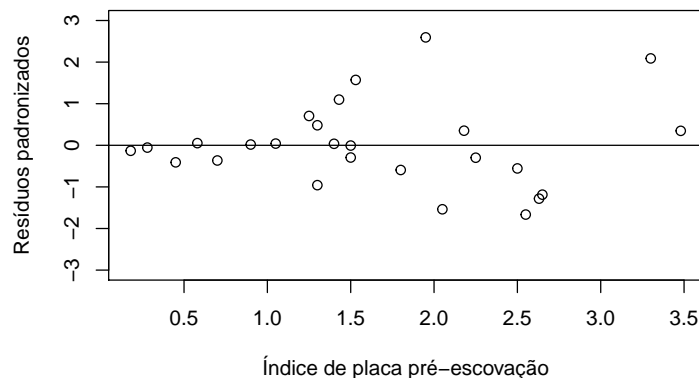


Figura 6.20: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear aos dados da Tabela 6.5.

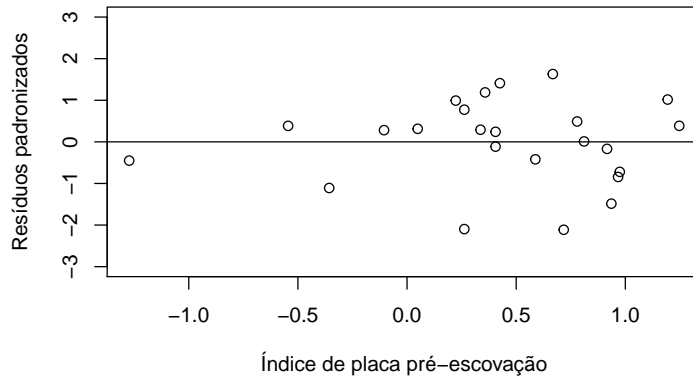


Figura 6.21: Gráfico de resíduos padronizados para o ajuste do modelo de regressão linear aos dados logaritmizados da Tabela 6.5.

6.3 Regressão Linear Múltipla

Com p variáveis explicativas X_1, \dots, X_p e uma variável resposta Y , o **modelo de regressão linear múltipla** é expresso como

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_p x_{ip} + e_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.21)$$

O coeficiente β_0 é o chamado **intercepto** e a variável explicativa associada a ele, x_{i0} , tem valor constante igual a 1. para completar a especificação do modelo, supõe-se que os erros e_i são não correlacionados, tenham média zero e variância comum (desconhecida) σ^2 .

Se quisermos testar hipóteses a respeito dos coeficientes do modelo ou construir intervalos de confiança para eles por meio de estatísticas com distribuições exatas, a suposição de que a distribuição de frequências dos erros é Normal deve ser adicionada. O modelo (6.21) tem $p + 2$ parâmetros desconhecidos, a saber, $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ e σ^2 , que precisam que ser estimados com base nos dados observados.

Definindo $x_{i0} = 1$, $i = 1, \dots, n$, podemos escrever (6.21) na forma

$$y_i = \sum_{j=0}^p \beta_j x_{ij} + e_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Minimizando a soma dos quadrados dos erros e_i , *i.e.*,

$$Q(\beta_0, \dots, \beta_p) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j x_{ij}]^2,$$

em relação a β_0, \dots, β_p obtemos os **estimadores de mínimos quadrados (EMQ)** $\hat{\beta}_j$, $j = 1, \dots, p$, de modo que

$$\hat{y}_i = \sum_{j=0}^p \hat{\beta}_j x_{ij}, \quad i = 1, \dots, n$$

Tabela 6.6: Matriz de dados

| Y | X_1 | X_2 | \cdots | X_p |
|----------|----------|----------|----------|----------|
| y_1 | x_{11} | x_{12} | \cdots | x_{1p} |
| y_2 | x_{21} | x_{22} | \cdots | x_{2p} |
| \vdots | \vdots | \vdots | | \vdots |
| y_n | x_{n1} | x_{n2} | \cdots | x_{np} |

são os **valores estimados** (sob o modelo). Os termos

$$\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (6.22)$$

são os **resíduos**, cuja análise é fundamental para avaliar se modelos da forma (6.21) se ajustam bem aos dados.

Para efeitos computacionais os dados correspondentes a problemas de regressão linear múltipla devem ser dispostos como indicado na Tabela 6.6. Em geral, a variável correspondente ao intercepto (que é constante e igual a um) não precisa ser incluída na matriz de dados; os pacotes computacionais incluem-na naturalmente no modelo a não ser que se indique o contrário.

Para facilitar o desenvolvimento metodológico, convém expressar o modelo na forma matricial

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}. \quad (6.23)$$

em que $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$ é o vetor cujos elementos são os valores da variável resposta Y , $\mathbf{X} = (\mathbf{1}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p)$ é a matriz cujos elementos são os valores das variáveis explicativas, com $\mathbf{x}_j = (x_{1j}, \dots, x_{nj})^\top$ contendo os valores da variável X_j , $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)^\top$ contém os respectivos coeficientes e $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)^\top$ é o vetor de **erros aleatórios**.

Exemplo 6.7 : Os dados da Tabela 6.7 são provenientes de um estudo cujo objetivo é avaliar o efeito do índice de massa corpórea (IMC) e da carga aplicada numa esteira ergométrica no consumo de oxigênio (VO2) numa determinada fase do exercício. Para associar a distribuição do consumo de oxigênio (Y) com as informações sobre carga na esteira ergométrica (X_1) e IMC (X_2), consideramos o seguinte modelo de regressão linear múltipla:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + e_i, \quad (6.24)$$

$i = 1, \dots, 28$ com as suposições usuais sobre os erros (média zero e variância constante σ^2). Aqui, o parâmetro β_1 representa a variação no VO2 esperada por unidade carga para indivíduos com o mesmo IMC. O parâmetro β_2 tem interpretação semelhante com a substituição de carga na esteira por IMC construída e IMC por carga na esteira. Como não temos dados para indivíduos com IMC menor que 17,50 e carga menor que 32, o parâmetro β_0 deve ser interpretado como um fator de ajuste do plano que aproxima a verdadeira função que relaciona o valor esperado da variável resposta com

Tabela 6.7: VO2, IMC e carga na esteira ergométrica para 28 indivíduos

| ident | VO2 (mL/kg/min) | IMC (kg/m ²) | carga (W) | ident | VO2 (mL/kg/min) | IMC (kg/m ²) | carga (W) |
|-------|--------------------|-----------------------------|--------------|-------|--------------------|-----------------------------|--------------|
| 1 | 14,1 | 24,32 | 71 | 15 | 22,0 | 22,45 | 142 |
| 2 | 16,3 | 27,68 | 91 | 16 | 13,2 | 30,86 | 62 |
| 3 | 9,9 | 23,93 | 37 | 17 | 16,2 | 25,79 | 86 |
| 4 | 9,5 | 17,50 | 32 | 18 | 13,4 | 33,56 | 86 |
| 5 | 16,8 | 24,46 | 95 | 19 | 11,3 | 22,79 | 40 |
| 6 | 20,4 | 26,41 | 115 | 20 | 18,7 | 25,65 | 105 |
| 7 | 11,8 | 24,04 | 56 | 21 | 20,1 | 24,24 | 105 |
| 8 | 29,0 | 20,95 | 104 | 22 | 24,6 | 21,36 | 123 |
| 9 | 20,3 | 19,03 | 115 | 23 | 20,5 | 24,48 | 136 |
| 10 | 14,3 | 27,12 | 110 | 24 | 29,4 | 23,67 | 189 |
| 11 | 18,0 | 22,71 | 105 | 25 | 22,9 | 21,60 | 135 |
| 12 | 18,7 | 20,33 | 113 | 26 | 26,3 | 25,80 | 189 |
| 13 | 9,5 | 25,34 | 69 | 27 | 20,3 | 23,92 | 95 |
| 14 | 17,5 | 29,93 | 145 | 28 | 31,0 | 24,24 | 151 |

as variáveis explicativas na região em que há dados disponíveis. Se substituíssemos X_1 por $X_1 - 32$ e X_2 por $X_2 - 17.5$, o termo β_0 corresponderia ao VO2 esperado para um indivíduo com IMC = 17.50 submetido a uma carga igual a 32 na esteira ergométrica.

O modelo (6.24) pode ser expresso na forma matricial (6.23) com

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 14,1 \\ 16,3 \\ \vdots \\ 31,0 \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 24,32 & 71 \\ 1 & 27,68 & 91 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 24,34 & 151 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}, \mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_{28} \end{bmatrix}.$$

Para problemas com diferentes tamanhos de amostra (n) e diferentes números de variáveis explicativas (p), basta alterar o número de elementos do vetor de respostas \mathbf{y} e do vetor de coeficientes $\boldsymbol{\beta}$ e modificar a matriz com os valores das variáveis explicativas, alterando o número de linhas e colunas convenientemente. Note que o modelo de regressão linear simples também pode ser expresso em notação matricial; nesse caso, a matriz \mathbf{X} terá 2 colunas e o vetor $\boldsymbol{\beta}$, dois elementos (α e β). Uma das vantagens da expressão do modelo de regressão linear múltipla em notação matricial é que o método de mínimos quadrados (ordinários) utilizado para estimar o vetor de parâmetros $\boldsymbol{\beta}$ no modelo (6.23) pode ser desenvolvido de maneira universal e corresponde à minimização da forma quadrática

$$Q(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{e}^\top \mathbf{e} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2. \quad (6.25)$$

Por meio da utilização de operações matriciais, obtém-se a seguinte expressão para os estimadores de mínimos quadrados

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}. \quad (6.26)$$

Sob a suposição de que $E(\mathbf{e}) = \mathbf{0}$ e $\text{Var}(\mathbf{e}) = \sigma^2 \mathbf{I}_n$, em que \mathbf{I}_n denota a matriz identidade de dimensão n , temos

- i) $E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{\beta}$,
- ii) $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}$.

Além disso, se adicionarmos a suposição de que os erros têm distribuição Normal, pode-se mostrar que o estimador (6.26) tem uma distribuição Normal multivariada, o que permite a construção de intervalos de confiança para ou testes de hipóteses sobre os elementos (ou combinações lineares deles) de $\boldsymbol{\beta}$ por meio de estatísticas com distribuições exatas. Mesmo sem a suposição de normalidade para os erros, um recurso ao Teorema Limite Central permite mostrar que a distribuição aproximada do estimador (6.26) é normal, com média a $\boldsymbol{\beta}$ e matriz de covariâncias $\sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}$.

Um estimador não enviesado de σ^2 é

$$\begin{aligned} s^2 &= [n - (p + 1)]^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ &= [n - (p + 1)]^{-1} \mathbf{y}^\top [\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top] \mathbf{y} \end{aligned}$$

em que \mathbf{I}_n denota a matriz identidade de dimensão n .

Com duas variáveis explicativas, o gráfico de dispersão corresponde a um plano num espaço tridimensional, que ainda pode ser representado em duas dimensões; para mais que 2 variáveis explicativas, o gráfico de dispersão corresponde a um hiperplano num espaço com mais do que três dimensões que não pode ser representado no plano. Por isso, uma alternativa é construir gráficos de dispersão entre a variável resposta e cada uma das variáveis explicativas. Para os dados da Tabela 6.7 esses gráficos estão dispostos na Figura 6.22 e indicam que a distribuição do VO2 varia positivamente com a carga na esteira e negativamente com o IMC.

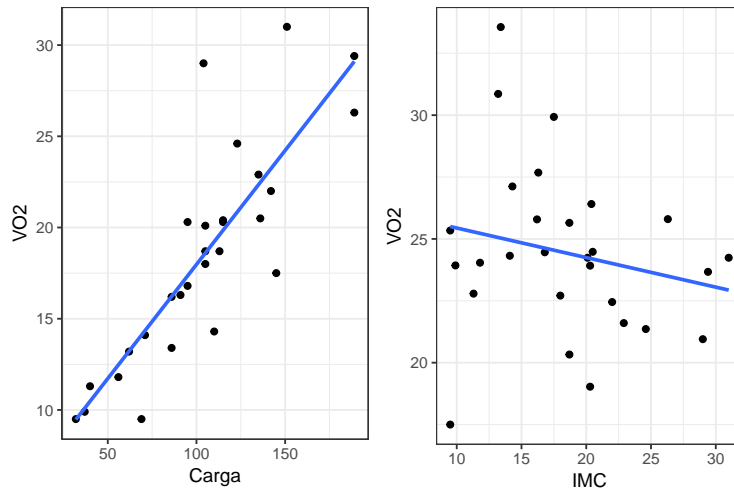


Figura 6.22: Gráficos de dispersão para os dados da Tabela 6.3.

O uso da função `lm()` conduz aos resultados que seguem.


```

Call:
lm(formula = VO2 ~ IMC + carga, data = esteira)
Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-4.1834 -2.0162 -0.2929  1.0646  9.0868
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 15.44726    4.45431   3.468  0.00191 **
IMC          -0.41317    0.17177  -2.405  0.02389 *
carga         0.12617    0.01465   8.614 5.95e-09 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 3.057 on 25 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.759, Adjusted R-squared:  0.7397
F-statistic: 39.36 on 2 and 25 DF,  p-value: 1.887e-08

```

Essa saída nos diz que os coeficientes (erro padrão) correspondentes ao ajuste do modelo (6.24) aos dados da Tabela 6.7 são $\hat{\beta}_0 = 15,45$ (4,45), $\hat{\beta}_1 = 0,13$ (0,01) e $\hat{\beta}_2 = -0,41$ (0,17). Então, segundo o modelo, o valor esperado do VO2 para um indivíduo (IMC fixado) aumenta de 0,13 unidades para cada aumento de uma unidade da carga na esteira; similarmente, o valor esperado do VO2 para indivíduos submetidos à mesma carga na esteira diminui de 0,41 unidades com o aumento de uma unidade no IMC.

Embora o coeficiente de determinação $R^2 = 0,74$ sugira a adequação do modelo, convém avaliá-la por meio de outras ferramentas diagnósticas. No caso de regressão linear múltipla, gráficos de resíduos podem ter cada uma das variáveis explicativas ou os valores ajustados no eixo das abscissas. Para o exemplo, esses gráficos estão dispostos na Figura 6.23 juntamente com o gráfico contendo as distâncias de Cook.

Os gráficos de resíduos padronizados não indicam um comprometimento da hipótese de homoscedasticidade embora seja possível suspeitar de dois ou três pontos discrepantes (correspondentes aos indivíduos com identificação 4, 8 e 28) que também são salientados no gráfico das distâncias de Cook. A identificação desses pontos está baseada num critério bastante utilizado (não sem controvérsias) na literatura em que resíduos associados a distâncias de Cook maiores que $4/n$ (ou $4/(n-p)$) são considerados “influentes”. Em todo caso, convém lembrar que o propósito dessas ferramentas é essencialmente exploratória e que as decisões sobre a exclusão de pontos discrepantes ou a escolha do modelo dependem de outras considerações. Esses pontos também fazem com que a suposição de normalidade possa ser posta em causa como se observa pelo painel esquerdo da Figura 6.24.

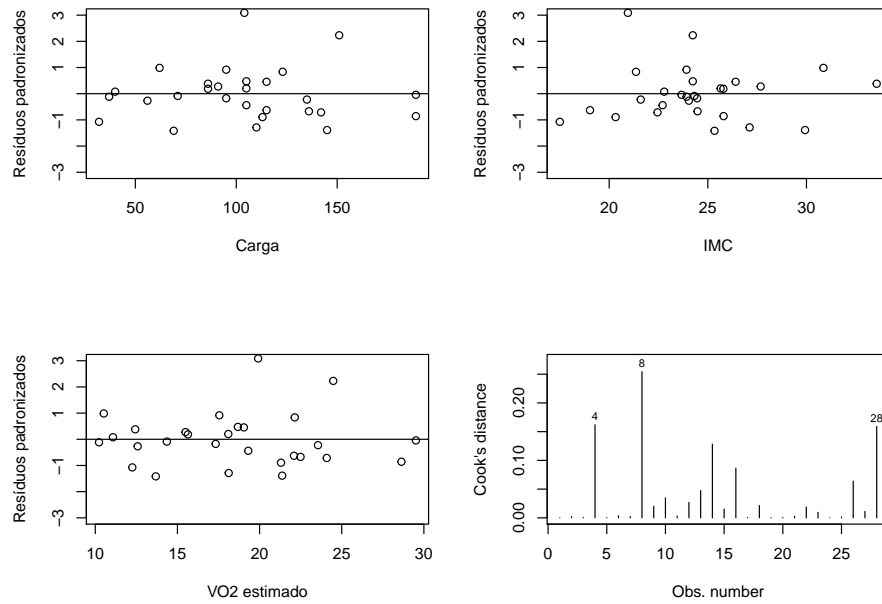


Figura 6.23: Gráficos de resíduos padronizados e distâncias de Cook para o ajuste do modelo (6.24) aos dados da Tabela 6.7.

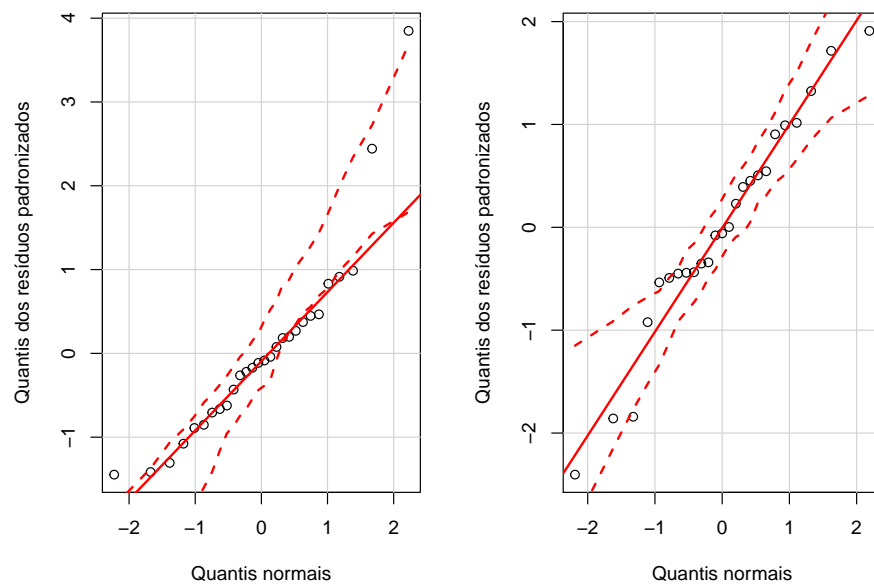


Figura 6.24: Gráficos QQ correspondentes ao ajuste do modelo (6.24) aos dados da Tabela 6.7 com (painel esquerdo) e sem (painel direito) os pontos com identificação 4, 8 e 28.

Os coeficientes do modelo ajustado ao conjunto de 25 dados obtidos com

a exclusão dos pontos com identificação 4, 8 e 28 são $\hat{\beta}_0 = 14,89 (3,47)$, $\hat{\beta}_1 = 0,11 (0,01)$ e $\hat{\beta}_2 = -0,36 (0,13)$. O coeficiente de determinação correspondente é $R^2 = 0,74$. Os gráficos de dispersão, resíduos padronizados e de distâncias de Cook correspondentes estão dispostos na Figura 6.25 e também sugerem um ajuste melhor.

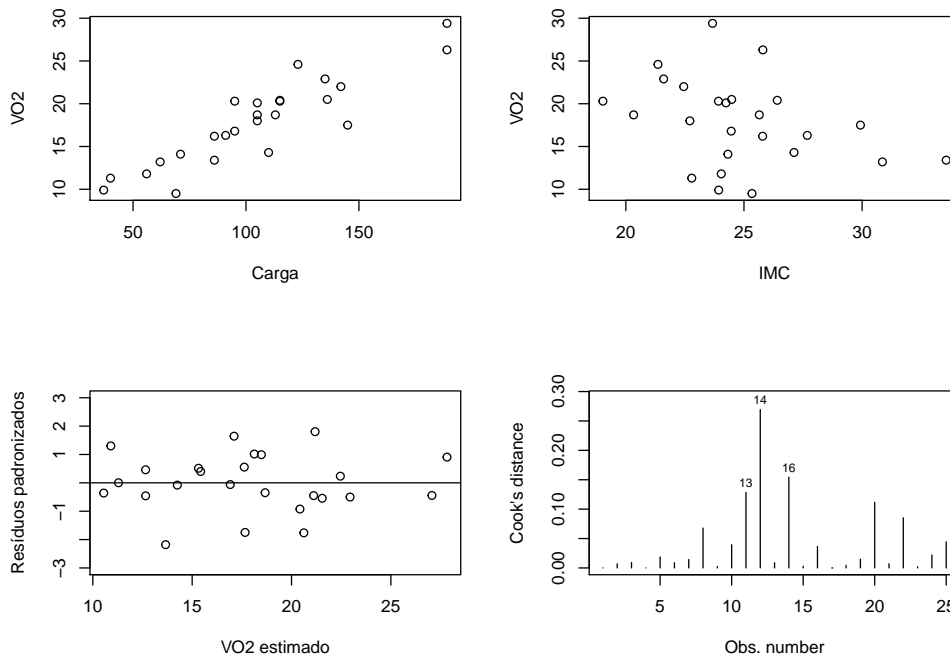


Figura 6.25: Gráficos de dispersão, resíduos padronizados e de distância de Cook correspondentes ao ajuste do modelo (6.24) aos dados da Tabela 6.7 sem os pontos com identificação 4, 8 e 28.

Exemplo 6.8: Os dados dispostos na Tabela 6.8 contêm informações sobre a produção (ton), potência instalada (1000 kW) e área construída (m^2) de 10 empresas de uma certa indústria. O objetivo é avaliar como a produção média varia em função da potência instalada e área construída. Os gráficos de dispersão entre a variável resposta (produção) e cada uma das variáveis explicativas estão dispostos na Figura 6.26 e sugerem que essas duas variáveis são linearmente associadas com a produção.

Tabela 6.8: Produção (ton), potência instalada (1000 kW) e área construída (100 m^2) de empresas de uma certa indústria

| | | | | | | | | | | |
|----------|-----|------|-----|-----|-----|------|------|------|------|------|
| Produção | 4,5 | 5,9 | 4,2 | 5,2 | 8,1 | 9,7 | 10,7 | 11,9 | 12,0 | 12,3 |
| Potência | 0,9 | 2,5 | 1,3 | 1,8 | 3,1 | 4,6 | 6,1 | 6,0 | 5,9 | 6,1 |
| Área | 7,1 | 10,4 | 7,2 | 8,2 | 8,5 | 11,9 | 12,1 | 12,5 | 12,0 | 11,3 |

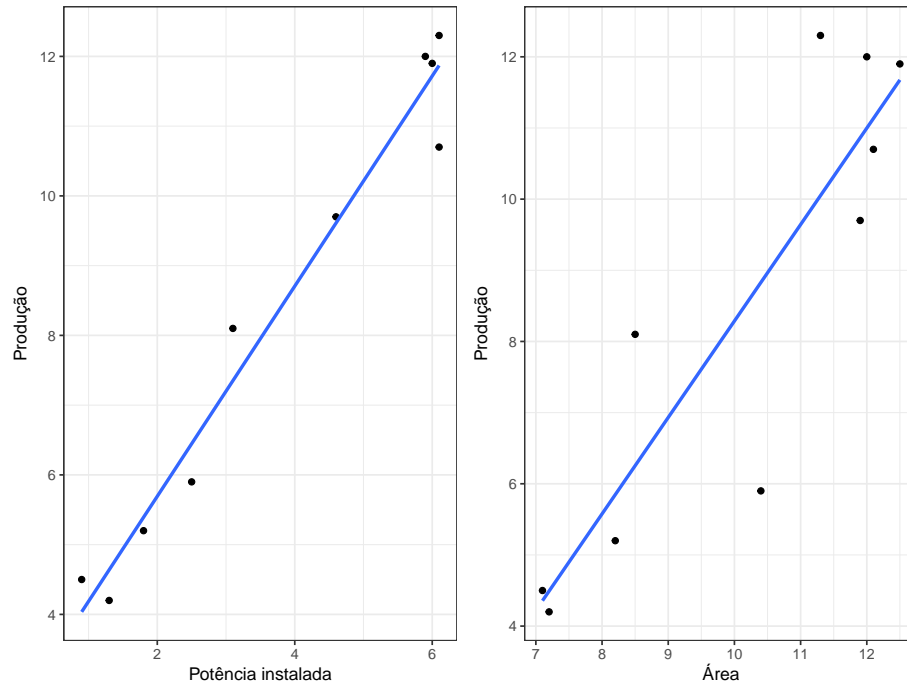


Figura 6.26: Gráficos de dispersão correspondentes aos dados da Tabela 6.8.

Os coeficientes (com erros padrões entre parênteses) correspondentes ao intercepto, potência instalada e área construída, de um modelo de regressão linear múltipla ajustado aos dados são, respectivamente, $\hat{\beta}_0 = 4,41 (1,74)$, $\hat{\beta}_1 = 1,75 (0,26)$ e $\hat{\beta}_2 = -0,26 (0,26)$. O coeficiente de determinação associado é $R^2 = 0,9723$. Chama a atenção, o valor negativo do coeficiente relativo à área construída, pois o gráfico de dispersão da Figura 6.26 sugere uma associação positiva. A justificativa está no fato de as duas variáveis explicativas serem altamente correlacionadas (coeficiente de correlação de Pearson = 0,93) de forma que a contribuição de uma delas não acrescenta poder de explicação da produção média na presença da outra. Um teste da hipótese de que $\beta_2 = 0$ produz $p = 0,34$ sugerindo que esse coeficiente pode ser considerado nulo. Em particular, a potência instalada é suficiente para explicar a variação da produção média. O ajuste de um modelo de regressão linear simples tendo unicamente a potência instalada como variável explicativa indica que o intercepto e o coeficiente associado à essa variável são, respectivamente, $\hat{\beta}_0 = 2,68 (0,42)$ e $\hat{\beta}_1 = 1,50 (0,10)$ com um coeficiente de determinação $R^2 = 0,9681$. Gráficos de resíduos padronizados correspondentes aos dois modelos estão apresentados na Figura 6.27 e corroboram a conclusão de que apenas a variável potência instalada é suficiente para a explicação da variação da produção média.

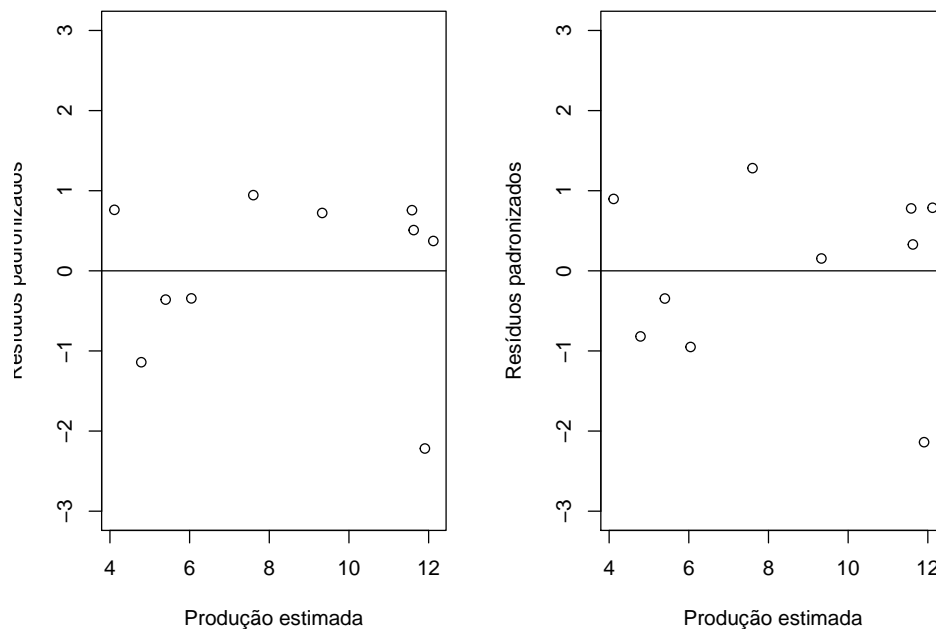


Figura 6.27: Gráficos de resíduos padronizados correspondentes aos modelos ajustados aos dados da Tabela 6.8 com duas (painel esquerdo) ou uma (painel direito) variável explicativa.

Note que o valor do coeficiente de determinação do modelo com duas variáveis explicativas $R^2 = 0,9723$ é maior do que aquele correspondente ao modelo que inclui apenas uma delas $R^2 = 0,9681$. Pela definição desse coeficiente, quanto mais variáveis forem acrescentadas ao modelo, maior será ele. Por esse motivo, convém utilizar o **coeficiente de determinação ajustado** que inclui uma penalidade pelo acréscimo de variáveis explicativas. Para o exemplo, temos $R_{aj}^2 = 0,9644$ quando duas variáveis explicativas são consideradas e $R_{aj}^2 = 0,9641$ quando apenas uma delas é incluída no modelo (ver Nota de Capítulo 3 para detalhes).

Uma outra ferramenta útil para avaliar a importância marginal de uma variável na presença de outras é o **gráfico da variável adicionada**. Consideremos o modelo de regressão linear múltipla

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + e_i, \quad i = 1, \dots, n$$

com as suposições usuais. Para avaliar a importância marginal da variável X_2 na presença da variável X_1 , o gráfico da variável adicionada é obtido por meio dos seguintes passos

- i) Obtenha os resíduos \hat{e}_{1i} do modelo $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + e_i$;
- ii) Obtenha os resíduos \hat{d}_{1i} do modelo $x_{2i} = \gamma_0 + \gamma_1 x_{1i} + d_{1i}$;
- iii) Construa o gráfico de dispersão de \hat{e}_{1i} em função de \hat{d}_{1i} .

Uma tendência “relevante” nesse gráfico indica que a variável X_2 contribui para explicar a variação na média da variável resposta. Na realidade, a inclinação de uma reta ajustada aos valores de \hat{e}_{1i} em função de \hat{e}_{1i} é exatamente o coeficiente de X_2 no modelo original.

Para o exemplo da Tabela 6.8 o gráfico da variável adicionada está apresentado na Figura 6.28. O coeficiente da reta ajustada $(-0,26)$ é não significativo, sugerindo que a variável X_2 não precisa ser utilizada para explicar a variação na média da variável resposta. Compare a inclinação (negativa) da reta representada nessa figura com aquela (positiva) da reta representada no painel direito da Figura 6.26.

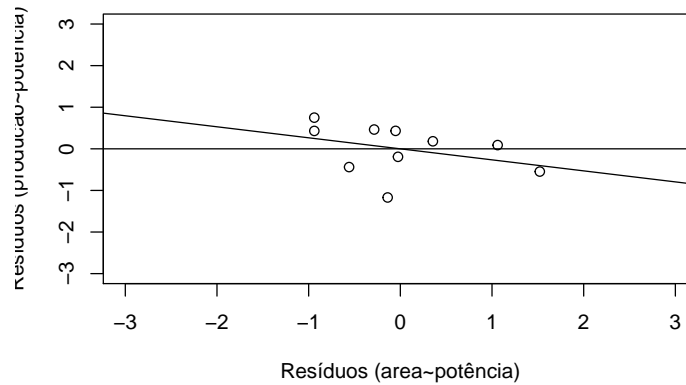


Figura 6.28: Gráfico da variável adicionada correspondente ao modelo ajustado aos dados da Tabela 6.8.

6.4 Regressão para dados longitudinais

Consideremos os dados do Exemplo 2.3, dispostos na Tabela 2.2 correspondentes a um estudo cujo objetivo é avaliar a variação de peso de bezerras entre a 12^a e 26^a semanas após o nascimento. Como cada animal é avaliado em 8 instantes (semanas 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24 e 26), convém dispor os dados no formato da Tabela ?? em que ficam caracterizadas tanto a variável resposta (peso) quanto a variável explicativa (tempo). O gráfico de dispersão correspondente está apresentado na Figura 6.29.

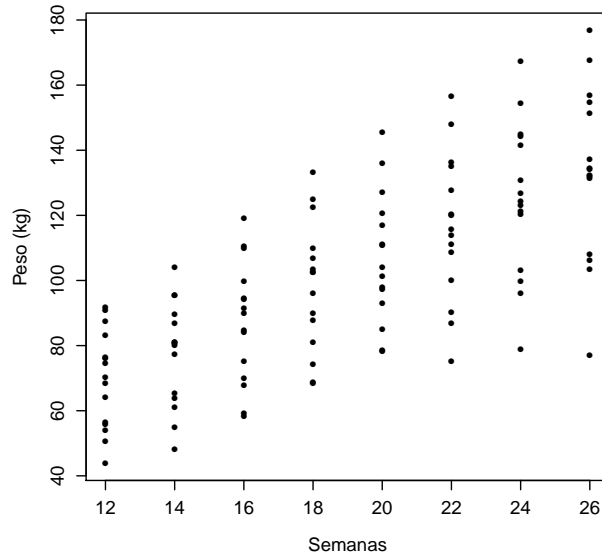


Figura 6.29: Gráfico de dispersão para os dados da Tabela 2.2.

Esse gráfico sugere que o crescimento dos animais pode ser representado pelo seguinte modelo de regressão:

$$y_{ij} = \alpha + \beta(x_j - 12) + e_{ij} \quad (6.27)$$

em que y_{ij} corresponde ao peso do i -ésimo animal no j -ésimo instante de observação, x_j corresponde ao número de semanas pós nascimento no j -ésimo instante de observação e e_{ij} têm média zero, variância constante σ^2 e são não correlacionados. Aqui o parâmetro α denota o peso esperado para animais na 12a semana pós nascimento e β corresponde ao ganho esperado de peso por semana.

Como cada animal é pesado várias vezes, a suposição de que os erros e_{ij} não são correlacionados pode não ser adequada, pois animais com peso acima ou abaixo da média na 12 semana, tendem a manter esse padrão ao longo das observações. Para avaliar esse aspecto, convém construir um **gráfico de perfis** em que as observações realizadas num mesmo animal são ligadas por segmentos de reta, como indicado na Figura 6.30. A correlação entre as observações realizadas no mesmo animal fica evidenciada no gráfico do desenhista disposto na Figura 6.31.

Como no gráfico de perfis a variabilidade da resposta é similar em todos os instantes de observação e os perfis individuais têm aproximadamente as mesmas inclinações e além disso, no gráfico do desenhista podem-se notar correlações lineares com magnitudes semelhantes entre as medidas realizadas em cada par de instantes de observação, um modelo alternativo que

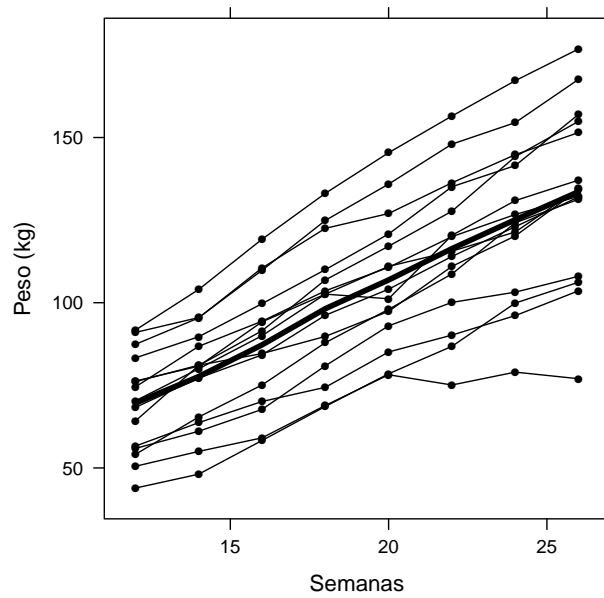


Figura 6.30: Gráfico de perfis para os dados da Tabela 2.2.

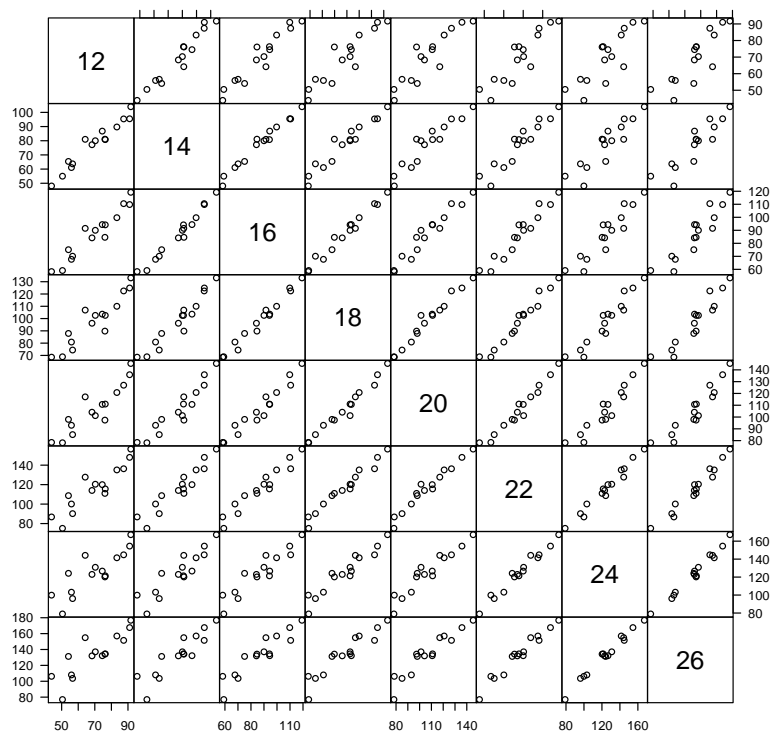


Figura 6.31: Gráfico do desenhista para os dados da Tabela 2.2.

incorpora essas características é um **modelo linear misto** dado por

$$y_{ij} = \alpha + \beta(x_j - 12) + a_i + e_{ij}, \quad (6.28)$$

em que os termos y_{ij} , x_j , α , β e e_{ij} são definidos como no modelo (6.27) e a_i é um **efeito aleatório** com média zero e variância σ_a^2 , independente de e_{ij} . Esse modelo é homoscedástico, com variância de y_{ij} igual a $\sigma_a^2 + \sigma^2$ e covariância entre y_{ij} e y_{ik} , $j \neq k$ igual a σ_a^2 . Essencialmente, esse modelo considera que o crescimento de cada bezerro pode ser modelado por uma reta com a mesma inclinação β , porém com intercepto $\alpha + a_i$ que varia de bezerro para bezerro. O intercepto tem um componente aleatório porque os animais constituem uma amostra de uma população para a qual se quer fazer inferência. Os parâmetros α e β constituem as características populacionais de interesse.

As estimativas dos parâmetros α e β obtidas do ajuste dos modelos (6.27) e (6.28) são iguais $\hat{\alpha} = 69,9$ e $\hat{\beta} = 4,7$, porém os erros padrões correspondentes são menores sob o modelo (6.28), nomeadamente, 5,6 *versus* 7,8 para $\hat{\alpha}$ e 0,1 *versus* 0,4 para $\hat{\beta}$.

Como existem três tipos de resíduos para essa classe de modelos, ferramentas diagnósticas são bem mais complexas do que aquelas apropriadas para os modelos lineares usais. Detalhes sobre a análise de modelos mistos podem ser obtidos em Singer et al. (2018).

6.5 Regressão Logística

Exemplo 6.9. O conjunto de dados apresentado na Tabela 6.9 foi obtido de um estudo cuja finalidade era avaliar a utilização da inibina B como marcador da reserva ovariana de pacientes submetidas à fertilização *in vitro*. A variável explicativa é a diferença entre a concentração sérica de inibina B após estímulo com FSH e sua concentração sérica pré estímulo e a variável resposta é a classificação das pacientes como boas ou más respondedoras com base na quantidade de oócitos recuperados. Detalhes podem ser obtidos em Dzik et al. (2000).

A diferença entre esse problema e aqueles estudados nas seções anteriores está no fato de a variável resposta ser dicotômica e não contínua. Se definirmos a variável Y com valor igual a 1 no caso de resposta positiva e igual a zero no caso de resposta negativa, a resposta média será igual à proporção $p = E(Y)$ de pacientes com resposta positiva. Essencialmente, o objetivo da análise é modelar essa proporção como função da variável explicativa. Em vez de modelar essa resposta média, convém modelar uma função dela, a saber o logaritmo da chance de resposta positiva (ver Seção 4.2) para evitar estimativas de proporções com valores fora do intervalo (0, 1). O modelo correspondente pode ser escrito como

$$\log \frac{P(Y_i = 1|X = x)}{P(Y_i = 0|X = x)} = \alpha + \beta x_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.29)$$

Tabela 6.9: Concentração de inibina B antes e após estímulo hormonal em pacientes submetidas a fertilização *in vitro*

| ident | resposta | inibpre | inibpos | ident | resposta | inibpre | inibpos |
|-------|----------|---------|---------|-------|----------|---------|---------|
| 1 | pos | 54,03 | 65,93 | 17 | pos | 128,16 | 228,48 |
| 2 | pos | 159,13 | 281,09 | 18 | pos | 152,92 | 312,34 |
| 3 | pos | 98,34 | 305,37 | 19 | pos | 148,75 | 406,11 |
| 4 | pos | 85,30 | 434,41 | 20 | neg | 81,00 | 201,40 |
| 5 | pos | 127,93 | 229,30 | 21 | neg | 24,74 | 45,17 |
| 6 | pos | 143,60 | 353,82 | 22 | neg | 3,02 | 6,03 |
| 7 | pos | 110,58 | 254,07 | 23 | neg | 4,27 | 17,80 |
| 8 | pos | 47,52 | 199,29 | 24 | neg | 99,30 | 127,93 |
| 9 | pos | 122,62 | 327,87 | 25 | neg | 108,29 | 129,39 |
| 10 | pos | 165,95 | 339,46 | 26 | neg | 7,36 | 21,27 |
| 11 | pos | 145,28 | 377,26 | 27 | neg | 161,28 | 319,65 |
| 12 | pos | 186,38 | 1055,19 | 28 | neg | 184,46 | 311,44 |
| 13 | pos | 149,45 | 353,89 | 29 | neg | 23,13 | 45,64 |
| 14 | pos | 33,29 | 100,09 | 30 | neg | 111,18 | 192,22 |
| 15 | pos | 181,57 | 358,45 | 31 | neg | 105,82 | 130,61 |
| 16 | pos | 58,43 | 168,14 | 32 | neg | 3,98 | 6,46 |

pos: resposta positiva

neg: resposta negativa

ou equivalentemente (ver Exercício 20), como

$$P(Y_i = 1|X = x) = \frac{\exp(\alpha + \beta x_i)}{1 + \exp(\alpha + \beta x_i)}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.30)$$

Neste contexto, o parâmetro α é interpretado como o logaritmo da chance de resposta positiva para pacientes com $x_i = 0$ (concentrações de inibina pré e pós estímulo iguais) e o parâmetro β corresponde ao logaritmo da razão entre a chance de resposta positiva para pacientes com diferença de uma unidade na variável explicativa (ver Exercício 21).

O ajuste desse modelo é realizado pelo método de máxima verossimilhança. A função de verossimilhança a ser maximizada é

$$\ell(\alpha, \beta|\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n [p(x_i)]^{y_i} [1 - p(x_i)]^{1-y_i}$$

$$p(x_i) = \frac{\exp(\alpha + \beta x_i)}{1 + \exp(\alpha + \beta x_i)}.$$

Sua maximização pode ser concretizada por meio da maximização de seu

logaritmo

$$L(\alpha, \beta | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n \left\{ y_i \log[p(x_i)] + (1 - y_i) \log[1 - p(x_i)] \right\}.$$

Os estimadores de máxima verossimilhança de α e β correspondem à solução das **equações de estimação**

$$\sum_{i=1}^n \left\{ y_i - \frac{\exp(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i)}{1 + \exp(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i)} \right\} = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^n x_i \left\{ y_i - \frac{\exp(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i)}{1 + \exp(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i)} \right\} = 0.$$

Como esse sistema de equações não tem solução explícita, deve-se recorrer a métodos iterativos como o **método de Newton-Raphson**. Para detalhes o leitor poderá consultar Paulino e Singer (2006), por exemplo.

O uso da função `glm()` produz os resultados a seguir:

Call:

```
glm(formula = resposta ~ difinib, family = binomial, data = dados)
```

Deviance Residuals:

| Min | 1Q | Median | 3Q | Max |
|---------|---------|--------|--------|--------|
| -1.9770 | -0.5594 | 0.1890 | 0.5589 | 2.0631 |

Coefficients:

| | Estimate | Std. Error | z value | Pr(> z) |
|-------------|-----------|------------|---------|------------|
| (Intercept) | -2.310455 | 0.947438 | -2.439 | 0.01474 * |
| inib | 0.025965 | 0.008561 | 3.033 | 0.00242 ** |

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

Null deviance: 43.230 on 31 degrees of freedom
 Residual deviance: 24.758 on 30 degrees of freedom
 AIC: 28.758

Number of Fisher Scoring iterations: 6

As estimativas dos parâmetros (com erro padrão entre parênteses) α e β correspondentes ao modelo ajustado aos dados da Tabela 6.9 são, respectivamente, $\hat{\alpha} = -2,31$ (0,95) e $\hat{\beta} = 0,03$ (0,01). Consequentemente, a chance de resposta positiva para pacientes com mesmo nível de inibina B pré e pós estímulo hormonal é $\exp(\hat{\alpha}) = 0,10$ (0,09). Essa chance fica multiplicada por $\exp(\hat{\beta}) = 1,03$ (0,09) para cada aumento de uma unidade na diferença entre os níveis de inibina B pré e pós estímulo hormonal.²

²Os erros padrões de $\exp(\hat{\alpha})$ e $\exp(\hat{\beta})$ são calculados por meio do **método Delta**. Ver Nota de Capítulo 6.

A função `predict()` pode ser usada para estimar a probabilidade de que a resposta seja positiva, dados os valores da variável explicativa. Obtemos abaixo algumas probabilidades:

| | | | | | |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| 0.1190483 | 0.7018691 | 0.9554275 | 0.9988353 | 0.5797138 | 0.9588247 |
| 7 | 8 | 9 | 10 | | |
| 0.8045906 | 0.8362005 | 0.9534173 | 0.8997726 | | |

Por exemplo, o valor 0,1190483 foi obtido calculando-se

$$P(X = 1|X = 11, 90) = \frac{\exp\{-2,310455 + (0,025965)(11, 90)\}}{1 + \exp\{-2,310455 + (0,025965)(11, 90)\}}. \quad (6.31)$$

Para prever se a resposta vai ser positiva ou negativa, temos que converter essas probabilidades previstas em rótulos de classes, “positiva”/ ou “negativa”. Considerando respostas positivas como aquelas cuja probabilidade seja maior do que 0,7, digamos, podemos utilizar a função `table()` para obter a seguinte tabela:

```
table(glm.pred,resposta)
```

| | resposta | |
|----------|----------|----------|
| glm.pred | negativa | positiva |
| negativa | 11 | 5 |
| positiva | 2 | 14 |

Os elementos da diagonal dessa tabela indicam os números de observações corretamente classificadas. Ou seja, a proporção de respostas corretas será $(11+14)/32 = 78\%$. Esse valor depende do limiar fixado, 0,7, no caso. Um *default* usualmente fixado é 0,5, e nesse caso, a proporção de respostas corretas vai aumentar.

A utilização de Regressão Logística nesse contexto de classificação será detalhada no Capítulo 10.

Uma das vantagens do modelo de regressão logística é que, com exceção do intercepto, os coeficientes podem ser interpretados como razões de chances e suas estimativas são as mesmas independentemente de os dados terem sido obtidos prospectiva ou retrospectivamente (ver Seção 4.2).

Quando todas as variáveis envolvidas são categorizadas, é comum apresentar os dados na forma de uma tabela de contingência e nesse caso, as estimativas também podem ser obtidas pelo método de mínimos quadrados generalizados.

Exemplo 6.10: Num estudo epidemiológico, 1448 pacientes com problemas cardíacos foram classificados segundo o sexo (feminino ou masculino), idade (< 55 anos ou ≥ 55 anos) e status relativo à hipertensão arterial (sem ou com). Por meio de um procedimento de cineangiocoronariografia, o grau de lesão das artérias coronarianas foi classificado como $< 50\%$ ou $\geq 50\%$. Os dados estão resumidos na Tabela 6.10.

Tabela 6.10: Frequência de pacientes avaliados em um estudo epidemiológico

| Sexo | Idade | Hipertensão arterial | Grau de lesão | |
|-----------|-------|-------------------------|---------------|-------|
| | | | < 50% | ≥ 50% |
| Feminino | < 55 | sem | 31 | 17 |
| Feminino | < 55 | com | 42 | 27 |
| Feminino | ≥ 55 | sem | 55 | 42 |
| Feminino | ≥ 55 | com | 94 | 104 |
| Masculino | < 55 | sem | 80 | 112 |
| Masculino | < 55 | com | 70 | 130 |
| Masculino | ≥ 55 | sem | 74 | 188 |
| Masculino | ≥ 55 | com | 68 | 314 |

Fonte: Singer, J.M. e Ikeda, K. (1996).

Nesse caso, um modelo de regressão logística apropriado (escrito de forma geral) para a análise é

$$\log\{P(Y_{ijk} = 1)/[1 - P(Y_{ijk} = 1)]\} = \alpha + \beta x_i + \gamma v_j + \delta w_k, \quad (6.32)$$

$i = 1, \dots, I$, $j = 1, \dots, J$, $k = 1, \dots, K$, em que $Y_{ijk} = 1$ se um paciente do sexo i ($i = 1$: feminino, $i = 2$: masculino), idade j ($j = 1$: < 55, $j = 2$: ≥ 55) e status relativo à hipertensão k ($k = 1$: sem, $k = 2$: com) tiver lesão coronariana ≥ 50% e $Y_{ijk} = 0$ em caso contrário. Aqui, I , J e K são iguais a 2 e $x_1 = 0$ e $x_2 = 1$ para pacientes femininos ou masculinos, respectivamente, $v_1 = 0$ e $v_2 = 1$ para pacientes com idades < 55 ou ≥ 55, respectivamente e $w_1 = 0$ e $w_2 = 1$ para pacientes sem ou com hipertensão, respectivamente. O parâmetro α corresponde ao logaritmo da chance de lesão coronariana ≥ 50% para mulheres não hipertensas com menos de 55 anos (consideradas como referência); o parâmetro β corresponde ao logaritmo da razão entre a chance de lesão coronariana ≥ 50% para homens não hipertensas com menos de 55 anos e a chance correspondente para mulheres com as mesmas características (de idade e de hipertensão); o parâmetro γ corresponde ao logaritmo da razão entre a chance de lesão coronariana ≥ 50% para pacientes com 55 anos ou mais e a chance correspondente para pacientes com as mesmas características (sexo e hipertensão) e menos de 55 anos; o parâmetro δ corresponde ao logaritmo da razão entre a chance de lesão coronariana ≥ 50% para pacientes hipertensos e a chance correspondente para pacientes com as mesmas características (de sexo e de idade) não hipertensos.

Usando-se o pacote ACD e a função `funlinWLS()`, as estimativas dos parâmetros obtidas por máxima verossimilhança (com erros padrões entre parênteses) são: $\hat{\alpha} = -0,91(0,15)$, $\hat{\beta} = 1,23(0,13)$, $\hat{\gamma} = 0,67(0,12)$, $\hat{\delta} = 0,41(0,12)$. Um intervalo de confiança aproximado com coeficiente de confiança de 95% correspondente à chance de lesão coronariana ≥ 50% para mulheres não hipertensas com menos de 55 anos pode ser obtido por meio

Tabela 6.11: Estimativas (e intervalos de confiança de 95%) para a chance e razões de chances associadas aos dados da Tabela 6.10

| | Estimativa | Limite inferior | Limite superior |
|--|------------|-----------------|-----------------|
| Chance de lesão $\geq 50\%$ mulheres < 55 não hipertensas | 0,40 | 0,30 | 0,54 |
| Razão de chances para sexo masculino | 3,43 | 2,69 | 4,38 |
| Razão de chances para idade ≥ 55 | 1,95 | 1,55 | 2,48 |
| Razão de chances para hipertensão | 1,51 | 1,20 | 1,89 |

Tabela 6.12: Estimativas das chances de lesão coronariana para $\geq 50\%$ para pacientes com diferentes níveis dos fatores de risco obtidas com os dados da Tabela 6.10

| Sexo | Idade | Hipertensão | Chance (lesão $\geq 50\%$)/(lesão $< 50\%$) |
|------|-----------|-------------|--|
| Fem | < 55 | sem | R |
| Fem | < 55 | com | $R \times 1,51$ |
| Fem | ≥ 55 | sem | $R \times 1,95$ |
| Fem | ≥ 55 | com | $R \times 1,51 \times 1,95$ |
| Masc | < 55 | sem | $R \times 3,43$ |
| Masc | < 55 | com | $R \times 3,43 \times 1,51$ |
| Masc | ≥ 55 | sem | $R \times 3,43 \times 1,95$ |
| Masc | ≥ 55 | com | $R \times 3,43 \times 1,95 \times 1,51$ |

da exponenciação dos limites de um intervalo de confiança para o parâmetro α ; o mesmo procedimento pode ser empregado para a obtenção de intervalos de confiança para as razões de chances associadas ao sexo, idade e status de hipertensão. Esses intervalos estão dispostos na Tabela 6.11.

Se os 1448 pacientes avaliados no estudo puderem ser considerados como uma amostra aleatória de uma população de interesse, a chance de lesão coronariana $\geq 50\%$ para uma mulher não hipertensa com idade < 55 é de 0,40 [IC(95%) = 0,30 a 0,54]. Independentemente dessa suposição, *i.e.*, mesmo que essa chance tenha um valor R desconhecido, ela fica multiplicada por 3,43 [IC(95%) = 2,69 a 4,38] para homens não hipertensos e de mesma idade, por 1,95 [IC(95%) = 1,55 a 2,48] para mulheres não hipertensas com idade ≥ 55 ou por 1,51 [IC(95%) = 1,20 a 1,89] para mulheres hipertensas com idade < 55 . O modelo ainda permite estimar as chances para pacientes com diferentes níveis dos três fatores, conforme indicado na Tabela 6.12. Quando

o estudo não permite estimar a chance de lesão coronariana $\geq 50\%$ para o grupo de referência (neste caso, mulheres não hipertensas com idade < 55) como em estudos retrospectivos, as razões de chances estimadas continuam válidas. Nesse contexto, por exemplo, a chance de lesão coronariana $\geq 50\%$ para homens hipertensos com idade ≥ 55 é $1,95 \times 1,51$ a chance correspondente para homens não hipertensos com idade < 55 . O cálculo do erro padrão dessa razão de chances depende de uma estimativa da matriz de covariâncias dos estimadores dos parâmetros do modelo e está fora do escopo deste texto. O leitor pode consultar Paulino e Singer (2006) para detalhes.

A avaliação da qualidade do ajuste de modelos de regressão é baseada em resíduos da forma $y_i - \hat{y}_i$ em que y_i é a resposta observada para a i -ésima unidade amostral e \hat{y}_i é o correspondente valor ajustado, *i.e.* predito pelo modelo. Para regressão logística a avaliação do ajuste é mais complexa, pois os resíduos podem ser definidos de diferentes maneiras. Apresentamos alguns detalhes na Nota de Capítulo 7.

6.6 Notas de capítulo

1) Inferência baseada em modelos de regressão linear simples.

Para o modelo (6.1) fizemos a suposição de que os erros são não correlacionados, têm média 0 e variância constante σ^2 . Geralmente, também se supõe que a variável explicativa X seja fixa. Se quisermos testar hipóteses sobre os parâmetros α e β ou construir intervalos de confiança para eles por meio de estatísticas com distribuições exatas, devemos fazer alguma suposição adicional sobre a distribuição dos erros. Usualmente, supõe-se que os e_i têm uma distribuição Normal. Se a distribuição dos erros tiver caudas mais longas (pesadas) do que as da distribuição Normal, os estimadores de mínimos quadrados podem se comportar de forma inadequada e estimadores robustos devem ser usados.

Como

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \sum_{i=1}^n w_i y_i,$$

com $w_i = (x_i - \bar{x}) / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, o estimador $\hat{\beta}$ é uma função linear das observações y_i . O mesmo vale para $\hat{\alpha}$. Utilizando esse resultado, pode-se demonstrar (veja a seção de exercícios) que

- a) $E(\hat{\alpha}) = \alpha$ e $E(\hat{\beta}) = \beta$, ou seja, os EMQ são não enviesados.
- b) $\text{Var}(\hat{\alpha}) = \sigma^2 \sum_{i=1}^n x_i^2 / [n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2]$.
- c) $\text{Var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.
- d) $\text{Cov}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) = -\sigma^2 \bar{x} / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.

Com a suposição adicional de normalidade, pode-se mostrar que

e) $y_i \sim N(\alpha + \beta x_i, \sigma^2)$

f) as estatísticas

$$t_{\hat{\alpha}} = \frac{\hat{\alpha} - \alpha}{S} \sqrt{\frac{n \sum (x_i - \bar{x})^2}{\sum x_i^2}}$$

e

$$t_{\hat{\beta}} = \frac{\hat{\beta} - \beta}{S} \sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2}$$

têm distribuição t de Student com $(n - 2)$ graus de liberdade. Nesse contexto, os resíduos padronizados, definidos em (6.9) também seguem uma distribuição t de Student com $(n - 2)$ graus de liberdade. Daí a denominação alternativa de resíduos studentizados.

Um teorema importante conhecido como **Teorema de Gauss-Markov** (e que não depende da suposição de normalidade dos erros) afirma que os EMQ têm variância mínima na classe dos estimadores não viesados que sejam funções lineares das observações y_i . Com esses resultados é possível testar as hipóteses $H_0 : \alpha = 0$ e $H_0 : \beta = 0$, bem como construir intervalos de confiança para esses parâmetros.

Quando os erros não seguem uma distribuição Normal, mas o tamanho da amostra é suficientemente grande, pode-se mostrar com o auxílio do **Teorema Limite Central** que sob certas condições de regularidade (usualmente satisfeitas na prática), os estimadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ têm distribuições aproximadamente normais com variâncias que podem ser estimadas pelas expressões indicadas nos itens b) e c). Detalhes podem ser obtidos em Sen et al. (2009).

2) Estimação e previsão sob modelos de regressão linear simples.

Um dos objetivos da análise de regressão é fazer previsões sobre a variável resposta com base em valores das variáveis explicativas. Por simplicidade trataremos do caso de regressão linear simples. Uma estimativa para o valor esperado $E(Y|X = x_0)$ da variável resposta Y dado um valor x_0 da variável explicativa é $\hat{y} = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_0$ e com base nos resultados apresentados na Nota de Capítulo 1 pode-se mostrar que a variância de \hat{y} é

$$\text{Var}(\hat{y}) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right].$$

Então os limites superior e inferior para um **intervalo de confiança** aproximado com coeficiente de confiança de 95% para o valor esperado de Y dado $X = x_0$ são

$$\hat{y} \pm 1,96S \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$$

com S^2 denotando uma estimativa de σ^2 . *Grosso modo*, podemos dizer que esse intervalo deve conter o verdadeiro valor esperado de $E(Y|X =$

x), *i.e.*, a média de Y para todas as observações em que $X = x_0$. Isso não significa que esperamos que o intervalo contenha o verdadeiro valor de Y , digamos Y_0 para uma unidade de investigação para a qual $X = x_0$. Nesse caso precisamos levar em conta a variabilidade de $Y|X = x_0$ em torno de seu valor esperado $E(Y|X = x_0)$.

Como $Y_0 = \hat{y} + e_0$ sua variância é

$$\text{Var}(Y_0) = \text{Var}(\hat{y}) + \text{Var}(e_0) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right] + \sigma^2$$

Então os limites superior e inferior de um **intervalo de previsão** (aproximado) para Y_0 são

$$\hat{y} \pm 1,96S \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}.$$

Note que se aumentarmos indefinidamente o tamanho da amostra, a amplitude do intervalo de confiança para o valor esperado tenderá para zero, porém a amplitude do intervalo de previsão correspondente a uma unidade específica tenderá para $2 \times 1,96 \times \sigma$.

3) Coeficiente de determinação.

Consideremos um conjunto de dados pareados $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ de duas variáveis contínuas X e Y . Se não levamos em conta a variável X para explicar a variabilidade da variável Y como no modelo de regressão linear simples, a melhor previsão para Y é \bar{y} e uma estimativa da variância de Y é dada por $S^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 / (n - 1)$. Para relacionar esse resultado com aquele obtido por meio de um modelo de regressão linear para os mesmos dados, podemos escrever

$$y_i - \bar{y} = (y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y}).$$

Uma representação gráfica dessa relação está apresentada na Figura 6.32.

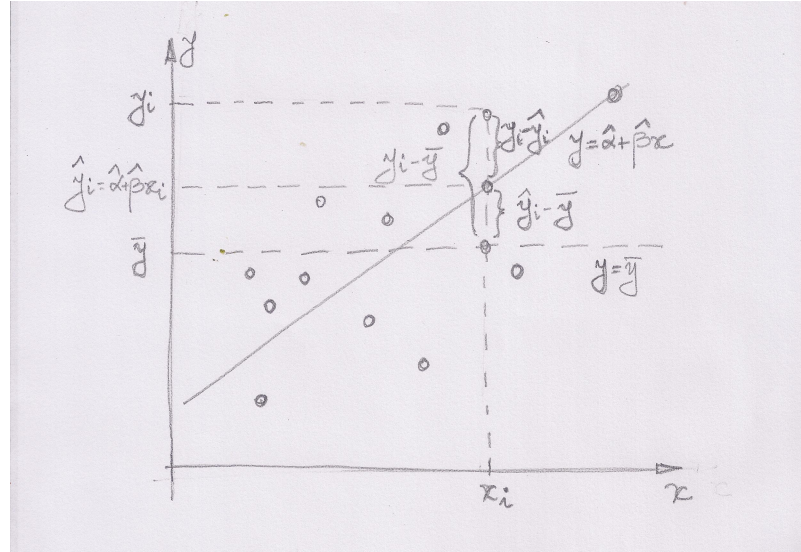


Figura 6.32: Representação gráfica da decomposição da soma de quadrados.

Pode-se mostrar (ver Exercício 15) que

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i^2 + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

ou, de forma abreviada,

$$SQTot = SQRes + SQReg.$$

Esse resultado indica que a soma de quadrados total ($SQTot$) pode ser decomposta num termo correspondente à variabilidade dos resíduos ($SQRes$) e em outro correspondente à regressão ($SQReg$). Quanto maior for esse último termo, maior é a evidência de que a variável X é útil para explicar a variabilidade da variável Y . Tendo em vista a expressão (6.6), é fácil ver que

$$SQReg = \hat{\beta}^2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2.$$

Nesse contexto, a estatística $R^2 = SQReg/SQTot$ corresponde à porcentagem da variabilidade de Y explicada pelo modelo, ou seja, pela introdução da variável X no modelo mais simples, $y_i = \mu + e_i$.

Como a soma de quadrados $SQReg$ (e conseqüentemente, o coeficiente R^2) sempre aumenta quando mais variáveis explicativas são introduzidas no modelo, convém considerar uma penalidade correspondente ao número de variáveis explicativas. Nesse sentido, para comparação de modelos com números diferentes de variáveis explicativas, costuma-se utilizar o coeficiente de determinação ajustado

$$R_{aj}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-p-1} = 1 - \frac{SQRes/(n-p-1)}{SQTot/(n-1)}$$

em que p é o número de variáveis explicativas do modelo. Lembrando que

$$R^2 = 1 - \frac{SQRes}{SQTot} = 1 - \frac{SQRes/n}{SQTot/n},$$

o coeficiente $R_{a_j}^2$ é obtido por meio de um aumento maior no numerador do que no denominador de R^2 , com mais intensidade quanto maior for o número de variáveis explicativas.

4) Distância de Cook.

A distância de Cook é uma estatística que mede a mudança nos valores preditos pelo modelo de regressão quando eliminamos uma das observações. Denotando por $\hat{\mathbf{y}}$ o vetor (de dimensão n) com os valores preditos obtidos do ajuste do modelo baseado nas n observações e por $\hat{\mathbf{y}}^{(-i)}$ o correspondente vetor com valores preditos (de dimensão n) obtido do ajuste do modelo baseado nas $n - 1$ observações restantes após a eliminação da i -ésima, a distância de Cook é definida como

$$D_i = \frac{(\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}^{(-i)})^\top (\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}^{(-i)})}{(p + 1)S}$$

em que p é o número de coeficientes de regressão e S é uma estimativa do desvio padrão. Pode-se mostrar que a distância de Cook (D_i) pode ser calculada sem a necessidade de ajustar o modelo com a omissão da i -ésima observação por meio da expressão

$$D_i = \frac{1}{p + 1} \hat{e}_i^2 \frac{h_{ii}}{(1 - h_{ii})^2}.$$

lembrando que

$$h_{ii} = \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

Para o modelo de regressão linear simples, $p = 2$. Detalhes podem ser obtidos em Kutner et al. (2004).

5) Influência local.

Influência local é o efeito de uma pequena variação no valor da variável resposta nas estimativas dos parâmetros do modelo. Consideremos uma observação (x_j, y_j) e quantifiquemos o efeito de uma mudança de y_j para $y_j + \Delta y_j$ nos valores de $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$. Com esse propósito, observando que

$$\hat{\beta} + \Delta \hat{\beta}(y_j) = \frac{\sum_{i \neq j} (x_i - \bar{x}) y_i + (x_j - \bar{x})(y_j + \Delta y_j)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

podemos concluir que

$$\Delta \hat{\beta}(y_j) = \frac{(x_j - \bar{x}) \Delta y_j}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}. \quad (6.33)$$

Este resultado indica que, fixado Δy_j , a variação em $\hat{\beta}$ é diretamente proporcional a $x_j - \bar{x}$ e inversamente proporcional a $(n - 1)S^2$. Portanto, o efeito da variação no valor de y_j será grande se x_j estiver bastante afastado da média dos x_i e se a variabilidade dos x_i for pequena.

Para o intercepto, temos

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta}\bar{x} = \frac{\sum_i y_i}{n} - \hat{\beta}\bar{x},$$

logo, quando y_j é substituído por $y_j + \Delta y_j$, teremos

$$\hat{\alpha} + \Delta\hat{\alpha}(y_j) = \frac{\sum_{i \neq j} y_i + (y_j + \Delta y_j)}{n} - (\hat{\beta} + \Delta\hat{\beta})\bar{x},$$

e portanto

$$\Delta\hat{\alpha}(y_j) = \frac{\Delta y_j}{n} - (\Delta\hat{\beta})\bar{x},$$

ou ainda

$$\Delta\hat{\alpha}(y_j) = \left[\frac{1}{n} - \frac{\bar{x}(x_j - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} \right] \Delta y_j. \quad (6.34)$$

Se $x_j = \bar{x}$, então $\Delta\hat{\beta} = 0$, mas $\Delta\hat{\alpha} = \Delta y_j/n$, ou seja, Δy_j não afeta a inclinação mas afeta o intercepto. Gráficos de (6.33) e (6.34) em função dos índices de cada observação indicam para que pontos a variação nos valores da variável resposta tem maior influência nas estimativas dos parâmetros.

6) Método Delta.

Considere um parâmetro β para o qual se dispõe de um estimador $\hat{\beta}$ cuja variância é $\sigma_{\hat{\beta}}^2$ e suponha que haja interesse em obter a variância de uma transformação $g(\hat{\beta})$. Por meio de uma expansão de Taylor, pode-se mostrar que

$$\text{Var}[g(\hat{\beta})] = [g'(\hat{\beta})]^2 \sigma_{\hat{\beta}}^2$$

em que $g'(\hat{\beta})$ denota a primeira derivada de g calculada no ponto $\hat{\beta}$. Detalhes podem ser obtidos em Sen et al. (2009).

7) Análise do ajuste de modelos de regressão logística.

Nos casos em que todas as variáveis explicativas utilizadas num modelo de regressão logística são categorizadas, podemos agrupar as respostas y_i segundo os diferentes padrões definidos pelas combinações dos níveis dessas variáveis. Quando o modelo envolve apenas uma variável explicativa dicotômica (Sexo, por exemplo), há apenas dois padrões, nomeadamente, M e F). Se o modelo envolver duas variáveis explicativas dicotômicas (Sexo e Faixa etária com dois níveis, ≤ 40 anos e > 40

anos, por exemplo), estaremos diante de uma situação com quatro padrões, a saber, (F e ≤ 40), (F e > 40), (M e ≤ 40) e (M e > 40). A introdução de uma ou mais variáveis explicativas contínuas no modelo, pode gerar um número de padrões igual ao número de observações.

Consideremos um caso com p variáveis explicativas $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)^\top$ e sejam M o número de padrões (correspondente ao número de valores distintos de \mathbf{x}) e m_j , $j = 1, \dots, M$, o número de observações com o mesmo valor \mathbf{x}_j de \mathbf{x} . Note que no caso mais comum, em que existe pelo menos uma variável contínua, $m_j \approx 1$ e $M \approx n$. Além disso, seja \tilde{y}_j o número de respostas $Y = 1$ entre as m_j unidades amostrais com o mesmo valor \mathbf{x}_j . O valor ajustado \hat{y}_j correspondente a \tilde{y}_j é

$$\hat{y}_j = m_j \hat{p}_j = m_j \frac{\exp(\mathbf{x}_j^\top \hat{\boldsymbol{\beta}})}{1 + \exp(\mathbf{x}_j^\top \hat{\boldsymbol{\beta}})}$$

em que $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ é o estimador do vetor de parâmetros de modelo.

O **resíduo de Pearson** é definido como

$$\hat{e}_j = \frac{\tilde{y}_j - m_j \hat{p}_j}{\sqrt{m_j \hat{p}_j (1 - \hat{p}_j)}}$$

e uma medida resumo para a avaliação do ajuste do modelo é a **estatística de Pearson**

$$Q_p = \sum_{j=1}^M \hat{e}_j^2.$$

Para M suficientemente grande, a estatística Q_P tem distribuição assintótica χ^2 com $M - (p + 1)$ graus de liberdade quando o modelo está bem ajustado.

Para evitar problemas com a distribuição assintótica de Q_P quando $M \approx n$, convém agrupar os dados de alguma forma. Hosmer and Lemeshow (1980) e Lemeshow e Hosmer (1982) sugerem que os dados sejam agrupados segundo percentis das probabilidades \hat{p}_i , $i = 1, \dots, n$ estimadas sob o modelo. Por exemplo, podem-se considerar $g = 10$ grupos, sendo o primeiro formado pelas unidades amostrais com os 10% menores valores das probabilidades estimados (ou seja, aquelas para as quais \hat{p}_i sejam menores os iguais ao primeiro decil; o segundo grupo deve conter as unidades amostrais para as quais \hat{p}_i estejam entre o primeiro e o segundo decil etc. O último grupo conterà as unidades amostrais cujas probabilidades estimadas sejam maiores que o nono decil. Com esse procedimento, cada grupo deverá conter $n_j^* = n/10$ unidades amostrais. A estatística proposta por esses autores é

$$\hat{C} = \sum_{j=1}^g \frac{(o_j - n_j^* \bar{p}_j)^2}{n_j^* \bar{p}_j (1 - \bar{p}_j)}$$

com $o_j = \sum_{i=1}^{c_j} y_i$ denotando o número de respostas $Y = 1$ dentre as unidades amostrais incluídas no j -ésimo grupo (c_j representa o número de padrões de covariáveis encontrados no j -ésimo grupo) e $\bar{p}_j = \sum_{i=1}^{c_j} m_i \hat{p}_i / n_j^*$ denota a média das probabilidades estimadas no j -ésimo grupo. A estatística \hat{C} tem distribuição aproximada χ^2 com $g - 2$ graus de liberdade quando o modelo estiver correto.

Os chamados **resíduos da desviância** (*deviance residuals*) são definidos a partir da logaritmo da função de verossimilhança e também podem ser utilizados com o propósito de avaliar a qualidade do ajuste de modelos de regressão logística. O leitor poderá consultar Hosmer and Lemeshow (2000) para detalhes.

8) Regressão resistente.

Os estimadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ em (6.7) e (6.6) considerados para o ajuste do modelo (6.1) a um conjunto de dados $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$ são baseados em \bar{x}, \bar{y} e nos desvios em relação a essas médias. Esses estimadores podem ser severamente afetados pela presença de observações discrepantes (*outliers*). Como alternativa, podemos considerar modelos de **regressão resistente**, em que os estimadores são baseados em medianas.

Para o ajuste desses modelos, inicialmente, dividimos o conjunto de n pontos em três grupos de tamanhos aproximadamente iguais. Chame-mos esses grupos de E, C e D. Se $n = 3k$, cada grupo terá k pontos. Se $n = 3k + 1$, colocamos k pontos nos grupos E e D e $k + 1$ pontos no grupo C. Finalmente, se $n = 3k + 2$, colocamos $k + 1$ pontos nos grupos E e D e k pontos no grupo C.

Para cada grupo, obtemos um **ponto resumo**, cujas coordenadas são a mediana dos x_i e a mediana dos y_i naquele grupo. Denotemos esses pontos por $(x_E, y_E), (x_C, y_C), (x_D, y_D)$.

Os estimadores resistentes de β e α são dados por

$$b_0 = \frac{y_D - y_E}{x_D - x_E}, \quad (6.35)$$

e

$$a_0 = \frac{1}{3} [(y_E - b_0 x_E) + (y_C - b_0 x_C) + (y_D - b_0 x_D)]. \quad (6.36)$$

Convém notar as diferenças entre b_0 e (6.6) e entre a_0 e (6.7). A correspondente reta resistente ajustada é

$$\tilde{y}_i = a_0 + b_0 x_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.37)$$

Exemplo 6.11 Consideremos novamente os dados da Tabela 6.2 aos quais um modelo de regressão linear simples foi ajustado; tanto o gráfico de dispersão apresentado na Figura 6.7 quanto o gráfico de resíduos (Figura 6.8) revelam um ponto discrepante, (2; 61, 1) que afeta

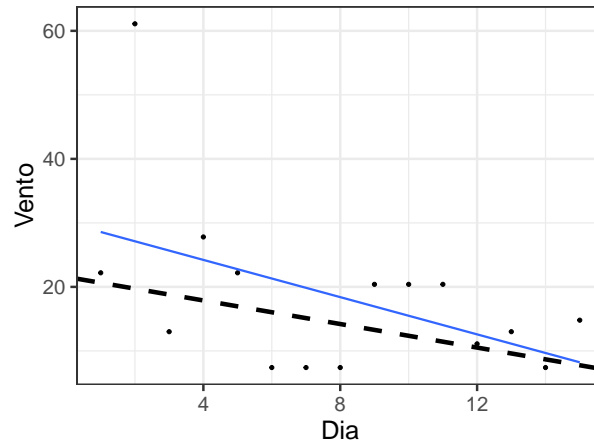


Figura 6.33: Gráfico de dispersão com retas de mínimos quadrados (linha cheia) e resistente (linha tracejada) correspondentes ao ajuste do modelo de regressão linear simples aos dados da Tabela 6.3.

as estimativas dos parâmetros do modelo. O gráfico de dispersão com a reta de mínimos quadrados e com a reta resistente está disposto na Figura 6.33.

Como nesse caso, como $n = 3 \times 5$, consideramos os grupos E, C e D com 5 pontos cada. Os pontos resumo são $(x_E, y_E) = (3, 0; 22, 2)$, $(x_C, y_C) = (8, 0; 7, 4)$ e $(x_D, y_D) = (13, 0; 13, 0)$ e as correspondentes estimativas resistentes são $b_0 = -0,92$ e $a_0^* = 21,56$. Portanto, a reta resistente estimada ou ajustada é

$$\tilde{v}_t = 21,56 - 0,92t. \quad (6.38)$$

Esta reta não é tão afetada pelo ponto discrepante (que não foi eliminado da análise).

6.7 Exercícios

- 1) Considere o modelo

$$y_i = \beta x_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n$$

em que $E(e_i) = 0$ e $\text{Var}(e_i) = \sigma^2$ são erros aleatórios não correlacionados.

- Obtenha o estimador de mínimos quadrados de β e proponha um estimador não enviesado para σ^2 .
 - Especifique a distribuição aproximada do estimador de β .
 - Especifique um intervalo de confiança aproximado para o parâmetro β com coeficiente de confiança γ , $0 < \gamma < 1$.
- 2) Considere o modelo especificado no Exercício 1 e mostre que o parâmetro β corresponde à variação esperada para a variável Y por unidade de variação da variável X .

Sugestão: Subtraia $E(y_i|x_i)$ de $E(y_i|x_i + 1)$.

- 3) Para investigar a associação entre tipo de escola (particular ou pública), cursada por calouros de uma universidade e a média no curso de Cálculo I, obtiveram-se os seguintes dados:

| Escola | Média no curso de Cálculo I | | | | | | | | | |
|------------|-----------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|--|
| Particular | 8,6 | 8,6 | 7,8 | 6,5 | 7,2 | 6,6 | 5,6 | 5,5 | 8,2 | |
| Pública | 5,8 | 7,6 | 8,0 | 6,2 | 7,6 | 6,5 | 5,6 | 5,7 | 5,8 | |

Seja y_i a nota obtida pelo i -ésimo aluno, $x_i = 1$ se o aluno cursou escola particular e $x_i = -1$ se o aluno cursou escola pública, $i = 1, \dots, 18$. Considere o modelo $y_i = \alpha + \beta x_i + e_i$, $i = 1, \dots, 18$ em que os e_i são erros aleatórios não correlacionados com $E(e_i) = 0$ e $Var(e_i) = \sigma^2$.

- i) Interprete os parâmetros α e β .
 - ii) Estime α e β pelo método de mínimos quadrados. Obtenha também uma estimativa de σ^2 .
 - iii) Avalie a qualidade do ajuste do modelo por meio de técnicas de diagnóstico.
 - iv) Construa intervalos de confiança para α e β .
 - v) Com base nas estimativas obtidas no item ii), construa intervalos de confiança para os valores esperados das notas dos alunos das escolas particulares e públicas.
 - vi) Ainda utilizando o modelo proposto, especifique e teste a hipótese de que ambos os valores esperados são iguais.
 - vii) Repita os itens i)-vi) definindo $x_i = 1$ se o aluno cursou escola particular e $x_i = 0$ se o aluno cursou escola pública, $i = 1, \dots, 18$.
- 4) Num estudo realizado na Faculdade de Medicina da Universidade de São Paulo foram colhidos dados de 16 pacientes submetidos a transplante intervivos e em cada um deles obtiveram-se medidas tanto do peso (g) real do lobo direito do fígado quanto de seu volume (cm^3) previsto pré operatorialmente por métodos ultrassonográficos. O objetivo é estimar o peso real por meio do volume previsto. Os dados estão dispostos na Tabela 6.13.
- i) Proponha um modelo de regressão linear simples para analisar os dados e interprete seus parâmetros.
 - ii) Construa um gráfico de dispersão apropriado.
 - iii) Ajuste o modelo e utilize ferramentas de diagnóstico para avaliar a qualidade do ajuste.
 - iv) Construa intervalos de confiança para seus parâmetros.
 - v) Construa uma tabela com intervalos de confiança para o peso esperado do lobo direito do fígado correspondentes a volumes (estimados ultrassonograficamente) de 600, 700, 800, 900 e 1000 cm^3 .
 - vi) Repita os itens anteriores considerando um modelo linear simples sem intercepto. Qual dos dois modelos você acha mais conveniente? Justifique a sua resposta.

Tabela 6.13: Peso (g) real e volume (cm^3) obtido ultrassonograficamente do lobo direito do fígado de pacientes submetidos a transplante

| Volume USG (cm^3) | Peso real (g) | Volume USG (cm^3) | Peso real (g) |
|--------------------------|----------------------|--------------------------|----------------------|
| 656 | 630 | 737 | 705 |
| 692 | 745 | 921 | 955 |
| 588 | 690 | 923 | 990 |
| 799 | 890 | 945 | 725 |
| 766 | 825 | 816 | 840 |
| 800 | 960 | 584 | 640 |
| 693 | 835 | 642 | 740 |
| 602 | 570 | 970 | 945 |

- 5) Os dados da Tabela 6.14 são provenientes de uma pesquisa cujo objetivo é propor um modelo para a relação entre a área construída de um determinado tipo de imóvel e o seu preço.

Tabela 6.14: Área (m^2) e Preço (R\$) de imóveis

| Imóvel | Área (m^2) | Preço (R\$) |
|--------|----------------|-------------|
| 1 | 128 | 10.000 |
| 2 | 125 | 9.000 |
| 3 | 200 | 17.000 |
| 4 | 4.000 | 200.000 |
| 5 | 258 | 25.000 |
| 6 | 360 | 40.000 |
| 7 | 896 | 70.000 |
| 8 | 400 | 25.000 |
| 9 | 352 | 35.000 |
| 10 | 250 | 27.000 |
| 11 | 135 | 11.000 |
| 12 | 6.492 | 120.000 |
| 13 | 1.040 | 35.000 |
| 14 | 3.000 | 300.000 |

- i) Construa um gráfico de dispersão apropriado para o problema.
- ii) Ajuste um modelo de regressão linear simples e avalie a qualidade do ajuste (obtenha estimativas dos parâmetros e de seus erros padrões, calcule o coeficiente de determinação e construa gráficos de resíduos e um gráfico do tipo QQ).
- iii) Ajuste o modelo linearizável (por meio de uma transformação logarítmica)

$$y = \beta x^\gamma e$$

em que y representa o preço e x representa a área e avalie a qualidade do ajuste comparativamente ao modelo linear ajustado no item ii); construa um gráfico de dispersão com os dados transformados.

- iv) Utilizando o modelo com o melhor ajuste, construa intervalos de confiança com coeficiente de confiança (aproximado) de 95% para os preços esperados de imóveis com $200m^2$, $500m^2$ e $1000m^2$.
- 6) Os dados abaixo correspondem ao faturamento de empresas similares de um mesmo setor industrial nos últimos 15 meses.

| mês | jan | fev | mar | abr | mai | jun | jul | ago |
|--------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| vendas | 1,0 | 1,6 | 1,8 | 2,0 | 1,8 | 2,2 | 3,6 | 3,4 |

| mês | set | out | nov | dez | jan | fev | mar |
|--------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| vendas | 3,3 | 3,7 | 4,0 | 6,4 | 5,7 | 6,0 | 6,8 |

Utilize técnicas de análise de regressão para quantificar o crescimento do faturamento de empresas desse setor ao longo do período observado, Com essa finalidade:

- a) Proponha um modelo adequado, interpretando todos os parâmetros e especificando as suposições.
- b) Estime os parâmetros do modelo e apresente os resultados numa linguagem não técnica.
- c) Utilize técnicas de diagnóstico para avaliar o ajuste do modelo.
- 7) A Tabela 6.15 contém dados obtidos de diferentes institutos de pesquisa coletados entre fevereiro de 2008 e março de 2010 e correspondem às porcentagens de eleitores favoráveis a cada um dos dois principais candidatos à presidência do Brasil.
- a) Construa um diagrama de dispersão apropriado, evidenciando os pontos correspondentes a cada um dos candidatos.
- b) Especifique um modelo polinomial de segundo grau, homocedástico, que represente a variação da preferência eleitoral de cada candidato ao longo do tempo.
- c) Ajuste o modelo especificado no item anterior.
- d) Avalie o ajuste do modelo e verifique, por meio de testes de hipóteses adequadas, se ele pode ser simplificado; em caso afirmativo, ajuste o modelo mais simples.
- e) Com base no modelo escolhido, estime a porcentagem esperada de eleitores favoráveis a cada um dos candidatos em 3 de outubro de 2010 e construa um intervalo de confiança para a diferença entre essas porcentagens esperadas.
- f) Faça uma crítica da análise e indique o que poderia ser feito para melhorá-la (mesmo não que não saiba implementar suas sugestões).

Tabela 6.15: Porcentagem de eleitores favoráveis

| Fonte | Data | Dilma | Serra | Fonte | Data | Dilma | Serra |
|--------|------------|-------|-------|--------|------------|-------|-------|
| sensus | 16/02/2008 | 4,5 | 38,2 | sensus | 13/08/2009 | 19 | 39,5 |
| dataf | 27/03/2008 | 3 | 38 | ibope | 04/09/2009 | 14 | 34 |
| sensus | 25/04/2008 | 6,2 | 36,4 | sensus | 14/09/2009 | 21,7 | 31,8 |
| sensus | 19/09/2008 | 8,4 | 38,1 | ibope | 20/11/2009 | 17 | 38 |
| dataf | 28/11/2008 | 8 | 41 | vox | 30/11/2009 | 17 | 39 |
| sensus | 30/11/2008 | 10,4 | 46,5 | vox | 07/12/2009 | 18 | 39 |
| ibope | 12/12/2008 | 5 | 42 | dataf | 14/12/2009 | 23 | 37 |
| sensus | 14/12/2008 | 13,3 | 42,8 | vox | 18/12/2009 | 27 | 34 |
| dataf | 30/01/2009 | 11 | 41 | sensus | 17/01/2010 | 27 | 33,2 |
| sensus | 19/03/2009 | 16,3 | 45,7 | ibope | 29/01/2010 | 25 | 36 |
| dataf | 27/03/2009 | 16 | 38 | dataf | 06/02/2010 | 28 | 32 |
| sensus | 28/05/2009 | 23,5 | 40,4 | ibope | 25/02/2010 | 30 | 35 |
| ibope | 29/05/2009 | 18 | 38 | dataf | 27/03/2010 | 27 | 36 |
| dataf | 01/06/2009 | 17 | 36 | vox | 31/03/2010 | 31 | 34 |

- 8) Uma fábrica de cadeiras dispõe dos seguintes dados sobre sua produção mensal:

| | | | | | | |
|--------------------------------|------|------|------|------|------|------|
| Número de cadeiras produzidas | 105 | 130 | 141 | 159 | 160 | 172 |
| Custos fixos e variáveis (R\$) | 1700 | 1850 | 1872 | 1922 | 1951 | 1970 |

- Proponha um modelo de regressão linear simples para a relação entre o custo e o número de cadeiras produzidas e interprete os parâmetros.
 - Utilize um intervalo de confiança com coeficiente de confiança de 95% para estimar o custo esperado de produção para 200 cadeiras.
 - Admitindo que o preço de venda é de R\$ 20,00 por unidade, qual a menor quantidade de cadeiras que deve ser produzida para que o lucro seja positivo?
- 9) Considere a seguinte reta de regressão ajustada a um conjunto de dados em que se pretendia estimar o volume de certos recipientes a partir de seus diâmetros: $Volumesperado = 7,68 + 0,185Diametro$

Podemos dizer que:

- O volume esperado não pode ser estimado a partir do diâmetro.
 - O coeficiente de correlação linear entre as duas variáveis é nulo.
 - Há um aumento médio de 0,185 unidades no volume com o aumento de uma unidade de diâmetro.
 - O valor estimado do volume é 7,68 unidades para diâmetros iguais a 1 unidade.
- 10) No artigo intitulado “Estimativas do Valor Energético a partir de Características Químicas e Bromatológicas dos Alimentos” (Rev. Bras. Zootec., 30: 1837-1856, 2001) estudou-se a disponibilidade de energia de alimentos considerando os nutrientes digestíveis totais (NDT) e também as análises químicas e metabólicas das dietas. Nele se apresentam os gráficos apresentados nas Figuras 6.34 e 6.35:

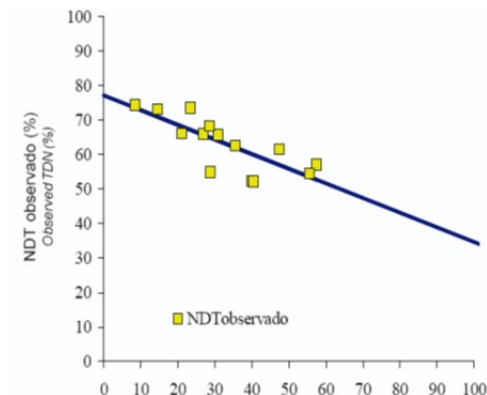


Figura 6.34: Relação entre o NDT e a fibra em detergente ácido (FDA) nas dietas totais. A linha contínua representa a reta obtida pela equação de regressão $NDT=77,13-0,4250FDA$ ($r^2=0,59$; $P<0,01$).

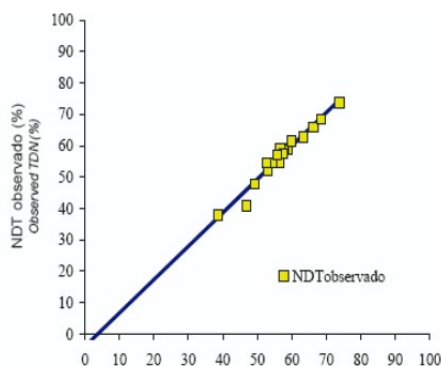


Figura 6.35: Relação entre o NDT e a digestibilidade da matéria seca (DMS) nas dietas totais. A linha contínua representa a reta obtida pela equação de regressão $NDT=3,84+1,064DMS$ ($r^2=0,96$; $P<0,01$).

- a) Qual variável (FDA ou DMS) tem maior correlação linear com o NDT? Justifique.
 - b) Calcule o valor esperado de NDT para porcentagem da digestibilidade da matéria seca igual a 47.
- 11) Para avaliar o efeito da dose de uma certa droga na redução da pressão arterial (PA) o seguinte modelo de regressão foi ajustado a um conjunto de dados:

$$\text{Redução esperada da PA} = 2 + 0.3 \text{ Sexo} + 1.2 (\text{dose} - 10)$$

em que Sexo=0 (Masculino) e Sexo = 1 (Feminino).

Indique a resposta correta:

- a) A redução esperada da PA (mmHg) para uma dose de 20 mg é igual para homens e mulheres.

- b) Com dose de 10 mg, a redução de PA esperada para mulheres é menor do que para homens.
- c) O coeficiente da variável Sexo não poderia ser igual a 0.3.
- d) Uma dose de 20 mg reduz a PA esperada para homens de 12 mmHg
- e) Nenhuma das anteriores.
- 12) O gráfico QQ da Figura 6.7 corresponde ao ajuste de um modelo de regressão linear múltipla.

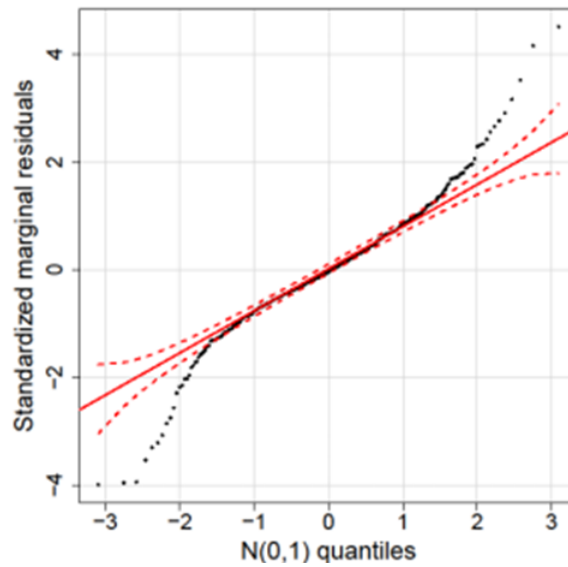


Figura 6.36: Gráfico QQ correspondente ajuste de um modelo de regressão linear múltipla.

Pode-se afirmar que:

- a) Há indicações de que a distribuição dos erros é Normal.
- b) Há evidências de que a distribuição dos erros é assimétrica.
- c) Há evidências de que a distribuição dos erros tem caudas mais leves do que aquelas da distribuição Normal.
- d) Há evidências de que a distribuição dos erros tem caudas mais pesadas que aquelas da distribuição Normal.
- e) Nenhuma das anteriores.
- 13) Para o Exemplo 6.2, use a função `lm()` do R para ajustar o modelo contendo termo quadrático e cúbico.
- 14) Obtenha o modelo ajustado para o Exemplo 6.3, usando a função `lm()` e avalie a qualidade do ajuste utilizando todas as técnicas de diagnóstico discutidas neste capítulo.
- 15) Mostre que $SQTot = SQRes + SQReg$.
- 16) Os dados disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/profilaxia.xls> são provenientes de um estudo realizado na Faculdade de Odontologia da Universidade de São Paulo para avaliar o efeito do uso contínuo de uma solução para bochecho no pH da placa bacteriana dentária. O pH

da placa dentária retirada de 21 voluntários antes e depois de um período de uso de uma solução para bochecho foi avaliado ao longo de 60 minutos após a adição de sacarose ao meio em que as unidades experimentais foram colocadas.

- a) Construa um gráfico de perfis para os dados obtidos antes do período de uso da solução para bochecho. Obtenha a matriz de covariâncias bem como o gráfico do desenhista correspondente.
 - b) Concretize as solicitações do item a) para os dados obtidos após a utilização da solução para bochecho.
 - c) Construa gráficos de perfis médios para os dados obtidos antes e depois da utilização da solução para bochecho colocando-os no mesmo painel.
 - d) Com base nos resultados dos itens a)-c), proponha um modelo de regressão polinomial que permita a comparação dos parâmetros correspondentes.
- 17) Os dados disponíveis em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/esforco.xls> são oriundos de um estudo realizado na Faculdade de Medicina da Universidade de São Paulo para avaliar pacientes com insuficiência cardíaca. Foram estudados 87 pacientes com algum nível de insuficiência cardíaca avaliada pelo critério NYHA, além de 40 pacientes controle (coluna K). Para cada paciente foram registradas algumas características físicas (altura, peso, superfície corporal, idade, sexo). Eles foram submetidos a um teste de esforço cardiopulmonar em cicloergômetro em que foram medidos a frequência cardíaca, o consumo de oxigênio, o equivalente ventilatório de oxigênio, o equivalente ventilatório de dióxido de carbono, o pulso de oxigênio e a pressão parcial de dióxido de carbono ao final da expiração, em três momentos diferentes: no limiar anaeróbico, no ponto de compensação respiratória e no pico do exercício.

Ajuste um modelo linear tendo como variável resposta o consumo de oxigênio no pico do exercício (coluna AW) e como variáveis explicativas a carga na esteira ergométrica (coluna AU), a classificação NYHA (coluna K) além de frequência cardíaca (coluna AV), razão de troca respiratória (coluna AX), peso (coluna H), sexo (coluna D) e idade (coluna F). Com essa finalidade, você deve:

- a) Construir gráficos de dispersão convenientes.
 - b) Interpretar os diferentes parâmetros do modelo.
 - c) Estimar os parâmetros do modelo e apresentar os respectivos erros padrões.
 - d) Avaliar a qualidade de ajuste do modelo por meio de gráficos de diagnóstico (resíduos, QQ, distância de Cook, etc).
 - e) Identificar as variáveis significativas.
 - f) Reajustar o modelo com base nas conclusões do item (e) e avaliar o seu ajuste.
 - g) Apresentar conclusões evitando jargão técnico.
- 18) Para estudar a associação entre gênero (1=Masc, 0=Fem) e idade (anos) e a preferência (1=sim, 0=não) pelo refrigerante Kcola, o seguinte modelo de regressão logística foi ajustado aos dados de 50 crianças escolhidas ao acaso:

$$\log \left\{ \frac{\pi_i(x_i, w_i)}{1 - \pi_i(x_i, w_i)} \right\} = \alpha + \beta x_i + \gamma(w_i - 5),$$

em que x_i (w_i) representa o gênero (idade) da i -ésima criança e $\pi_i(x_i, w_i)$ a probabilidade de uma criança do gênero x_i e idade w_i preferir Kcola. As seguintes estimativas para os parâmetros foram obtidas:

| Parâmetro | Estimativa | Erro-padrão | Valor p |
|-----------|------------|-------------|---------|
| α | 0,69 | 0,12 | < 0,01 |
| β | 0,33 | 0,10 | < 0,01 |
| γ | -0,03 | 0,005 | < 0,01 |

- a) Interprete os parâmetros do modelo por intermédio de chances e razões de chances,
 - b) Com as informações acima, estime a razão de chances de preferência por Kcola correspondente à comparação de crianças do mesmo gênero com 10 e 15 anos,
 - c) Construa intervalos de confiança (com coeficiente de confiança aproximado de 95%) para $\exp(\beta)$ e $\exp(\gamma)$ e traduza o resultado em linguagem não técnica,
 - d) Estime a probabilidade de meninos com 15 anos preferirem Kcola.
- 19) Mostre que as expressões (6.29) e (6.30) são equivalentes e que garantem que a probabilidade de que $Y = 1$ estará no intervalo $(0, 1)$ independentemente dos valores de α , β e x_i .
 - 20) Mostre que o parâmetro β no modelo (6.29) corresponde ao logaritmo da razão de chances de resposta positiva para pacientes com diferença de uma unidade na variável explicativa.
 - 21) Os dados da Tabela 6.16 contem dados de uma investigação cujo objetivo era estudar a relação entre a duração de diabete e a ocorrência de retinopatia (uma moléstia dos olhos). Ajuste um modelo log-linear para avaliar a intensidade dessa relação.

Sugestão: Considere o ponto médio de cada intervalo como valor da variável explicativa.

Tabela 6.16: Frequências de retinopatia

| Duração da Diabete (anos) | Retinopatia | |
|---------------------------|-------------|-----|
| | Sim | Não |
| 0 - 2 | 17 | 215 |
| 3 - 5 | 26 | 218 |
| 6 - 8 | 39 | 137 |
| 9 - 11 | 27 | 62 |
| 12 - 14 | 35 | 36 |
| 15 - 17 | 37 | 16 |
| 18 - 20 | 26 | 13 |
| 21 - 23 | 23 | 15 |

- 22) Considere os dados dispostos na Tabela 6.17 correspondentes a preços de ações da Telebrás e do índice da Bolsa de Valores de São Paulo (IBV), de 2 de janeiro a 24 de fevereiro de 1995, extraídos do CD-mercado.

Tabela 6.17: Preços de ações da Telebrás e Índice da Bolsa de Valores de São Paulo (2/1/1995 a 24/2/1995)

| Obs | Telebrás | IBV | Obs | Telebrás | IBV |
|-----|----------|-------|-----|----------|-------|
| 1 | 34,99 | 43,19 | 20 | 30,41 | 38,85 |
| 2 | 32,09 | 39,68 | 21 | 31,34 | 39,90 |
| 3 | 32,56 | 40,37 | 22 | 30,78 | 38,98 |
| 4 | 30,31 | 38,27 | 23 | 31,44 | 39,44 |
| 5 | 28,91 | 36,28 | 24 | 30,59 | 38,30 |
| 6 | 26,10 | 32,70 | 25 | 28,63 | 36,37 |
| 7 | 28,25 | 34,99 | 26 | 27,60 | 35,56 |
| 8 | 30,41 | 38,41 | 27 | 26,38 | 34,01 |
| 9 | 32,00 | 41,04 | 28 | 25,26 | 33,08 |
| 10 | 31,25 | 40,56 | 29 | 24,98 | 32,95 |
| 11 | 32,37 | 42,10 | 30 | 24,56 | 31,92 |
| 12 | 30,87 | 40,79 | 31 | 23,02 | 30,69 |
| 13 | 28,63 | 38,09 | 32 | 20,96 | 28,64 |
| 14 | 29,56 | 38,62 | 33 | 22,45 | 30,23 |
| 15 | 28,44 | 37,58 | 34 | 21,61 | 29,62 |
| 16 | 29,28 | 38,40 | 35 | 19,74 | 27,93 |
| 17 | 29,84 | 39,27 | 36 | 20,49 | 28,72 |
| 18 | 28,35 | 37,84 | 37 | 23,02 | 32,17 |
| 19 | 27,32 | 35,81 | 38 | 23,48 | 32,71 |

- a) Construa um gráfico de dispersão para os dados da Tabela 6.17 e identifique um modelo de regressão a ser ajustado aos dados interpretando os seus parâmetros.
- b) Ajuste o modelo identificado no item a) por meio do método de mínimos quadrados e avalie a qualidade de seu ajuste por meio de ferramentas de diagnóstico..

Análise de Sobrevivência

7.1 Introdução

Análise de Sobrevivência lida com situações em que o objetivo é avaliar o tempo decorrido até a ocorrência de um evento, como a morte ou cura de pacientes submetidos a um certo tratamento, a quebra de um equipamento mecânico ou o fechamento de uma conta bancária. Em Engenharia, esse tipo de problema é conhecido sob a denominação de Análise de Confiabilidade.

Nesse contexto, duas características são importantes: a definição do tempo de sobrevivência e do evento, também chamado de **falha**.¹ Nosso objetivo aqui é apresentar os principais conceitos envolvidos nesse tipo de análise. O leitor pode consultar Colosimo e Giolo (2006) ou Lee and Wang (2003) entre outros para uma exposição mais detalhada.

Exemplo 7.1: Num estudo realizado no Instituto de Ciências Biológicas (ICB) da Universidade de São Paulo, o objetivo era verificar se lesões em áreas do sistema nervoso de ratos influenciam o padrão de memória. Com essa finalidade, três grupos de ratos foram submetidos a diferentes tipos de cirurgias, a saber,

GRUPO 1: em que lesões pequenas foram induzidas no giro denteado dorsal (região supostamente envolvida com memória espacial);

GRUPO 2: em que lesões pequenas foram induzidas no giro denteado ventral;

GRUPO 3: (controle) em que apenas o trauma cirúrgico (sem lesões induzidas) foi aplicado.

Após a recuperação da cirurgia, os ratos foram submetidos a um treinamento em que eram deixados em uma piscina de água turva contendo uma plataforma fixa. Se não encontrasse a plataforma em 2 minutos, o rato era conduzido até ela. Após uma semana, mediu-se o tempo até o rato encontrar a plataforma. Nesse estudo, a variável resposta é o tempo até o encontro da plataforma (evento ou falha). A origem do tempo é o instante em que o animal é colocado na piscina.

Um dos problemas encontrados em estudos de sobrevivência é que nem sempre o instante de ocorrência do evento e conseqüentemente, o tempo exato de sobrevivência são conhecidos. Essa característica é conhecida como **censura**. No entanto, sabe-se que o tempo é maior que um determinado valor chamado de **tempo de censura**. Ver Nota de Capítulo 1. No caso de estudos na área de saúde, possíveis razões para censura são

¹Apesar dessa terminologia, falha pode ter tanto uma conotação negativa, como a morte de um paciente, quanto positiva, como a sua cura.

- i) o evento não ocorre antes do fim do estudo;
- ii) há perda de contacto com o paciente durante o estudo;
- iii) o paciente sai do estudo por outros motivos (morte por outra razão/fim do tratamento devido a efeitos colaterais etc.).

No Exemplo 7.1, a censura ocorreu para os animais que não encontraram a plataforma em 2 minutos.

Por esse motivo, a variável resposta de estudos de sobrevivência é definida pelo par (T, δ) em que T é o tempo associado a cada unidade amostral e δ é um indicador de censura, com valor 1 quando ocorre a falha e 0 em caso contrário (censura). Um exemplo de organização de dados dessa natureza está apresentado na Tabela 7.1.

Tabela 7.1: Modelo para organização de dados censurados

| Unidade amostral | Tempo | Censura |
|------------------|-------|---------|
| A | 5.0 | 1 |
| B | 12.0 | 0 |
| C | 3.5 | 0 |
| D | 8.0 | 0 |
| E | 6.0 | 0 |
| F | 3.5 | 1 |

Um esquema indicando a estrutura de dados de sobrevivência está disposto na Figura 7.1. Na Figura 7.2, t_0 e t_c indicam, respectivamente, os instantes de início e término do estudo. Os casos com $\delta = 1$ indicam falhas e aqueles com $\delta = 0$ indicam censuras.

Para caracterizar a variável resposta (que é positiva) usualmente emprega-se a **função de sobrevivência** definida como

$$S(t) = P(T > t) = 1 - P(T \leq t) = 1 - F(t)$$

em que $F(t)$ é a função distribuição acumulada da variável T . Essencialmente, a função de sobrevivência calculada no instante t é a probabilidade de sobrevivência por mais do que t . Uma representação gráfica da função de sobrevivência está apresentada na Figura 7.2. Na prática, como os tempos em que ocorrem falhas são medidos como variáveis discretas, a função de sobrevivência tem o aspecto indicado na Figura 7.3.

Outra função de interesse na análise de dados de sobrevivência é a **função de risco** (*hazard function*) definida como

$$h(t) = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{P(t \leq T < t + dt) | T \geq t}{dt} \approx \frac{P(T = t)}{P(T \geq t)}.$$

Essencialmente, essa função corresponde ao “potencial instantâneo de ocorrência do evento de interesse por unidade de tempo, dado que a falha não ocorreu até o instante t ”, ou seja, “ao risco de ocorrência do evento de interesse no instante t para uma unidade amostral ainda não sujeita ao evento”. Note que $h(t) \geq 0$ e não tem um valor máximo (pode ser infinito). Na prática, essa função dá uma ideia do comportamento da taxa condicional de falha e fornece informação para a escolha de um modelo probabilístico adequado ao fenômeno estudado.

Exemplos de funções de risco com diferentes padrões estão apresentados na Figura 7.4. No painel a), o risco de falha é constante e corresponde ao risco para

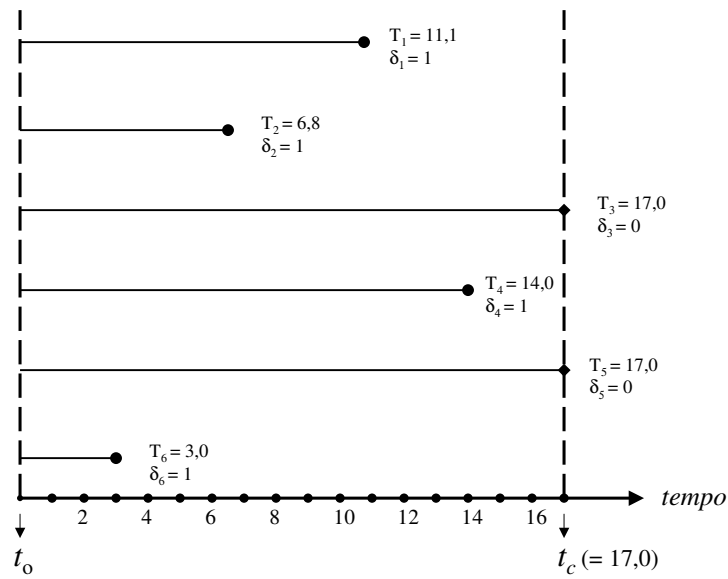


Figura 7.1: Representação esquemática de dados de sobrevivência.

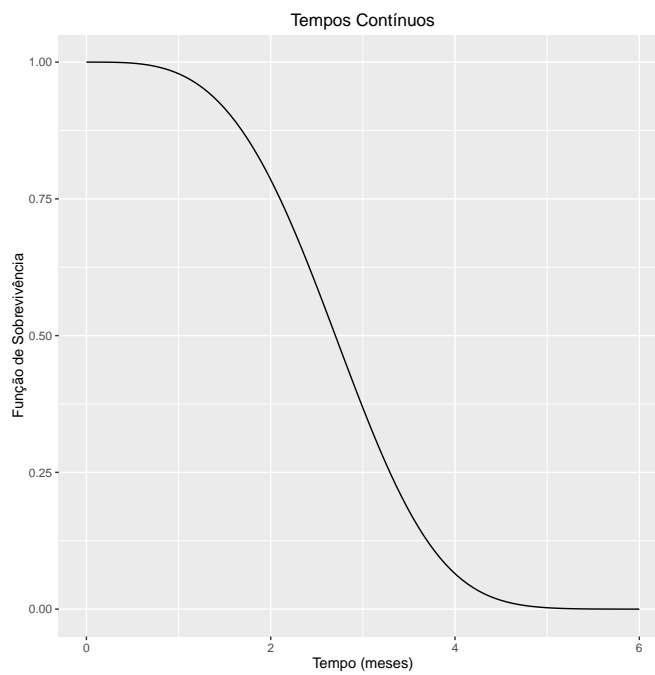


Figura 7.2: Função de sobrevivência teórica.

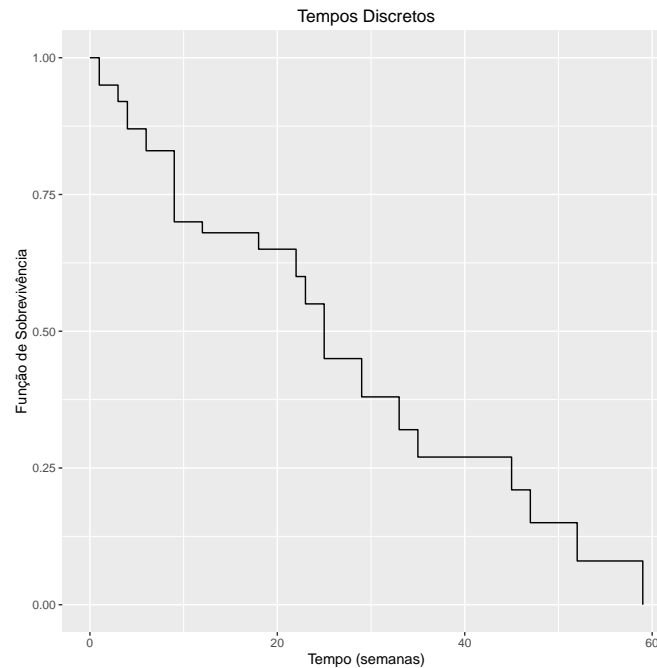


Figura 7.3: Função de sobrevivência observada.

peças sadias, por exemplo; nesse caso, um modelo probabilístico adequado é o **modelo exponencial**. No painel b), o risco de falha cresce com o tempo e usualmente é empregado para representar o risco para pacientes com alguma doença grave; um modelo probabilístico adequado é o **modelo Weibull**. No painel c), o risco de falha decresce com o tempo e usualmente é empregado para representar riscos pós cirúrgicos; um modelo probabilístico adequado nesse caso também é um modelo Weibull. No painel d), inicialmente o risco de falha cresce e posteriormente decresce, sendo adequado para situações em que um tratamento tem um certo tempo para fazer efeito, por exemplo; um modelo probabilístico adequado nesse caso, é o **modelo log normal**.

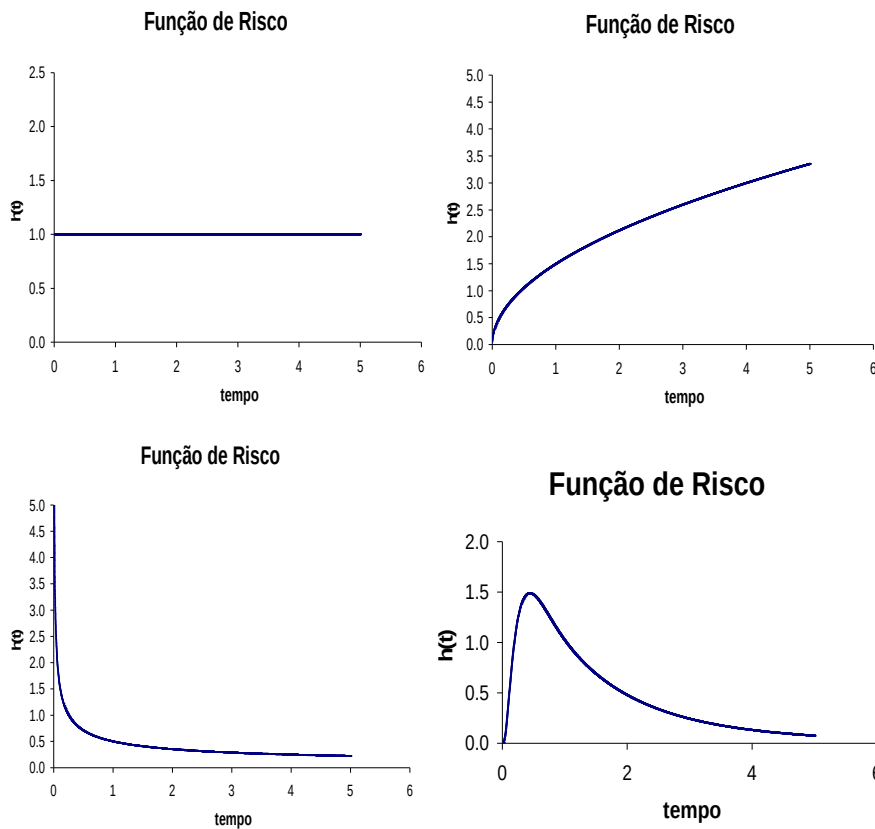


Figura 7.4: Exemplos de funções de risco

As funções de sobrevivência e de risco contêm a mesma informação e cada uma delas pode ser obtida a partir da outra por meio das relações

$$h(t) = -\frac{S'(t)}{S(t)} \text{ e } S(t) = \exp\left[-\int_0^t h(s)ds\right]$$

em que $S'(t)$ indica a derivada de S calculada no instante t .

Os objetivos operacionais da Análise de Sobrevivência são:

- a) estimar e interpretar a função de sobrevivência;
- b) interpretar funções de risco;
- c) comparar funções de sobrevivência (ou funções de risco);
- d) averiguar a contribuição de fatores de interesse (variáveis explicativas) para a ocorrência de falhas.

7.2 Estimação da função de sobrevivência

Para dados não censurados, a função distribuição empírica da variável T é

$$\bar{F}(t) = \frac{\text{número de observações } \leq t}{\text{número de observações}}$$

e conseqüentemente, um estimador da função de sobrevivência é $\hat{S}(t) = 1 - \bar{F}(t)$. Para dados censurados, o **estimador de Kaplan-Meier** também conhecido como **estimador do limite de produtos** é o mais utilizado na prática e é baseado na representação da sobrevivência num instante t como um produto de probabilidades de sobrevivência a intervalos de tempo disjuntos anteriores a t . Consideremos um exemplo em que o tempo até a cura de uma moléstia é medido em dias e que ocorreram falhas nos instantes $t = 2$, $t = 5$ e $t = 8$; a função de sobrevivência calculada no dia 10 (aqui interpretada como a probabilidade de cura após o décimo dia) pode ser calculada a partir de

$$\begin{aligned} S(10) &= P(T > 10) = P(T > 10 \cap T > 8) = P(T > 10|T > 8)P(T > 8) \\ &= P(T > 10|T > 8)P(T > 8|T > 5)P(T > 5) \\ &= P(T > 10|T > 8)P(T > 8|T > 5)P(T > 5|T > 2)P(T > 2). \end{aligned}$$

Lembrando que $t_{(0)} = t_0 = 0$ corresponde ao início do estudo, e que $S(0) = P(T > 0) = 1$, podemos generalizar esse resultado, obtendo

$$S[t_{(j)}] = \prod_{i=1}^j P[T > t_{(i)} | P(T > t_{(i-1)})].$$

Na prática, para a estimação da função de sobrevivência, os instantes $t_{(j)}$ de interesse são aqueles em que ocorreram falhas ou censuras. Definindo $R[t_{(i)}]$ como o número de unidades em risco no instante $t_{(i)}$ e M_i como o número de falhas ocorridas exatamente nesse instante, uma estimativa da probabilidade de que uma unidade sobreviva ao instante $t_{(i)}$ é

$$P(T > t_{(i)}) = \{R[t_{(i)}] - M_i\} / R[t_{(i)}] = 1 - M_i / R[t_{(i)}].$$

Nesse contexto, o estimador de Kaplan-Meier é definido como

$$\hat{S}(t) = 1 \text{ se } t < t_{(1)}$$

ou

$$\hat{S}(t) = \prod_{t_{(i)} < t} \{1 - M_i / R[t_{(i)}]\} \text{ se } t_{(i)} < t.$$

A variância desse estimador pode ser estimada como

$$\text{Var}[\hat{S}(t)] = [\hat{S}(t)]^2 \sum_{t_{(i)} < t} \frac{M_i}{R[t_{(i)}]\{R[t_{(i)}] - M_i\}}$$

Exemplo 7.2: Consideremos um conjunto de $n = 21$ unidades para as quais os tempos de falhas ou censuras (representadas por +) são 6, 6, 6, 7, 10, 13, 16, 22, 23, 6+, 9+, 10+, 11+, 17+, 19+, 20+, 25+, 32+, 32+, 34+, 35+. Para efeito do cálculo do estimador de Kaplan-Meier, convém dispor os dados no formato da Tabela 7.2.

Tabela 7.2: Formato apropriado para cálculo do estimador de Kaplan-Meier (Exemplo 7.2)

| j | Tempo $t_{(j)}$ | Falhas em $t_{(j)}$ | Censuras em $t_{(j)}$ | Unidades em risco ($R[t_{(j)}]$) | $\widehat{S}[t_{(j)}]$ |
|-----|--------------------|------------------------|--------------------------|---------------------------------------|----------------------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 21 | 1 |
| 1 | 6 | 3 | 1 | 21 | $1 \times 18/21 = 0,86$ |
| 2 | 7 | 1 | 1 | $17 = 21-(3+1)$ | $0,86 \times 16/17 = 0,81$ |
| 3 | 10 | 1 | 2 | $15 = 17-(1+1)$ | $0,81 \times 14/15 = 0,75$ |
| 4 | 13 | 1 | 0 | $12 = 15-(1+2)$ | $0,75 \times 11/12 = 0,69$ |
| 5 | 16 | 1 | 3 | $11 = 12-(1+0)$ | $0,69 \times 10/11 = 0,63$ |
| 6 | 22 | 1 | 0 | $7 = 11-(1+3)$ | $0,63 \times 6/7 = 0,54$ |
| 7 | 23 | 1 | 5 | $6 = 7-(1+0)$ | $0,54 \times 5/6 = 0,45$ |

Um gráfico da função de sobrevivência estimada pelo método de Kaplan-Meier está apresentado na Figura 7.5. Os “saltos” representam as falhas e as cruzes representam as censuras. Esse gráfico pode ser obtido por meio das funções `Surv`, `survfit` e `ggsurvplot` dos pacotes `survival` e `survminer` do repositório R.

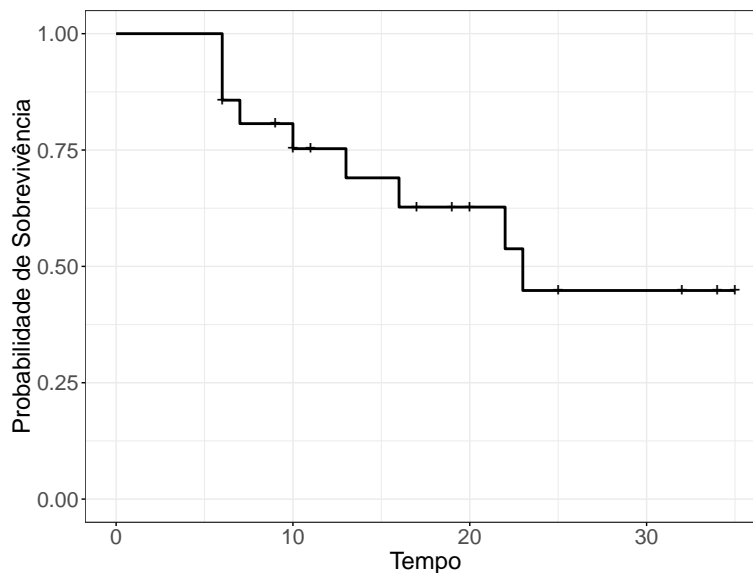


Figura 7.5: Curva de sobrevivência estimada para o Exemplo 7.2.

A área sob a curva baseada no estimador de Kaplan-Meier é um estimador do **tempo médio de acompanhamento** limitado à duração do estudo e definido como

$$\mu = \int_0^{t_c} S(t) dt.$$

Além disso, um estimador do **tempo mediano de sobrevivência** é

$$T_{med} = \{\inf t : S(t) \leq 0.5\}$$

ou seja, é o menor valor de t para o qual o valor da função de sobrevivência é menor ou igual a 0,5. De uma forma mais geral, um estimador do p -ésimo quantil ($0 < p < 1$) do tempo de sobrevivência é $T_p = \{\inf t : S(t) \leq 1 - p\}$. Para o Exemplo 7.2, o tempo médio de acompanhamento é 23,29 (com erro padrão 2,83) e o tempo mediano de sobrevivência é 23,00 (com erro padrão 5,26).

Estimativas para as curvas de sobrevivência referentes ao Exemplo 7.1 estão dispostas na Figura 7.6 e estatísticas daí decorrentes, na Tabela 7.3

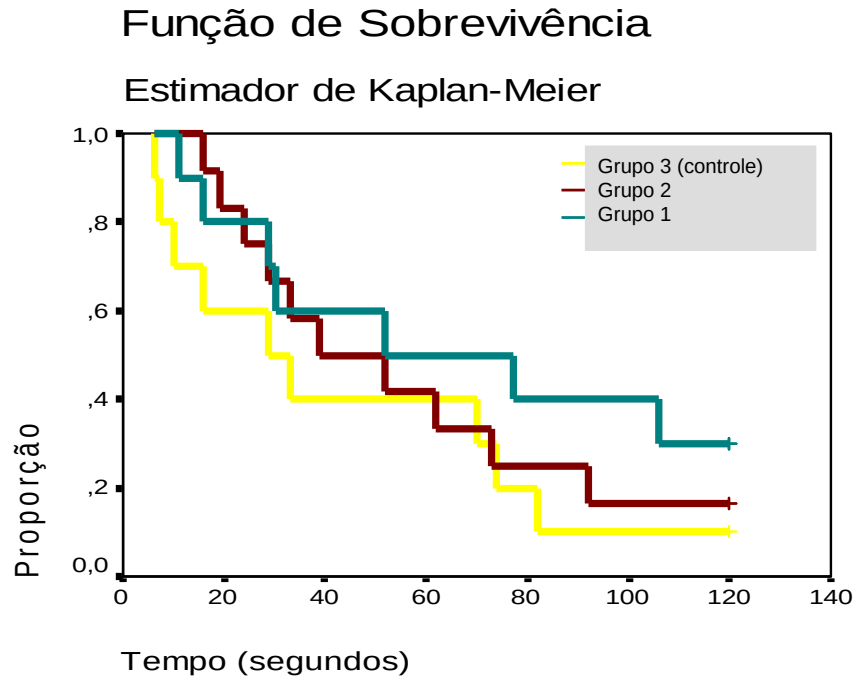


Figura 7.6: Curva de sobrevivência estimada para o Exemplo 7.1.

Tabela 7.3: Estatísticas descritivas com erros padrões entre parênteses (Exemplo 7.1)

| Tratamento | Censuras | Tempo Médio | Primeiro Quartil | Tempo Mediano | Terceiro Quartil |
|------------|----------|-------------|------------------|---------------|------------------|
| Grupo 1 | 30% | 68,1 (13,7) | - | 52,0 (37,2) | 29,0 (18,8) |
| Grupo 2 | 17% | 56,6 (10,3) | 73,0 (22,5) | 39,0 (16,5) | 24,0 (7,5) |
| Grupo 3 | 10% | 44,7 (11,8) | 74,0 (5,1) | 29,0 (13,4) | 10,0 (4,4) |

Em muitos casos, os arquivos com dados de sobrevivência contêm as datas de início do estudo e ocorrência do evento de interesse ou de censura e essas datas precisam ser transformadas em intervalos de tempo.

Exemplo 7.3: Os dados disponíveis no CD-hiv forma obtidos de um estudo cujo objetivo era avaliar o efeito do uso de drogas intravenosas no tempo de sobrevivência de pacientes HIV positivos e têm o formato indicado na Tabela 7.4.

Tabela 7.4: Formato dos dados correspondentes ao Exemplo 7.3

| ident | datainicio | datafim | idade | droga | delta |
|-------|------------|---------|-------|-------|-------|
| 1 | 15mai90 | 14out90 | 46 | 0 | 1 |
| 2 | 19set89 | 20mar90 | 35 | 1 | 0 |
| 3 | 21abr91 | 20dez91 | 30 | 1 | 1 |
| 4 | 03jan91 | 04abr91 | 30 | 1 | 1 |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 98 | 02abr90 | 01abr95 | 29 | 0 | 0 |
| 99 | 01mai91 | 30jun91 | 35 | 1 | 0 |
| 100 | 11mai89 | 10jun89 | 34 | 1 | 1 |

Nesse exemplo, a variável $\text{delta} = 1$ indica a ocorrência do evento e $\text{delta} = 0$, uma censura.

No exemplo, a primeira dificuldade é ler as datas no formato indicado utilizando alguma função do repositório R. Uma sugestão é utilizar o comando *find/replace* ou equivalente na própria planilha em que os dados estão disponíveis e substituir **jan** por **/01/**, por exemplo. Em seguida pode-se utilizar a função *as.Date* para transformar as datas no formato **dd/mm/aa** no número de dias desde 01 de janeiro de 1970, com datas anteriores assumindo valores negativos. Consequentemente, o intervalo de tempo entre as datas de início do estudo e aquela de ocorrência do evento ou de censura pode ser calculada por diferença, deixando os dados no formato indicado na Tabela 7.1. A partir daí podem-se utilizar as mesmas funções empregadas para análise dos dados do Exemplo 7.2 para gerar as curvas de Kaplan-Meier dispostas na Figura 7.7.

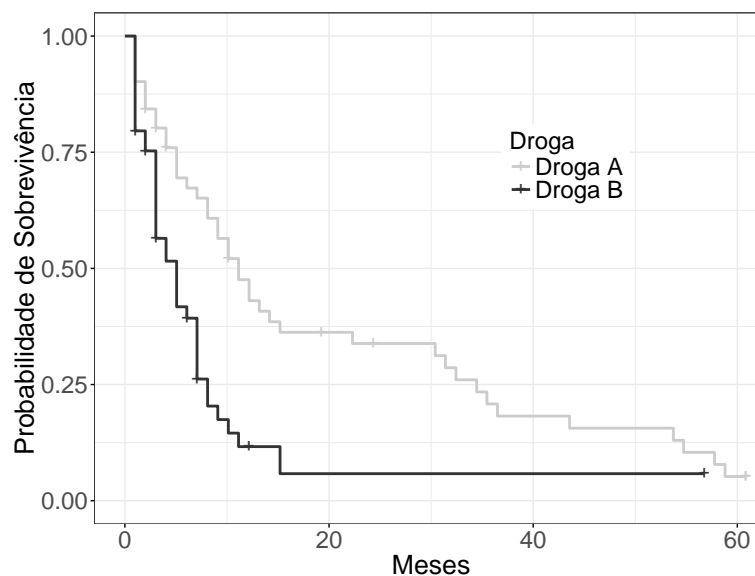


Figura 7.7: Curvas de sobrevivência estimadas para o Exemplo 7.3.

7.3 Comparação de curvas de sobrevivência

Um dos problemas oriundos de estudos como aquele descrito no Exemplo 7.1 é a comparação das curvas de sobrevivência associadas aos tratamentos. Para efeito didático, simplifiquemos o problema, restringindo-nos à comparação das curvas de sobrevivência de dois grupos. Essencialmente, queremos saber se, com base nas curvas de Kaplan-Meier, $\hat{S}_1(t)$ e $\hat{S}_2(t)$ obtidas de uma amostra podemos concluir que as curvas de sobrevivência $S_1(t)$ e $S_2(t)$, associadas às populações de onde a amostra foi selecionada, são iguais. Uma alternativa disponível para esse propósito é o teste *log rank*, baseado na comparação de valores esperados e observados.

Sejam $t_j, j = 1, \dots, J$ os tempos em que ocorreram falhas em qualquer dos dois grupos. Para cada um desses tempos, sejam R_{1j} e R_{2j} os números de unidades em risco nos grupos 1 e 2, respectivamente e seja $R_j = R_{1j} + R_{2j}$. Similarmente, sejam O_{1j} e O_{2j} , respectivamente, os números de falhas nos grupos 1 e 2 no tempo t_j e seja $O_j = O_{1j} + O_{2j}$. Dado o número de falhas (em ambos os grupos) ocorridas no tempo t_j é O_j , a estatística O_{1j} tem uma distribuição hipergeométrica quando a hipótese de igualdade das funções de sobrevivência é verdadeira. Sob essas condições, o valor esperado e a variância de O_{1j} são, respectivamente,

$$E(O_{1j}) = E_{1j} = O_{1j} \frac{O_j}{R_j} \quad \text{e} \quad \text{Var}(O_{1j}) = V_j = \frac{O_j(R_{1j}/R_j)(R_j - O_j)}{R_j - 1}.$$

A estatística *log rank* de teste,

$$LR = \frac{\sum_{j=1}^J [O_{1j} - E_{1j}]^2}{\sum_{j=1}^J V_j}$$

tem uma distribuição aproximada χ_1^2 (qui quadrado com um grau de liberdade) sob a hipótese nula.

Extensões desse teste para a comparação de três ou mais curvas de sobrevivência assim como outros testes construídos para os mesmos propósitos podem ser encontrados nas referências citadas no início deste capítulo.

7.4 Regressão para dados de sobrevivência

Problemas em que o objetivo é avaliar o efeito de variáveis explicativas na distribuição do tempo de falhas (sobrevivência) são similares àqueles tratados no Capítulo 6 com a diferença de que a variável resposta (tempo) só pode assumir valores positivos. A distribuição adotada deve ser escolhida entre aquelas que têm essa característica como as distribuições exponencial, Weibull, log normal ou Birnbaum-Saunders entre outras. Modelos nessa classe são chamados **modelos paramétricos** e geralmente são expressos na forma do **modelo de tempo de falha acelerado** (*accelerated failure time models*),

$$\log(T) = \alpha + \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\beta} + \sigma e$$

em que α e $\boldsymbol{\beta}$ são parâmetros, \mathbf{x} é um vetor com valores de variáveis explicativas, $\sigma > 0$ é uma constante conhecida e e é um erro aleatório com distribuição de forma conhecida. Com uma única variável explicativa dicotômica com valores 0 ou 1, o modelo é

$$\log(T) = \alpha + \beta x + \sigma e.$$

O tempo de falha para uma unidade com $x = 0$ é $T_0 = \exp(\alpha + \sigma e)$; para uma unidade com $x = 1$, o tempo de falha é $T_1 = \exp(\alpha + \beta + \sigma e)$. Então, se $\beta > 0$,

teremos $T_1 > T_0$; por outro lado, se $\beta < 0$, teremos $T_1 < T_0$ o que implica que a covariável x **acelera** ou **desacelera** o tempo de falha. A relação entre algumas distribuições para T e $\log(T)$ está indicada na Tabela 7.5.

Tabela 7.5: Relação entre algumas distribuições para T e $\log(T)$

| Distribuição de | |
|-----------------|------------------|
| T | $\log(T)$ |
| exponencial | Valores extremos |
| Weibul | Valores extremos |
| log logística | logística |
| log normal | normal |

Esses modelos podem ser ajustados por meio do método da máxima verossimilhança. Mais detalhes podem ser obtidos nas referências citadas no início do capítulo.

Uma alternativa são os **modelos semiparamétricos** em que se destaca o **modelo de riscos proporcionais** (*proportional hazards model*) também conhecidos como **modelos de regressão de Cox** e expressos como

$$h(t|\mathbf{X} = \mathbf{x}) = h_0(t) \exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$$

em que $h_0(t)$ representa a função de risco basal, textiti.e., para $\mathbf{X} = \mathbf{0}$ e $\exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$ é a função de risco relativo com parâmetros $\boldsymbol{\beta}$ e cujo valor no ponto \mathbf{x} corresponde ao quociente entre o risco de falha para uma unidade com variáveis explicativas iguais a \mathbf{x} e o o risco de falha para uma unidade com variáveis explicativas iguais a $\mathbf{0}$.

Essa classe de modelos é uma das mais utilizadas na análise de dados de sobrevivência e tem as seguintes vantagens

- i) não requer a especificação da forma da função de risco;
- ii) os resultados obtidos por meio da formulação mais simples (com apenas dois grupos) são equivalentes àqueles obtidos com o teste *log rank*;
- iii) permite a avaliação de várias variáveis explicativas simultaneamente.

Consideremos um estudo em que pacientes com as mesmas características são submetidos de forma aleatória a dois tratamentos: placebo ($x = 0$) e ativo ($x = 1$). Então, sob o modelo de Cox temos:

$$\frac{h(t|x = 1)}{h(t|x = 0)} = \frac{h_0(t) \exp(\alpha + \beta)}{h_0(t) \exp(\alpha)} = \exp(\beta)$$

indicando que para qualquer valor de t o risco relativo de falha é constante. Daí a denominação de riscos proporcionais. Por essa razão, o modelo de Cox só deve ser considerado nessa situação. Ver Nota de Capítulo 2. Uma ferramenta útil para avaliação dessa suposição é o gráfico das curvas de sobrevivência obtido por intermédio do estimador de Kaplan-Meier. Análise de resíduos também pode ser utilizada com esse propósito.

7.5 Notas de Capítulo

1) Tipos de censura

Três tipos de censura podem ser consideradas em estudos de sobrevivência:

- a) **censura à direita**, para a qual se conhece o instante em que uma característica de interesse (por exemplo, contaminação pelos vírus HIV) ocorreu porém a falha (por exemplo, morte do paciente) não foi observada após a inclusão da unidade no estudo.
 - b) **censura à esquerda**, para a qual não se conhece o instante de ocorrência da característica de interesse porém a falha foi observada após a inclusão da unidade no estudo.
 - c) **censura intervalar**, para a qual não se conhece o instante em que a falha ocorreu, mas sabe-se que ocorreu num intervalo de tempo conhecido.
- 2) Para situações em que os riscos não são proporcionais, algumas alternativas podem ser consideradas para o modelo de Cox, lembrando que não são isentas de dificuldades de interpretação. Entre elas, destacamos
- a) Determinar instantes de tempo em que ocorre mudança no padrão da sobrevivência.
 - b) Ajustar modelos diferentes para intervalos de tempo distintos.
 - c) Refinar o modelo com a inclusão de variáveis explicativas dependentes do tempo.

7.6 Exercícios

- 1) Num estudo realizado no Instituto do Coração da FMUSP, candidatos a transplante foram acompanhados durante o período de espera por um coração. O tempo até o evento de interesse (aqui chamado de tempo de sobrevivência) foi definido como o número de dias decorridos entre a primeira consulta de avaliação e o procedimento cirúrgico. Para detalhes, consulte Pedroso de Lima et al. (2000). Entre possíveis fatores que poderiam influenciar o tempo até o transplante está a presença de insuficiência tricúspide. Para avaliar a importância desse fator, foram construídas curvas de sobrevivência pelo método de Kaplan-Meier e realizada uma análise baseada no modelo de riscos proporcionais de Cox, com ajuste por sexo, idade e etiologia. Os resultados estão indicados na Figura 7.8 e na Tabela 7.6.

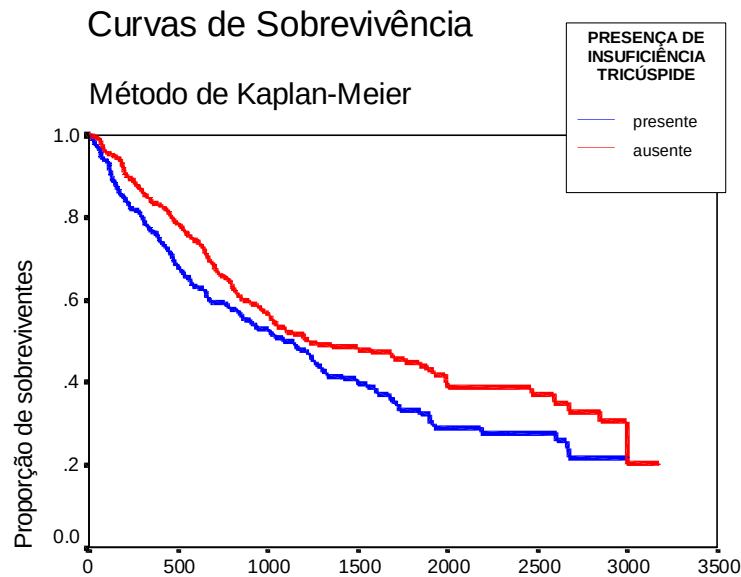


Figura 7.8: Curva de sobrevivência estimada para o estudo de transplante cardíaco

Tabela 7.6: Resultados para a variável explicativa “Insuficiência tricúspide” obtidos por meio do modelo de Cox para o estudo de transplante cardíaco

| Número de casos | Valor p | Risco relativo | Intervalo de confiança (95%) | |
|-----------------|---------|----------------|------------------------------|--------------|
| | | | lim inferior | lim superior |
| 868 | 0,039 | 1,25 | 1,01 | 1,54 |

- a) Estime descritivamente a proporção de pacientes com e sem insuficiência tricúspide cujo tempo até a ocorrência do transplante é de 1500 dias.
 - b) Existem evidências de que a presença de insuficiência tricúspide contribui para um pior prognóstico? Justifique sua resposta.
 - c) Interprete o risco relativo apresentado na Tabela 7.6.
 - d) Qual a razão para se incluir um intervalo de confiança na análise.
- 2) Os dados da Tabela 7.7 foram extraídos de um estudo cuja finalidade era avaliar o efeito da contaminação de um estuário por derramamento de petróleo na fauna local. Cada um de oito grupos de 32 siris (*Calinectes danae*) foi submetido a um tratamento obtido da classificação cruzada dos níveis de dois factores, a saber, Contaminação por petróleo (sim ou não) e Salinidade de aclimação (0.8%, 1.4%, 2.4%, 3.4%). Os animais foram observados por setenta e duas horas e o número de sobreviventes foi registado a cada 12 horas. Detalhes podem ser encontrados em Paulino e Singer (2006).

Tabela 7.7: Dados de sobrevivência de siris

| Grupo | Salinidade | Tempo (horas) | | | | | |
|----------|------------|---------------|----|----|----|-----|-----|
| | | 12 | 24 | 36 | 48 | 60 | 72 |
| Petróleo | 0.8% | 30 | 26 | 20 | 17 | 16 | 15 |
| | 1.4% | 32 | 31 | 31 | 29 | 27 | 22 |
| | 2.4% | 32 | 30 | 29 | 26 | 26 | 21 |
| | 3.4% | 32 | 30 | 29 | 27 | 27 | 21 |
| Controle | 0.8% | 31 | 27 | 25 | 19 | 18 | 18 |
| | 1.4% | 32 | 31 | 31 | 31 | 31 | 30 |
| | 2.4% | 32 | 31 | 31 | 28 | 27 | 26* |
| | 3.4% | 32 | 32 | 30 | 30 | 29* | 28 |

* = um animal foi retirado do estudo

- a) Para cada um dos oito tratamentos, construa tabelas com o formato da Tabela 7.8.

Tabela 7.8: Dados de sobrevivência de siris do grupo Controle submetido à salinidade 3,4% no formato de tabela atuarial

| Intervalo | Em risco | Sobre- vivos | Mortos | Retirados do estudo |
|-----------|----------|-----------------|--------|------------------------|
| 0 - 12 | 32 | 32 | 0 | 0 |
| 12 - 24 | 32 | 32 | 0 | 0 |
| 24 - 36 | 32 | 30 | 2 | 0 |
| 36 - 48 | 30 | 30 | 0 | 0 |
| 48 - 60 | 30 | 29 | 0 | 1 |
| 60 - 72 | 29 | 28 | 1 | 0 |

- b) Construa curvas de sobrevivência obtidas por meio do estimador de Kaplan-Meier.
- c) Utilize testes *log-rank* para avaliar o efeito da contaminação por petróleo e da salinidade na sobrevivência dos siris.
- 3) O arquivo `sondas.xls`, disponível em <http://www.ime.usp.br/~jmsinger/MorettinSinger/sondas.xls> contém dados de pacientes com câncer que recebem um de dois tipos de sondas (protpla e WST) para facilitar o fluxo de fluidos do órgão. Uma possível complicação do uso dessas sondas é que após algum tempo pode ocorrer obstrução. O número de dias até a obstrução (ou censura devido ao término do estudo/óbito - informação dada na coluna evento) é apresentado na coluna rotulada “evento”.
- a) Construa curvas de sobrevivência para pacientes submetidos a cada um dos tipos de sonda. Coloque as curvas em um mesmo gráfico e, a partir delas, obtenha o tempo médio e o tempo mediano para obstrução em cada tipo de sonda. Comente os resultados.
- b) Utilize o teste *log-rank* para comparar as duas curvas.

- c) Defina dois grupos de pacientes com base na idade mediana denotando-os “jovens” e “idosos”. Construa 4 estratos, formados pela combinação dos níveis de idade e tipo de sonda e obtenha as curvas de sobrevivência correspondentes.

PARTE II: APRENDIZADO SUPERVISIONADO

A ideia fundamental do aprendizado supervisionado é utilizar preditores (dados de entrada ou *inputs*) para prever uma ou mais respostas (dados de saída ou *outputs*), que podem ser quantitativas ou qualitativas (categorias, atributos ou fatores). O caso de respostas qualitativas corresponde a problemas de **classificação** e aquele de respostas quantitativas, a problemas de **previsão**. Nos Capítulos 8, 9 e 10, consideramos métodos utilizados para a classificação de unidades de investigação em dois ou mais grupos (cujos elementos são de alguma forma parecidos entre si) com base em preditores. Por exemplo, pode-se querer classificar clientes de um banco como bons ou maus pagadores de um empréstimo com base nos salários, idades, classe social etc. Esses métodos envolvem tanto técnicas clássicas de regressão logística, função discriminante linear, método do vizinho mais próximo, quanto aqueles baseados em árvores e em algoritmos de suporte vetorial (*support vector machines*). O Capítulo 11 é dedicado a problemas de previsão, ou seja, em que se pretende prever o **valor esperado** de uma variável resposta ou o **valor específico** para uma unidade de investigação. Por exemplo, pode haver interesse em prever o saldo médio de clientes de um banco com base salários, idades, classe social etc. A previsão pode ser concretizada seja por meio de técnicas de regressão seja por meio de métodos baseados em árvores e em algoritmos de suporte vetorial.

Uma fronteira de decisão linear (FDL) pode ser uma reta, no caso de duas variáveis, ou, em geral, um hiperplano.

Há diversas maneiras pelas quais FDL podem ser obtidas, dentre as quais destacamos:

- i) Ajuste de modelos de regressão linear para as variáveis indicadoras de grupos. Esta abordagem faz parte de uma classe de métodos que modelam **funções discriminantes** $\delta_k(x)$ para cada classe e classifica x na classe com o maior valor de sua função discriminante. Uma dessas funções é a *função discriminante linear de Fisher*. Veja a Seção 8.3.
- ii) Métodos que modelam a probabilidade a posteriori $P(G = k|X = x)$, em que $G(x)$ é um preditor com valores num conjunto discreto \mathcal{G} . Se essa probabilidade for uma função linear, obteremos uma FDL.
- iii) Outro método popular usa regressão logística, que foi estudada na no Capítulo 6.

Classificação por meio de técnicas clássicas

8.1 Introdução

De modo genérico, vamos designar o preditor por X (que pode ser escalar ou vetor) e a resposta por \mathcal{G} (que indicará um grupo). Os dados (também chamados de **dados de treinamento**) serão indicados por (X_i, g_i) , $i = 1, \dots, n$. A ideia é usar os dados de treinamento para obter agrupamentos cujos elementos sejam de alguma forma parecidos entre si (com base em alguma medida obtida a partir dos preditores) e depois classificar um ou mais novos elementos em um dos grupos. Se tivermos d preditores e uma resposta dicotômica (*i.e.*, dois grupos), um **classificador** é uma função que mapeia um espaço d -dimensional sobre $\{-1, 1\}$.

Formalmente, seja (X, Y) um vetor aleatório, de modo que $X \in \mathbb{R}^d$ e $Y \in \{-1, 1\}$. Então, um classificador é uma função $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \{-1, 1\}$ e a **função erro** ou **risco** é a probabilidade de erro, $L(g) = P\{g(X) \neq Y\}$.

Obtendo-se um estimador de g , digamos \hat{g} , sua acurácia pode ser medida pelo estimador de $L(g)$, chamado de **taxa de erro de treinamento**, que é a proporção de erros gerados pela aplicação de \hat{g} às observações de treinamento, ou seja,

$$\hat{L}(\hat{g}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(y_i \neq \hat{y}_i), \quad (8.1)$$

com $\hat{y}_i = \hat{g}(x_i)$ indicando o rótulo (-1 ou 1) do grupo previsto por meio de \hat{g} . Se $I(y_i \neq \hat{y}_i) = 0$, a i -ésima observação estará classificada corretamente.

Em geral, estaremos mais interessados na **taxa de erro de teste**, associada a um conjunto de observações teste. Denotando por (\mathbf{x}_0, y_0) , os dados de um novo elemento, essa taxa de erro é definida como

$$E[I(y_0 \neq \hat{y}_0)]. \quad (8.2)$$

O classificador ótimo é aquele que minimiza (8.2).

Neste capítulo, utilizaremos técnicas clássicas como regressão logística, o método da função discriminante linear de Fisher e o método do vizinho mais próximo com o objetivo de classificação. Outras técnicas serão consideradas nos capítulos subsequentes.

8.2 Classificação por regressão logística

Juntamente com os modelos de regressão múltipla, os modelos de **regressão logística** estudados no Capítulo 6 estão entre os mais utilizados na análise de dados. Para ilustrá-los, consideremos o seguinte exemplo.

Exemplo 8.1: Os dados da Tabela 8.1 são extraídos de um estudo realizado no Hospital Universitário da Universidade de São Paulo com o objetivo de avaliar se algumas medidas obtidas ultrassonograficamente poderiam ser utilizadas como substitutas de medidas obtidas por métodos de ressonância magnética, considerada como padrão áureo, para avaliação do deslocamento do disco da articulação temporomandibular (doravante referido simplesmente como disco). Distâncias cápsula-côndilo (em mm) com boca aberta ou fechada (referidas, respectivamente, como distância aberta ou fechada no restante do texto) foram obtidas ultrassonograficamente de 104 articulações e o disco correspondente foi classificado como deslocado (1) ou não (0) segundo a avaliação por ressonância magnética. A variável resposta é o *status* do disco (1 = deslocado ou 0 = não). Mais detalhes podem ser obtidos em Elias et al. (2006).

Com intuito didático, voltemos aos dados da Tabela 8.1 e consideremos um modelo logístico para a chance de deslocamento do disco, tendo apenas a distância aberta como variável explicativa. Nesse contexto, o modelo (6.29) corresponde a

$$\log[\theta(x_i; \alpha, \beta)]/[1 - \theta(x_i; \alpha, \beta)] = \alpha + x_i\beta \quad (8.3)$$

$i = 1, \dots, 104$ em que $\theta(x_i; \alpha, \beta)$ representa a probabilidade de deslocamento do disco quando o valor da distância aberta é x_i , α denota o logaritmo da chance de deslocamento do disco quando a distância aberta tem valor $x_i = 0$ e β é interpretado como a variação no logaritmo da chance de deslocamento do disco por unidade de variação da distância aberta. Consequentemente, a razão de chances do deslocamento do disco correspondente a uma diferença de d unidades da distância aberta será $\exp(d \times \beta)$. Como não temos dados correspondentes a distâncias abertas menores que 0,5, convém substituir os valores x_i por valores “centrados”, ou seja por $x_i^* = x_i - x_0$. Uma possível escolha para x_0 é o mínimo de x_i , que é 0,5. Essa transformação na variável explicativa altera somente a interpretação do parâmetro α que passa a ser o logaritmo da chance de deslocamento do disco quando a distância aberta tem valor $x_i = 0,5$.

Usando a função `glm()` obtemos os seguintes resultados:

Call:

```
glm(formula = deslocamento ~ (distanciaAmin), family = binomial,
     data = disco)
```

Deviance Residuals:

| Min | 1Q | Median | 3Q | Max |
|---------|---------|---------|--------|--------|
| -1.5240 | -0.4893 | -0.3100 | 0.1085 | 3.1360 |

Coefficients:

| | Estimate | Std. Error | z value | Pr(> z) |
|---------------|----------|------------|---------|--------------|
| (Intercept) | -5.8593 | 1.1003 | -5.325 | 1.01e-07 *** |
| distanciaAmin | 3.1643 | 0.6556 | 4.827 | 1.39e-06 *** |

Tabela 8.1: Dados de um estudo odontológico

| Dist aberta | Dist fechada | Desloc disco | Dist aberta | Dist fechada | Desloc disco | Dist aberta | Dist fechada | Desloc disco |
|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|
| 2.2 | 1.4 | 0 | 0.9 | 0.8 | 0 | 1.0 | 0.6 | 0 |
| 2.4 | 1.2 | 0 | 1.1 | 0.9 | 0 | 1.6 | 1.3 | 0 |
| 2.6 | 2.0 | 0 | 1.4 | 1.1 | 0 | 4.3 | 2.3 | 1 |
| 3.5 | 1.8 | 1 | 1.6 | 0.8 | 0 | 2.1 | 1.0 | 0 |
| 1.3 | 1.0 | 0 | 2.1 | 1.3 | 0 | 1.6 | 0.9 | 0 |
| 2.8 | 1.1 | 1 | 1.8 | 0.9 | 0 | 2.3 | 1.2 | 0 |
| 1.5 | 1.2 | 0 | 2.4 | 0.9 | 0 | 2.4 | 1.3 | 0 |
| 2.6 | 1.1 | 0 | 2.0 | 2.3 | 0 | 2.0 | 1.1 | 0 |
| 1.2 | 0.6 | 0 | 2.0 | 2.3 | 0 | 1.8 | 1.2 | 0 |
| 1.7 | 1.5 | 0 | 2.4 | 2.9 | 0 | 1.4 | 1.9 | 0 |
| 1.3 | 1.2 | 0 | 2.7 | 2.4 | 1 | 1.5 | 1.3 | 0 |
| 1.2 | 1.0 | 0 | 1.9 | 2.7 | 1 | 2.2 | 1.2 | 0 |
| 4.0 | 2.5 | 1 | 2.4 | 1.3 | 1 | 1.6 | 2.0 | 0 |
| 1.2 | 1.0 | 0 | 2.1 | 0.8 | 1 | 1.5 | 1.1 | 0 |
| 3.1 | 1.7 | 1 | 0.8 | 1.3 | 0 | 1.2 | 0.7 | 0 |
| 2.6 | 0.6 | 1 | 0.8 | 2.0 | 1 | 1.5 | 0.8 | 0 |
| 1.8 | 0.8 | 0 | 0.5 | 0.6 | 0 | 1.8 | 1.1 | 0 |
| 1.2 | 1.0 | 0 | 1.5 | 0.7 | 0 | 2.3 | 1.6 | 1 |
| 1.9 | 1.0 | 0 | 2.9 | 1.6 | 1 | 1.2 | 0.4 | 0 |
| 1.2 | 0.9 | 0 | 1.4 | 1.2 | 0 | 1.0 | 1.1 | 0 |
| 1.7 | 0.9 | 1 | 3.2 | 0.5 | 1 | 2.9 | 2.4 | 1 |
| 1.2 | 0.8 | 0 | 1.2 | 1.2 | 0 | 2.5 | 3.3 | 1 |
| 3.9 | 3.2 | 1 | 2.1 | 1.6 | 1 | 1.4 | 1.1 | 0 |
| 1.7 | 1.1 | 0 | 1.4 | 1.5 | 1 | 1.5 | 1.3 | 0 |
| 1.4 | 1.0 | 0 | 1.5 | 1.4 | 0 | 0.8 | 2.0 | 0 |
| 1.6 | 1.3 | 0 | 1.6 | 1.5 | 0 | 2.0 | 2.1 | 0 |
| 1.3 | 0.5 | 0 | 4.9 | 1.2 | 1 | 3.1 | 2.2 | 1 |
| 1.7 | 0.7 | 0 | 1.1 | 1.1 | 0 | 3.1 | 2.1 | 1 |
| 2.6 | 1.8 | 1 | 2.0 | 1.3 | 1 | 1.7 | 1.2 | 0 |
| 1.5 | 1.5 | 0 | 1.5 | 2.2 | 0 | 1.6 | 0.5 | 0 |
| 1.8 | 1.4 | 0 | 1.7 | 1.0 | 0 | 1.4 | 1.1 | 0 |
| 1.2 | 0.9 | 0 | 1.9 | 1.4 | 0 | 1.6 | 1.0 | 0 |
| 1.9 | 1.0 | 0 | 2.5 | 3.1 | 1 | 2.3 | 1.6 | 1 |
| 2.3 | 1.0 | 0 | 1.4 | 1.5 | 0 | 2.2 | 1.8 | 1 |
| 1.6 | 1.0 | 0 | 2.5 | 1.8 | 1 | | | |

Dist aberta: distância cápsula-côndilo com boca aberta (mm)

Dist fechada: distância cápsula-côndilo com boca fechada (mm)

Desloc disco: deslocamento do disco da articulação temporomandibular (1=sim, 0=não)

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

Null deviance: 123.11 on 103 degrees of freedom

Residual deviance: 71.60 on 102 degrees of freedom

AIC: 75.6

Number of Fisher Scoring iterations: 6

Estimativas (com erros padrões entre parênteses) dos parâmetros desse modelo ajustado por máxima verossimilhança aos dados da Tabela 8.1, são, $\hat{\alpha} = -5,86$ (1,10) e $\hat{\beta} = 3,16$ (0,66) e então, segundo o modelo, uma estimativa da chance de deslocamento do disco para articulações com distância aberta $x = 0,5$ (que corresponde à distância aberta transformada $x^* = 0,0$ é $\exp(-5,86) = 0,003$; um intervalo de confiança (95%) para essa chance pode ser obtido exponenciando os limites (LI e LS) do intervalo para o parâmetro α , nomeadamente,

$$\begin{aligned} LI &= \exp[\hat{\alpha} - 1,96EP(\hat{\alpha})] = \exp(-5,86 - 1,96 \times 1,10) = 0,000 \\ LS &= \exp[\hat{\alpha} + 1,96EP(\hat{\alpha})] = \exp(-5,86 + 1,96 \times 1,10) = 0,025. \end{aligned}$$

Os limites de um intervalo de confiança para a razão de chances correspondentes a um variação de uma unidade no valor da distância aberta podem ser obtidos de maneira similar e são 6,55 e 85,56.

Substituindo os parâmetros α e β por suas estimativas $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ em (8.3) podemos estimar a probabilidade de sucesso (deslocamento do disco, no exemplo sob investigação); por exemplo, para uma articulação cuja distância aberta seja 2,1 (correspondente à distância aberta transformada igual a 1,6), a estimativa dessa probabilidade é

$$\hat{\theta} = \exp(-5,86 + 3,16 \times 1,6) / [1 + \exp(-5,86 + 3,16 \times 1,6)] = 0,31.$$

Lembrando que o objetivo do estudo é substituir o processo de identificação de deslocamento do disco realizado via ressonância magnética por aquele baseado na medida da distância aberta por meio de ultrassonografia, podemos estimar as probabilidades de sucesso para todas as articulações e identificar um **ponto de corte** d_0 segundo o qual, distâncias abertas com valores acima dele sugerem decidirmos pelo deslocamento do disco e distâncias abertas com valores abaixo dele sugerem a decisão oposta. Obviamente, não esperamos que todas as decisões tomadas dessa forma sejam corretas e conseqüentemente, a escolha do ponto de corte deve ser feita com o objetivo de minimizar os erros (decidir pelo deslocamento quando ele não existe ou *vice versa*).

Nesse contexto, um contraste entre as decisões tomadas com base em um determinado ponto de corte d_0 e o padrão áureo definido pela ressonância magnética para todas as 104 articulações pode ser resumido por meio da Tabela 8.2 em que as frequências da diagonal principal correspondem a decisões corretas e aquelas da diagonal secundária às decisões erradas.

O quociente $n_{11}/(n_{11} + n_{21})$ é conhecido como **sensibilidade** do processo de decisão e é uma estimativa da probabilidade de decisões corretas quando o disco está realmente deslocado (ver Seção 4.2 para mais detalhes). O quociente $n_{22}/(n_{12} + n_{22})$ é conhecido como **especificidade** do processo de decisão e é uma estimativa da probabilidade de decisões corretas quando o disco realmente não está deslocado.

Tabela 8.2: Frequência de decisões para um ponto de corte d_0

| | | Deslocamento real do disco | |
|--|-----|----------------------------|----------|
| | | sim | não |
| Decisão baseada na distância aberta d_0 | sim | n_{11} | n_{12} |
| | não | n_{21} | n_{22} |

A situação ideal é aquela em que tanto a sensibilidade quanto a especificidade do processo de decisão são iguais a 100%.

O problema a resolver é determinar o ponto de corte d_{max} que gere o melhor equilíbrio entre sensibilidade e especificidade. Com essa finalidade, podemos construir tabelas com o mesmo formato da Tabela 8.2 para diferentes pontos de corte e um gráfico cartesiano entre a sensibilidade e especificidade obtida de cada uma delas. Esse gráfico, conhecido como **curva ROC** (do termo inglês *Receiver Operating Characteristic*) gerado para os dados da Tabela 8.1 está apresentado na Figura 8.1.

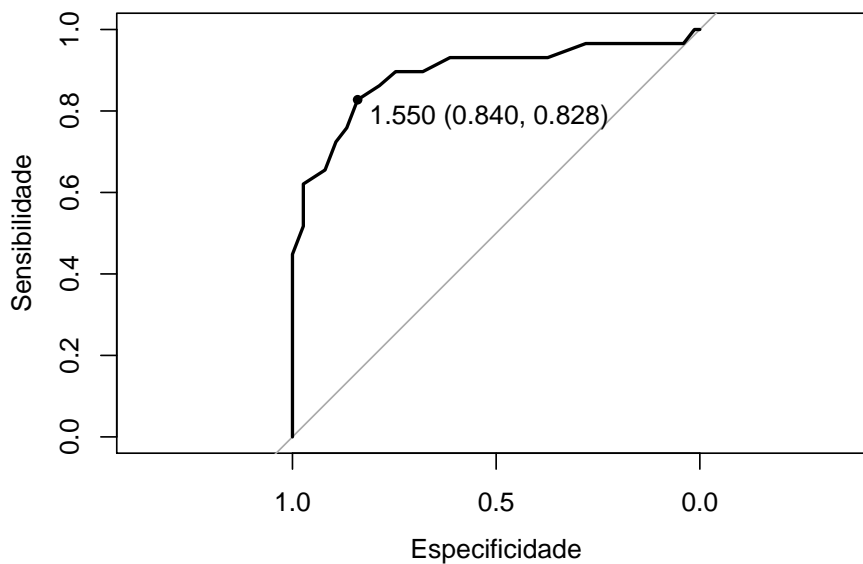


Figura 8.1: Curva ROC para os dados da Tabela 8.1 baseada no modelo (8.3) com distância aberta como variável explicativa.

O ponto de corte ótimo é aquele mais próximo do vértice superior esquerdo (em que tanto a sensibilidade quanto a especificidade seriam iguais a 100%).

Para o exemplo, esse ponto está salientado na Figura 8.1 e corresponde à distância aberta com valor $d_{max} = 2,05 (= 1,55 + 0,5)$. A sensibilidade e a especificidade associadas à decisão baseada nesse ponto de corte, são, respectivamente, 83% e 84% e as frequências de decisões corretas estão indicadas na Tabela 8.3. Com esse procedimento de decisão a porcentagem de acertos (**acurácia**) é 84% [= $(24 + 63)/104$]. A porcentagem de **falsos positivos** é 17% [= $5/(5 + 29)$] e a

Tabela 8.3: Frequência de decisões para um ponto de corte para distância aberta $d_{max} = 2,05$

| | | Deslocamento real do disco | |
|---|-----|----------------------------|-----|
| | | sim | não |
| Decisão baseada na distância aberta $d_{max} = 2,05$ | sim | 24 | 12 |
| | não | 5 | 63 |

porcentagem de **falsos negativos** é 16% [= $12/(12 + 63)$].

Uma análise similar, baseada na distância fechada (transformada por meio da subtração de seu valor mínimo (0,4) gera a curva ROC apresentada na Figura 8.2 e frequências de decisões apresentada na Tabela 8.4.

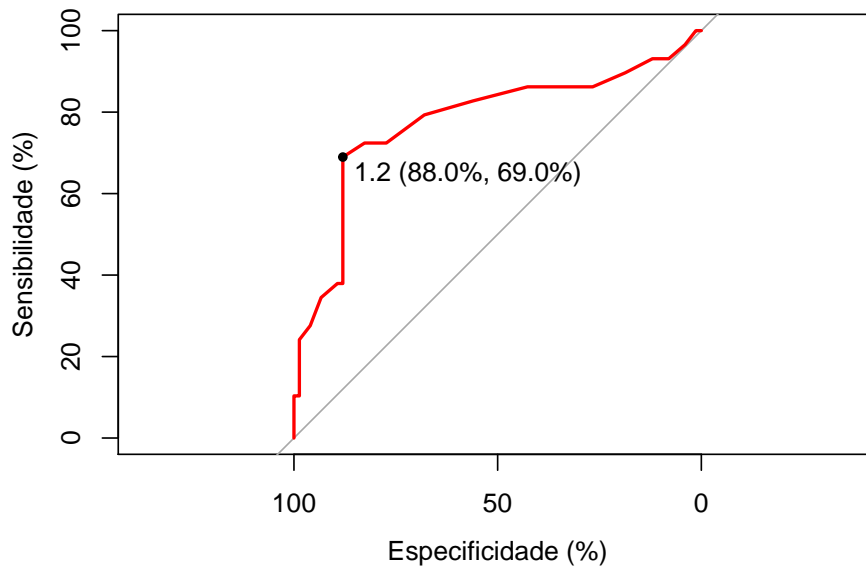


Figura 8.2: Curva ROC para os dados da Tabela 8.1 baseada no modelo (8.3) com distância fechada como variável explicativa.

Tabela 8.4: Frequência de decisões para um ponto de corte para distância fechada $d_{max} = 1,6$

| | | Deslocamento real do disco | |
|---|-----|----------------------------|-----|
| | | sim | não |
| Decisão baseada na distância fechada $d_{max} = 1,6$ | sim | 20 | 9 |
| | não | 9 | 66 |

A acurácia associada a processo de decisão baseado apenas na distância fechada, 83% [= (20 + 66)/104] é praticamente igual àquela obtida com base apenas na distância aberta; no entanto aquele processo apresenta um melhor equilíbrio entre sensibilidade e especificidade (83% e 84%, respectivamente, *versus* 69% e 88%).

Se quisermos avaliar o processo de decisão com base nas observações das distâncias aberta e fechada simultaneamente, podemos considerar o modelo

$$\log[\theta(x_i; \alpha, \beta, \gamma)]/[1 - \theta(x_i; \alpha, \beta, \gamma)] = \alpha + x_i\beta + w_i\gamma \quad (8.4)$$

$i = 1, \dots, 104$ em que w_i corresponde à distância fechada observada na i -ésima articulação. Neste caso, γ corresponde à razão entre a chance de deslocamento do disco para articulações com distância fechada $w + 1$ e a chance de deslocamento do disco para articulações com distância fechada w para aquelas com mesmo valor da distância aberta; uma interpretação similar vale para o parâmetro β . Estimativas dos parâmetros (com erros padrões entre parênteses) do modelo (8.4) obtidas após a transformação das variáveis explicativas segundo o mesmo figurino adotado nas análises univariadas são $\hat{\alpha} = -6,38 (1,19)$, $\hat{\beta} = 2,83 (0,67)$ e $\hat{\gamma} = 0,98 (0,54)$. A estimativa do parâmetro γ é apenas marginalmente significativa, ou seja a inclusão da variável explicativa distância fechada não acrescenta muito poder de discriminação além daquele correspondente à distância aberta. Uma das razões para isso é que as duas variáveis são correlacionadas (com coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,46). A determinação de pontos de corte para modelos com duas ou mais variáveis explicativas é bem mais complexa do que no caso univariado e não será abordada neste texto. Para efeito de comparação com as análises anteriores, as frequências de decisões obtidas com os pontos de corte utilizados naquelas estão dispostas na Tabela 8.5, e correspondem a uma sensibilidade de 62%, especificidade de 97% e acurácia de 88%.

Tabela 8.5: Frequência de decisões correspondentes a pontos de corte $d_{max} = 2,05$ para distância aberta e $d_{max} = 1,6$ para distância fechada

| | | Deslocamento real do disco | |
|--|-----|----------------------------|-----|
| | | sim | não |
| Decisão baseada em ambas as distâncias | sim | 18 | 2 |
| | não | 11 | 73 |

8.3 Função discriminante linear de Fisher

Consideramos o caso de duas classes (ou populações), \mathcal{G}_1 e \mathcal{G}_2 e que pretendemos obter um classificador com base em um vetor de preditores, $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)^\top$ com densidades $f_1(x)$ e $f_2(x)$. A técnica pode ser generalizada para três ou mais classes.

A ideia de Fisher é considerar uma combinação linear $Y = \mathbf{L}^\top \mathbf{X}$, com $\mathbf{L} = (\ell_1, \dots, \ell_p)^\top$ de modo que o conjunto de preditores seja transformado numa variável escalar Y . Sejam μ_{1Y} e μ_{2Y} as médias de Y obtidas dos valores de \mathbf{X} que pertencem a \mathcal{G}_1 e \mathcal{G}_2 , respectivamente. A regra para classificação é: selecione a combinação linear que maximiza a distância ao quadrado entre essas duas médias, relativamente à variabilidade dos valores de Y .

Uma suposição adicional e, às vezes, irrealista, é que as matrizes de covariâncias

$$\Sigma_i = E(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_i)(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_i)^\top, \quad (8.5)$$

$i = 1, 2$, em que $\boldsymbol{\mu}_1 = E(\mathbf{X}|\mathcal{G}_1)$ e $\boldsymbol{\mu}_2 = E(\mathbf{X}|\mathcal{G}_2)$, sejam iguais para as duas classes, isto é, $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma$. Consequentemente,

$$\sigma_Y^2 = \text{Var}(\mathbf{L}^\top \mathbf{X}) = \mathbf{L}^\top \Sigma \mathbf{L},$$

é igual para ambas as populações. Outra suposição comumente adotada é que a resposta classes têm distribuição normal (multivariada). Não é difícil provar que

$$\begin{aligned} \mu_{1Y} &= E(Y|\mathcal{G}_1) = \mathbf{L}^\top \boldsymbol{\mu}_1, \\ \mu_{2Y} &= E(Y|\mathcal{G}_2) = \mathbf{L}^\top \boldsymbol{\mu}_2. \end{aligned}$$

Consideremos a razão

$$\begin{aligned} \frac{(\mu_{1Y} - \mu_{2Y})^2}{\sigma_Y^2} &= \frac{(\mathbf{L}^\top \boldsymbol{\mu}_1 - \mathbf{L}^\top \boldsymbol{\mu}_2)^2}{\mathbf{L}^\top \Sigma \mathbf{L}} \\ &= \frac{\mathbf{L}^\top (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^\top \mathbf{L}}{\mathbf{L}^\top \Sigma \mathbf{L}} \\ &= \frac{(\mathbf{L}^\top \boldsymbol{\delta})^2}{\mathbf{L}^\top \Sigma \mathbf{L}}, \end{aligned} \quad (8.6)$$

em que $\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2$. Pode-se provar que essa razão é maximizada se

$$\mathbf{L} = c \Sigma^{-1} \boldsymbol{\delta} = c \Sigma^{-1} (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2), \quad (8.7)$$

para todo $c \neq 0$. No caso $c = 1$, obtemos a *função discriminante linear de Fisher*

$$Y = \mathbf{L}^\top \mathbf{X} = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^\top \Sigma^{-1} \mathbf{X}. \quad (8.8)$$

O valor máximo da razão (8.7) é $\boldsymbol{\delta}^\top \Sigma^{-1} \boldsymbol{\delta}$.

Consideremos uma nova observação \mathbf{X}_0 e sejam $y_0 = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^\top \Sigma^{-1} \mathbf{X}_0$ e

$$\mu = \frac{\mu_{1Y} + \mu_{2Y}}{2} = \frac{1}{2} (\mathbf{L}^\top \boldsymbol{\mu}_1 + \mathbf{L}^\top \boldsymbol{\mu}_2), \quad (8.9)$$

ou, ainda,

$$\mu = \frac{(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^\top \Sigma^{-1} (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)}{2}, \quad (8.10)$$

ou seja, o ponto médio entre as duas médias univariadas populacionais.

Então (Veja o Exercício 3)

$$E(Y_0|\mathcal{G}_1) - \mu \geq 0, \quad (8.11)$$

$$E(Y_0|\mathcal{G}_2) - \mu < 0. \quad (8.12)$$

e uma **regra de classificação** é

Classifique \mathbf{X}_0 em \mathcal{G}_1 se $y_0 \geq \mu$,

Classifique \mathbf{X}_0 em \mathcal{G}_2 se $y_0 < \mu$.

Normalmente, $\boldsymbol{\mu}_1$, $\boldsymbol{\mu}_2$ e Σ são desconhecidas e têm que ser estimadas a partir de amostras de \mathcal{G}_1 e \mathcal{G}_2 , denotadas por $\mathbf{X}_1 = [\mathbf{x}_{11}, \dots, \mathbf{x}_{1,n_1}]$, uma matriz com dimensão $p \times n_1$ e $\mathbf{X}_2 = [\mathbf{x}_{21}, \dots, \mathbf{x}_{2,n_2}]$, uma matriz com dimensão $p \times n_2$. Obtemos

estimativas $\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \mathbf{S}_1$ e \mathbf{S}_2 , das médias e da matriz de covariâncias comum Σ , para a qual um estimador não enviesado é

$$\mathbf{S}_p = \frac{(n_1 - 1)\mathbf{S}_1 + (n_2 - 1)\mathbf{S}_2}{n_1 + n_2 - 2}. \quad (8.13)$$

A função discriminante estimada é $\widehat{\mathbf{L}}^\top \mathbf{x} = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)^\top \mathbf{S}_p \mathbf{x}$ e a regra de classificação é:

Classifique \mathbf{X}_0 em \mathcal{G}_1 se $y_0 - \widehat{\mu} \geq 0$,

Classifique \mathbf{X}_0 em \mathcal{G}_2 se $y_0 - \widehat{\mu} < 0$,

em que $\widehat{\mu} = \frac{(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)^\top \mathbf{S}_p^{-1} (\bar{\mathbf{x}}_1 + \bar{\mathbf{x}}_2)}{2}$. As demais quantidades, como a razão (8.7), a variância σ_Y^2 etc., são substituídas pelas respectivas estimativas.

Exemplo 8.2. Consideremos o mesmo conjunto de dados do Por meio da função `lda()` do pacote MASS obtemos

Call:

```
lda(resposta ~ difinib, data = inibina)
```

Prior probabilities of groups:

```
negativa positiva
0.40625 0.59375
```

Group means:

```
          difinibina
negativa  49.01385
positiva  202.70158
```

Coefficients of linear discriminants:

```
          LD1
difinibina 0.007050054
```

O resultado indica que $\widehat{\pi}_1 = 0,41$ e $\widehat{\pi}_2 = 0,59$, ou seja 41% das observações correspondem a respostas negativas e 59% a respostas positivas. As médias dos grupos são médias de cada preditor (inibpre e inibpos) em cada classe, usadas como estimativas de μ_1 e μ_2 .

O coeficiente da função discriminante corresponde à combinação linear de `difinib = inibpos - inibpre` que é usada na função de decisão. Ou seja se $0.00705 \times \text{difinib}$ for grande, o classificador preverá uma resposta positiva e se for pequeno, preverá uma resposta negativa.

A função `plot()` produz os gráficos da Figura 8.3, calculando os valores da função discriminante para cada uma das observações.

Por meio da função `table()` obtemos

```
table(lda.class, resposta)
          resposta
lda.class negativa positiva
negativa      0         0
positiva     13        19
```

indicando que a probabilidade de classificação correta é 0,59, inferior ao que foi conseguido com o emprego de regressão logística. Se usarmos as duas variáveis, no lugar da diferença, obteremos o mesmo valor daquele obtido com regressão logística. Veja a seção de exercícios.

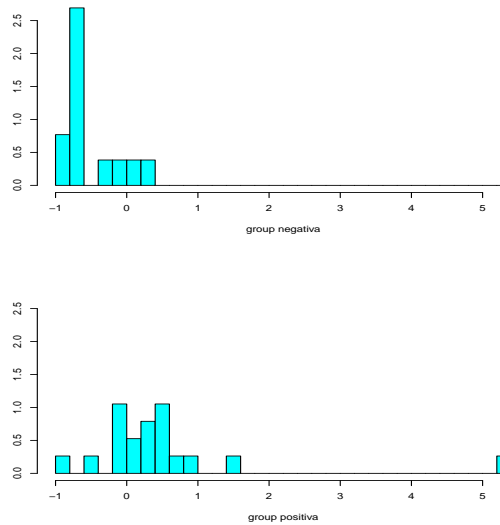


Figura 8.3: Gráficos de classificação para cada grupo

8.4 Classificador bayesiano e vizinho mais próximo

Pode-se mostrar que (8.7) é minimizada por um classificador que associa cada observação à classe mais provável, dados os valores dos preditores. O **classificador de Bayes** associa cada observação de teste com preditor x_0 à classe j de tal sorte que

$$P(Y = j|X = x_0) \quad (8.14)$$

seja a maior possível. No caso de duas classes, a observação será associada à Classe 1 se $P(Y = 1|X = x_0) > 0,5$ e à Classe 2, se $P(Y = 0|X = x_0) < 0,5$. A **fronteira de Bayes** é $P(Y = 1|X = x_0) = 0,5$.

O classificador de Bayes produz a menor taxa de erro de teste possível, dada por $1 - \max_j P(Y = j|X = x_0)$. A **taxa de erro de Bayes global** é $1 - E(\max_j P(Y = j|X))$, obtida com base na média de todas as taxas de erro sobre todos os valores possíveis de j .

Contudo, obter o classificador de Bayes na prática é impossível, pois, para dados reais, não conhecemos a distribuição condicional de Y , dado X . Podemos estimar essa probabilidade condicional, usando um método chamado de **K -ésimo vizinho mais próximo** (*K-nearest neighbor*, KNN). O algoritmo associado a esse método é :

- i) Fixe K e uma observação teste x_0 ;
- ii) Identifique K pontos do conjunto de treinamento que sejam os mais próximas de x_0 segundo alguma medida de distância; denote esse conjunto por \mathcal{V}_0 ;
- iii) Estime a probabilidade condicional de que a observação teste pertença à Classe j como a fração dos pontos de \mathcal{V}_0 cujos valores de Y sejam iguais a j , ou seja, como

$$P(Y = j|X = x_0) = \frac{1}{K} \sum_{i \in \mathcal{V}_0} I(y_i = j). \quad (8.15)$$

iv) classifique x_0 na classe com a maior probabilidade.

Exemplo 8.3. A função `knn()` do pacote `class` necessita de uma matriz contendo os dados de treinamento, outra contendo os dados de teste, um vetor contendo os rótulos para as observações de treinamento e o valor de K . Consideremos, novamente, os dados de `inibina` e utilizemos as duas variáveis, `inibpre` e `inibpos` como preditores; além disso, utilizemos as observações 1 a 25 como dados de treinamento e as observações 26 a 32 (7 observações) como dados teste.

```
library(class)
inibpre=inibina$inibpre
inibpos=inibina$inibpos
train=(ident<26)
train.X=cbind(inibpre,inibpos)[train,]
test.X=cbind(inibpre,inibpos)[!train,]
train.resposta=resposta[train]
resposta.25=resposta[!train]

set.seed(1)
knn.pred=knn(train.X,test.X,train.resposta,k=1)
table(knn.pred,resposta.25)
mean(knn.pred==resposta.25)
```

A função `mean()` pode ser usada para obter a proporção de classificação correta, gerando o valor 0,71. Aumentando o valor de K , não há melhora nessa proporção.

8.5 Notas de capítulo

8.6 Exercícios

1. Prove (10.3) e (10.4).
2. Prove que (10.5) é maximizada por (10.6).
3. Prove (10.10) e (10.11).
4. Use os métodos discutidos nesse capítulo (regressão logística, função discriminante linear de Fisher e KNN) para o conjunto `iris`.
5. Mesmo problema, para os dados de `cifose`.
6. Considere o Exemplo 8.2 e divida os dados em dados de treinamento e de teste, como no Exemplo 8.3. Então, aplique o método da função discriminante linear.
7. Considere o exemplo 8.1 e considere com variáveis na regressão logística, `inibpre` e `inibpos`. Obtenha os estimadores dos coeficientes do modelo e a chance de resposta positiva.
8. Mesmo problema para o Exemplo 8.2.

Referências

Afiune, J. Y. (2000). Avaliação ecocardiográfica evolutiva de recém-nascidos pré-termo, do nascimento até o termo. Tese de Doutorado, Faculdade de Medicina da USP.

Anderson, T.W. (1957). Maximum likelihood estimates for a multivariate normal distribution when some observations are missing. *Journal of the American Statistical Association*, **52**, 200–203.

Bartlett, M.S. (1937). The statistical conception of mental factors. *British Journal of Psychology*, **28**, 97-104.

Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning*. New York: Springer.

Box, G.E.P. and Müller, M.E.(1958). A note on the generation of random normal deviates. *The Annals of Statistics*, **29**, 610–611.

Bland, J.M. and Altman, D.G. (1986). Statistical methods for assessing agreement between two methods of clinical measurement. *Lancet*, **327**, 307–310. doi:10.1016/S0140-6736(86)90837-8

Blei, D. M. Smyth, P. (2017). Science and data science. PNAS, **114**, 8689–8692.

Box, G.E.P. and Cox, D.R. (1964). An analysis of transformations. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **26**: 211-252.

Breiman, L. (1996). Bagging predictors. *Machine Learning*, **24**, 123–140.

Breiman, L. (2001). Statistical modeling: the two cultures. *Statistical Science*, **16**, 199–231.

Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning*, **45**, 5–32.

Breiman, L., Friedman, J. H., Olshen, R. A., and Stone, C. J. (1984). *Classification and Regression Trees*. Chapman & Hall/CRC.

Bussab, W.O. e Morettin, P.A. (2017). *Estatística Básica, 9a Edição*. São Paulo: Saraiva.

Chambers, J.M., Cleveland, W.S., Kleiner, B and Tukey, P.A. (1983). *Graphical*

- Methods for Data Analysis*. London: Chapman and Hall.
- Chambers, J. M. and Hastie, T. J. (eds.) (1992). *Statistical Models in S*. Wadsworth and Brooks/Cole, Pacific Grove, CA.
- Chambers, J. M. (1993). Greater or lesser Statistics: A choice for future research. *Statistics and Computing*, **3**, 182–184.
- Chollet, F. (2018). *Deep Learning with R*. Manning.
- Cleveland, W. M. (1979). Robust locally weighted regression and smoothing scatterplots. *Journal of the American Statistical Association*, **74**, 829–836.
- Cleveland, W. M. (1985). *The Elements of Graphing Data*. Monterey: Wadsworth.
- Cleveland, W. M. (1993). *Visualizing Data*. Summit, New Jersey: Hobart Press.
- Cleveland, W. M. (2001). Data Science: An action plan for expanding the technical areas of the field of Statistics. *International Statistical Review*, **69**, 21–26.
- Cohen, J. (1960). A coefficient of agreement for nominal scales. *Educational and Psychological Measurement*, **20**, 37–46. doi:10.1177/001316446002000104
- Colosimo, E.A. e Giolo, S.R. (2006). *Análise de Sobrevivência Aplicada*. São Paulo: Blücher.
- Cortes, C. and Vapnik, V. (1995). Support vector networks. *Machine Learning*, **20**, 273–297.
- Dempster, A.P., Laird, N. and Rubin, D.B. (1977). Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **39**, 1-38.
- Donoho, D. (2017). 50 years of Data Science. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **26**, 745–766.
- Durbin, J. and Watson, G.S. (1950). Testing for serial correlation in least squares regression, I. *Biometrika*, **37**, 409-428.
- Durbin, J. and Watson, G.S. (1951). Testing for serial correlation in least squares regression, II. *Biometrika*, **38**, 159-178.
- Durbin, J. and Watson, G.S. (1971). Testing for serial correlation in least squares regression, III. *Biometrika*, **58**, 1-19.
- Dzik A., Lambert-Messerlian, G., Izzo, V.M., Soares, J.B., Pinotti, J.A. and Seifer, D.B. (2000). Inhibin B response to EFORT is associated with the outcome of oocyte retrieval in the subsequent in vitro fertilization cycle. *Fertility and Sterility*, **74**, 1114-1117.
- Efron, B. and Tibshirani, R. (1993). *An Introduction to the Bootstrap*. Chapman and Hall
- Efron, B. and Hastie, T. (2016). *Computer Age Statistical Inference*. New York: Cambridge University Press.
- Elias, F.M., Birman, E.G., Matsuda, C.K., Oliveira, I.R.S. and Jorge, W.A. (2006).

- Ultrasonographic findings in normal temporomandibular joints. *Brazilian Oral Research*, **20**, 25-32.
- Embrechts, P., Lindskog, F. and McNeil, A. (2003). Modelling dependence with copulas and applications to risk management. In *Handbook of Heavy Tailed Distributions in Finance*, ed. S. Rachev, Elsevier, Ch. 8, 329–384.
- Ehrenberg, A. S. C. (1981). The problem of numeracy. *The American Statistician*, **35**, 67-71.
- Ferreira, J.E., Takecian, P.L., Kamaura, L.T., Padilha, B. and Pu, C. (2017). Dependency Management with WED-flow Techniques and Tools: A Case Study. *Proceedings of the IEEE 3rd International Conference on Collaboration and Internet Computing*, 379-388. doi:10.1109/CIC.2017.00055
- Fletcher, R. (1987). *Practical Methods of Optimization, Second Edition*. New York: Wiley.
- Freedman, D. and Diaconis, P. (1981). On the histogram as a density estimator: L_2 theory. *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete*, **57**, 453–476.
- Freund, Y. and Schapire, R.E. (1997). A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting. *Journal of Computer and System Science*, **55**, 119–139.
- Fuller, W.A. (1996). *Introduction to Statistical Time Series, Second Edition*. New York: Wiley.
- Gartner, Inc. (2005). *Gartner says more than 50 percent of data warehouse projects will have limited acceptance or will be failures through 2007*. <http://www.gartner.com.2005>.
- Giampaoli, V., Magalhães, M.N., Fonseca, F.C. e Anoroço, N.F. (2008). Relatório de análise estatística sobre o projeto: “Avaliação e pesquisa: Investigando as dificuldades em Matemática no Ensino Fundamental da Rede Municipal da cidade de São Paulo – 2ª fase”. São Paulo, IME-USP. (RAE – CEA – 08P27).
- Goldfeld, S.M., Quandt, R.E. and Trotter, H.F. (1966). Maximisation by quadratic hill-climbing. *Econometrica*, **34**, 541-551.
- Graedel, T. and Kleiner, B. (1985). Exploratory analysis of atmospheric data. In *Probability, Statistics and Decision Making in Atmospheric Sciences*, A.H. Murphy and R.W. Katz, eds), pp 1-43. Boulder: Westview Press.
- Hammersley, J.M. and Handscomb, D.C. (1964). *Monte Carlo Methods*. New York: Wiley.
- Hastie, T. and Tibshirani, R. (1990). *Generalized additive models*. London: Chapman & Hall.
- Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J. (2017). *The Elements of Statistical Learning*, 2nd Edition, Springer.
- Hinkley, B. (1977). On quick choice of probability transformations. *Applied Stat-*

- istics*, **26**, 67-69.
- Hebb, D. O. (1949). *The organization of behavior*. New York: Wiley.
- Hosmer, D. W. and Lemeshow, S. (1980). A goodness-of-fit test for the multiple logistic regression model. *Communications in Statistics*, **A10**, 1043–1069.
- Hosmer, D.W. and Lemeshow, S. (2013). *Applied Logistic Regression, Third ed.* New York: John Wiley.
- Hyvärinen, A. and Oja, E. (1997). A fast fixed point algorithm for independent component analysis. *Neural Computation*, **9**, 1483–1492.
- Hyvärinen, A. (1999). Fast and robust fixed-point algorithm for independent component analysis. *IEEE Transactions on Neural Network*, **10**, 626–634.
- Hyvärinen, A. and Oja, E. (2000). Independent component analysis: Algorithms and applications. *Neural Networks*, **13**, 411–430.
- Hyvärinen, A., Karhunen, J. and Oja, E. (2001). *Independent Component Analysis*. New York: Wiley.
- Jaiswal, S. (2018). K-Means Clustering in R Tutorial. Disponível em <https://www.datacamp.com/community/tutorials/k-means-clustering-r>.
- James, G., Witten, D., Hastie, T. and Tibshirani, R. (2017). *Introduction to Statistical Learning*. Springer.
- Johnson, N.L. and Leone, F.C. (1964). *Statistics and Experimental Design in Engineering and Physical Sciences, Vols 1, 2*. New York: Wiley.
- Kutner, M.H., Neter, J., Nachtsheim, C.J. and Li, W. (2004). *Applied Linear Statistical Models. 5th ed.* New York: McGraw-Hill/Irwin. ISBN-10: 007310874X, ISBN-13: 978-0073108742.
- Lee, E.T. and Wang, J.W. (2003). *Statistical Methods for Survival Data Analysis, 3rd. Edition*. New York: Wiley
- Lemeshow, S. and Hosmer, D.W. (1982). The use of goodness-of-fit statistics in the development of logistic regression models. *American Journal of Epidemiology*, **115**, 92-106.
- Little, R.J.A. and Rubin, D.B. (1987). *Statistical Analysis with Missing Data*. New York: Wiley.
- Louis, T.A. (1982). Finding observed information using the EM algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **44**, 98-130.
- McCarthy, J., Minsky, M. L., Rochester, N. and Shannon, C.E. (1955). A Proposal for the Dartmouth Summer Research Project on Artificial Intelligence. August 31, 1955.
- McCulloch, W. S. and Pitts, W. A. (1943). Logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Butt. math. Biophysics*, **S**, 115–133.
- McGill, R., Tukey, J. W. and Larsen, W. A. (1978). Variations of box plots. *The*

- American Statistician*, **32**, 12–16.
- Meng, X.L. and Rubin, D.B. (1993). Maximum likelihood estimation via the ECM algorithm: A general framework. *Biometrika*, **80**, 267-278.
- Metropolis, N. and Ulam, S.(1949). The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, **44**, 335–341.
- Meyer, D. (2018). Support vector machines. The interface to libsvm in package e1071. FH technikum Wien, Austria.
- Miller, R.G. and Halpern, J.H. (1982). Regression via censored data. *Biometrika*, **69**, 521-531.
- Morettin, P.A. and Tolói, C.M.C. (2018). *Análise de Séries Temporais*, 3a Edição, Volume 1. São Paulo: Blücher.
- Morrison, D.F. (1976). *Multivariate Statistical Methods, 2nd Ed.* New York: McGraw-Hill.
- Nelder, J.A. and Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. *Computer Journal*, **7**, 308-313.
- Paulino, C.D. e Singer, J.M. (2006). *Análise de Dados Categorizados*. São Paulo: Blücher.
- Pedroso de Lima, A.C., Singer, J.M. e Fusaro, E.R. (2000). *Relatório de análise estatística sobre o projeto “Prognóstico de pacientes com insuficiência cardíaca encaminhados para tratamento cirúrgico.”* São Paulo: Centro de Estatística Aplicada do IME/USP.
- Powell, M.J.D. (1964). An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *Computer Journal*, **7**, 155-162.
- R Core Team (2013). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <http://www.R-project.org/>.
- Rainardi, V. (2008). *Building a Data Warehouse with Examples in SQL Server*. Apress (Springer). doi: 10.1007/978-1-4302-0528-9
- Rosenblatt, F. (1958). The perceptron: A theory of statistical separability in cognitive systems. Buffalo: Cornell Aeronautical Laboratory, Inc. Rep. No. VG-1196-G-1.
- Ross, S.(1997). *Simulation, 2nd Ed.*, New York: Academic Press.
- Rubin, D.B. (1977). Formalizing subjective notions about the effect of nonrespondents in sample surveys. *Journal of the American Statistical Association*, **72**, 538–543.
- Rubin, D.B. (1987). *Multiple Imputation for Nonresponse in Surveys*. New York: Wiley.
- Rubin, D.B. (1996). Multiple imputation after 18+ years. *Journal of the American*

- Statistical Association*, **91**, 473-489.
- Schmee, J. and Hahn, G.J. (1979). A simple method for regression analysis with censored data. *Technometrics*, **21**, 417-432.
- Sen, P.K., Singer, J.M. and Pedroso-de-Lima, A.C. (2009), *From finite sample to asymptotic methods in Statistics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Singer, J.M. and Andrade, D.F. (1997). Regression models for the analysis of pretest/posttest data. *Biometrics*, **53**, 729-735.
- Singer, J.M. e Ikeda, K. (1996). Relatório de Análise Estatística sobre o projeto “Fatores de risco na doença aterosclerótica coronariana”. São Paulo, SP, IME-USP, 1996, 28p. (CEA-RAE-9608).
- Singer, J.M., Rocha, F.M.M e Nobre, J.S. (2018). *Análise de Dados Longitudinais*. Versão parcial preliminar.
- Smola, A. J. and Schölkopf, B. (2004). A tutorial on support vector regression. *Statistics and Computing*, **14**, 199–222.
- Sobol, I.M.(1976). *Método de Monte Carlo*. Moscow: Editorial MIR.
- Stone, J. V. (2004). *Independent Component Analysis: A Tutorial Introduction*. MIT Press.
- Sturges, H. A. (1926). The choice of a class interval. *Journal of the American Statistical Association*, **21**, 65–66.
- Tanner, M.A. (1996). *Tools for Statistical Inference, 3rd Ed.*. New York: Springer.
- Thurstone, L.L. (1947). *Multiple Factor Analysis: A development and expansion of vectors of the mind.*. Chicago: University of Chicago Press.
- Tibshirani, R. (1996). Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B (methodological)*, **58**, 267–288.
- Trevino, A. (2016). Introduction to K-means Clustering. Disponível em <https://www.datascience.com/blog/k-means-clustering>.
- Turing, A. (1950). Computing machinery and intelligence”. *Mind*, LIX (236).
- Tukey, J. W. (1962). The future of data analysis. *The Annals of Mathematical Statistics*, **33**, 1–67.
- Tukey, J. W. (1977). *Exploratory Data Analysis*. Reading: Addison-Wesley.
- Vapnik, V. and Chervonenkis, A. (1964). A note on a class of perceptrons. *Automation and Remote Control*, **25**.
- Vapnik, V. and Chervonenkis, A. (1974). *Theory of Pattern recognition* [in Russian]. Moskow: Nauka.
- Vapnik, V. (1995). *The Nature of Statistical Learning Theory*. New York: Springer.
- Vapnik, V. (1998). *Statistical Learning Theory*. New York: Wiley.

- Viera, J. and Garrett, J.M. (2005). Understanding interobserver agreement: the kappa statistic. *Family Medicine*, **37**, 360-263
- von Neumann, J.(1951). Various techniques used in connection with random digits, Monte Carlo Method. *U.S. National Bureau of Standards Applied Mathematica Series*, **12**, 36–38.
- Wayne, D.W. (1990). *Applied Nonparametric Statistics, Second Edition* . Boston: PWS-Kent. ISBN 0-534-91976-6.
- Wei, G.C.G. and Tanner, M.A. (1990). A Monte Carlo implementation of the EM algorithm and the poor man's data augmentation algorithm. *Journal of the American Statistical Association*, **85**, 699-704.
- Wilks, S.S. (1932). Moments and distributions of estimates of population parameters from fragmentary samples. *Annals of Mathematical Statistics*, **2**, 163–195
- Witzel, M.F., Grande, R.H.M. and Singer, J.M. (2000). Bonding systems used for sealing: evaluation of microleakage. *Journal of Clinical Dentistry* , **11**, 47-52.
- Wu, C.F.J. (1983). On the convergence properties of the EM algorithm. *Annals of Statistics*, **11**, 95-103.
- Zan, A.S.C.N. (2005). Ultra-sonografia tridimensional: determinação do volume do lobo hepático direito no doador para transplante intervivos. Tese de doutorado. São Paulo: Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo.
- Zerbini, T., Gianvecchio, V.A.P., Regina, D., Tsujimoto, T., Ritter, V. and Singer, J.M. (2018). Suicides by hanging and its association with meteorological conditions in São Paulo, Brazil. *Journal of Forensic and Legal Medicine*, **53**, 22-24. doi: dx.doi.org/10.1016/j.jflm.2017.10.010

Índice

- Odds*, 88
- Accelerated failure time models*, 214
- Draftsman's display*, 122
- Odds ratio*, 87
- Perceptron*, 5
- Proportional hazards model*, 215
- Stem and leaf*, 38

- Acurácia, 90, 227
- Amostra, 15, 54
 - aleatória simples, 55, 66
- Amplitude, 49
- Análise
 - condicional, 165
 - de componentes principais, 122
 - de Confiabilidade, 205
 - de séries de tempo, 161
 - de séries temporais, 161
 - de Variância, 127
 - exploratória de dados, 15
- ANOVA, 128
- Aprendizado
 - automático, 4
 - com estatística, 3
 - não supervisionado, 3
 - supervisionado, 3
- Artificial
 - inteligência, 4
- Ativação
 - função de, 6
- Autocorrelação, 163

- Banco de dados, 15

- Capa de Cohen, 84
- Censura, 205
 - à direita, 216
 - à esquerda, 216
 - intervalar, 216

- Chance, 88, 182
- Ciência
 - de dados, 1
- Classe modal, 45
- Classificador, 223
 - de Bayes, 232
- Coefficiente
 - de contingência, 83
 - de correlação de Pearson, 92, 107
 - de correlação de Spearman, 94
 - de determinação, 150
 - de determinação ajustado, 177
- Concordância, 96
- Cook
 - gráficos de, 151
- Curva ROC, 227

- Dado
 - longitudinal, 20
 - omisso, 19
- Dados
 - conjuntos de, 9
 - longitudinais, 161, 178
- Data
 - Science, 1
- Deep
 - learning, 7
- Desvio
 - absoluto médio, 48
 - médio, 48
 - mediano absoluto, 48
 - padrão, 47
- Diferença significativa, 111
- Distância
 - de Cook, 159, 173
 - interquartis, 48
- Distribuição
 - conjunta, 80

- de frequências, 34
 - de valores extremos, 215
 - hipergeométrica, 214
- Efeito
- aleatório, 181
 - principal, 128
- Ensaio clínico, 15
- Equação
- de estimação, 183
- Erro
- aleatório, 170
 - padrão, 65
 - propagação de, 27
- Especificidade, 90, 226
- Estatística
- de Durbin-Watson, 163
 - de ordem, 56
 - de Pearson, 193
- Estimador
- de Kaplan Meier, 210
 - de mínimos quadrados, 169
 - do limite de produtos, 210
 - não enviesado, 47
- Estimadores
- de mínimos quadrados, 150
- Estudo
- caso-controle, 107
 - observacional, 15
 - prospectivo, 87, 106
 - retrospectivo, 88, 107
- Falso
- negativo, 90
 - positivo, 90, 227
- Fator, 127
- de risco, 86
 - efeito de, 127
 - interação, 127
- Forma quadrática, 171
- Fronteira
- de Bayes, 232
 - de decisão linear, 221
- Função
- biquadrática, 140
 - de distribuição empírica, 210
 - de probabilidade, 55
 - de risco, 206
 - de sobrevivência, 206
 - densidade de probabilidade, 55
 - discriminante, 230
 - discriminante de Fisher, 221
 - distribuição acumulada, 56
 - distribuição empírica, 56
 - tricúbica, 139
- Gráfico
- dotplot*, 38
 - da variável adicionada, 177
 - de barras, 36
 - de Bland-Altman, 98
 - de Cook, 159
 - de dispersão, 92
 - de dispersão simbólico, 122
 - de dispersão unidimensional, 38
 - de médias/diferenças, 98
 - de perfis, 179
 - de perfis médios, 102, 127
 - de pizza, 36
 - de quantis, 50
 - de resíduos, 151
 - de simetria, 51
 - do desenhista, 122, 179
 - PP, 109
 - QQ, 57, 96, 159
 - Ramo e Folhas, 38
 - ramo-e-folhas, 39
 - torta, 36
- Grau
- de liberdade, 47
- Heteroscedasticidade, 154
- Hipótese
- de homogeneidade, 82
 - de independência, 82
- Inferência
- Estatística, 15, 54
- Influência
- local, 151
- Interação
- essencial, 129
 - não essencial, 128
- Intervalo
- de confiança, 188
 - de previsão, 189
- Janelamento, 127
- Lowess, 126, 138
- Média, 44
- aparada, 45
- Método
- de mínimos quadrados, 171, 196

- de mínimos quadrados generalizados, 164, 184
- de máxima verossimilhança, 182
- de Newton-Raphson, 183
- Delta, 183
- Margem de erro, 66
- Matlab, 9
- Matriz
 - de correlações, 134, 136
 - de covariâncias, 134, 136
 - de dados, 121, 133
- Mediana, 45
- Medida
 - resistente, 45
 - robusta, 45
- Megadados, 1
- Minitab, 9
- Moda, 45
- Modelo
 - de regressão de Cox, 215
 - de regressão linear múltipla, 169
 - de regressão linear simples, 149
 - de regressão polinomial, 149
 - de riscos proporcionais, 215
 - de tempo de falha acelerado, 214
 - exponencial, 208
 - linear misto, 181
 - log normal, 208
 - não linear, 149
 - paramétrico, 214
 - probabilístico, 54
 - semiparamétrico, 215
 - Weibull, 208
- Momento
 - centrado, 50
- Parâmetros, 148
- Parametrização
 - de média de celas, 128
- Partição, 127
- Percentil, 46
- Ponto
 - alavanca, 159
 - de corte, 226
 - influyente, 159
- Posto, 94
- Prevalência, 91
- Previsão, 221
- Processo
 - estocástico, 56
- Quantil, 46
 - empírico, 46
- Quartil, 46
- Razão
 - de chances, 87, 182, 184
- Redes
 - neurônais, 5
- Regra
 - de classificação, 230
- Regressão
 - linear múltipla, 149, 169
 - linear simples, 149
 - resistente, 194
 - segmentada, 141
- Resíduo, 83, 170
 - da desviância, 194
 - de Pearson, 193
 - padronizado, 152
 - studentizado, 152, 188
- Resíduos, 170
- Risco
 - atribuível, 87
 - de um classificador, 223
 - relativo, 87, 215
- SAS, 9
- Sensibilidade, 90, 226
- SPlus, 9
- Suavização, 138
- Tabela
 - atuarial, 218
 - de contingência, 82
 - de dupla entrada, 82
- Teorema
 - de Gauss-Markov, 188
 - Limite Central, 188
- Teste
 - log rank*, 214
- Unidade amostral, 19
- Valor
 - atípico, 52
 - discrepante, 52
 - esperado, 82
 - preditivo negativo, 90
 - preditivo positivo, 90
- Variáveis
 - comonotônicas, 107
 - contramonotônicas, 107
- Variável
 - padronizada, 65

- contínua, 34
- discreta, 34
- explicativa, 79
- nominal, 34
- ordinal, 33
- padronizada, 68
- qualitativa, 33
- quantitativa, 34
- resposta, 79
- Variância, 47
 - aparada, 48, 108
- Vizinho mais próximo, 232