

CALIBRAÇÃO LINEAR

Patrícia Guilhem de Almeida Ramos

DISSERTAÇÃO APRESENTADA

AO

INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA

DA

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE

EM

ESTATÍSTICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: ESTATÍSTICA

ORIENTADOR: PROF. DR. HELENÓ BOLFARIN

- São Paulo, fevereiro de 1987 -

INTRODUÇÃO

O objetivo primordial desta dissertação é apresentar os principais métodos desenvolvidos para a solução do problema de calibração ou de regressão inversa. Além disto, sempre que possível, realizamos comparações entre estes diversos métodos.

No primeiro capítulo, expomos o problema da calibração e, para melhor explicitá-lo, descrevemos alguns exemplos de aplicação, assim como algumas maneiras de classificá-lo.

Os métodos de estimação clássica, tanto pontuais quanto por intervalos, são abordados no Capítulo 2. Estes se caracterizam por serem baseados na linha de regressão definida no experimento de calibração. No final deste capítulo, enfatizamos os meios alternativos para estimação quando as suposições básicas do modelo são transgredidas.

O Capítulo 3 trata das técnicas de estimação, por intervalo e pontual, fundamentadas na linha de regressão invertida, ou seja, da variável independente pela variável dependente do experimento de calibração - os chamados estimadores inversos. Completamos este capítulo com um histórico e alguns resultados da controvertida comparação entre os dois estimadores - o clássico e o inverso.

Outros métodos de estimação são colocados no último capítulo: a estimação estrutural, as técnicas bayesianas, a análise de verossimilhança e a estimação sequencial.

Em anexo, para maior facilidade de futuras utilizações, incluímos as tabelas necessárias às construções dos estimadores por intervalo de confiança simultâneos referidos na Seção 2.3.

II

Gostaria de agradecer a todos que direta ou indiretamente comigo colaboraram e, em especial,

ao Professor Doutor Heleno Bolfarine, sem o qual esta dissertação não teria sido realizada, por sua compreensão, sua dedicação e valiosas sugestões, bem como por ter aceito, tão de pronto, a orientação final do trabalho;

ao Professor Doutor Abraham Laredo Sicsú pela sugestão do tema, orientação inicial e o incentivo permanente;

aos Professores Doutores Júlio da Motta Singer, Clóvis de Araújo Peres e Flavio Wagner Rodrigues pelo apoio dado no momento mais necessário;

aos demais professores do Departamento de Estatística do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo;

a Walter Vicente Fernandes pelo eficiente trabalho de datilografia;

ao arquiteto Geraldo Zelardo Neto pelo excelente trabalho de desenhista;

ã bibliotecária Patrícia Maria Toledo de Moraes pela revisão das referências bibliográficas;

a meus familiares: meu marido, meus pais, meu filho e meus irmãos pela paciência, incentivo e dedicação que tiveram nestes últimos meses.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 - CONSIDERAÇÕES GERAIS	1
1.1. Descrição do problema	2
1.2. Esquemas de classificação da calibração ..	4
1.3. Exemplos de aplicações	7
CAPÍTULO 2 - O ESTIMADOR CLÁSSICO	13
2.1. Estimador clássico pontual	15
2.1.1. Estimador de máxima verossimi- lhança	16
2.1.2. Notação matricial	23
2.1.3. Aproximações e resultados assín- tóticos	24
2.1.4. Distribuição dos estimadores e de algumas estatísticas	28
2.1.5. Estimadores clássicos modificados	34
2.2. Estimador clássico por intervalo de confiança	39
2.3. Estimador clássico por intervalo de con- fiança simultâneo	50
2.3.1. Intervalo de confiança simultâneo limitado	50
2.3.2. Intervalo de confiança simultâneo ilimitado	55
2.4. Violação das suposições do modelo	76

CAPÍTULO 3 - O ESTIMADOR INVERSO	82
3.1. Estimador pontual inverso	84
3.2. Estimador inverso por intervalo de con- fiança	92
3.3. Comparação dos estimadores pontuais	95
CAPÍTULO 4 - OUTROS MÉTODOS	100
4.1. Estimador estrutural	101
4.2. Estimadores bayesianos	107
4.2.1. Distribuição a priori de ξ	108
4.2.2. Distribuição a priori de η, α, β	117
4.2.3. Comentários e comparações entre as distribuições a posteriori de ξ	124
4.3. Análise de verossimilhança	128
4.4. Estimador sequencial	135
COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES	141
ANEXO - TABELAS	144
BIBLIOGRAFIA	162

CAPÍTULO 1

CONSIDERAÇÕES GERAIS

A importância do estudo do problema de calibração está relacionada com aplicações práticas em diversas áreas, tais como, na Engenharia e na Física, para aferição de instrumentos de medição de grandezas físicas (como amperímetros, termopares, trenas, etc.); na Medicina, tanto para calibrar instrumentos que são indicadores da saúde pública (termômetros, medidores de pressão sanguínea, entre outros) como para avaliar efeitos de dosagem de drogas; na Química e na Biologia, para determinar concentrações de soluções, assim como, composições de materiais (através de fotômetros de chama, de espectrofotômetros, de cromatógrafos, etc.). A caracterização destes problemas é feita a seguir na Seção 1.1.

A fim de definirmos melhor a calibração e para melhor interpretação de sua teoria estatística, descrevemos, também, neste capítulo, diversos critérios de organização do assunto, assim como alguns casos práticos em que esta situação ocorre.

O Exemplo 1.1 é comentado mais detalhadamente, pois os seus resultados servirão para ilustrar e comparar os métodos de estimação apresentados no restante do trabalho.

1.1. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O problema de regressão inversa ou de calibração é caracterizado, estatisticamente, por duas variáveis Y e x , supostamente relacionadas através de uma função f conhecida, tais que Y é um valor sujeito a um erro ϵ de observação e x é uma quantidade fixa e controlada, sem erro de medida, definida em um intervalo I - chamado de intervalo de calibração - isto é,

$$Y = f(x) + \epsilon$$

A variável aleatória Y é, também, mencionada como variável dependente ou resposta, enquanto que a variável x é referida, também, por variável independente ou de predição (predictor).

Numa primeira etapa - chamada de experimento de calibração - amostramos n observações da variável aleatória Y_i , a partir de valores x_i , $i = 1, \dots, n$, prefixados de modo a estimarmos a função f que relaciona as duas variáveis.

Subsequentemente, em uma segunda fase - a calibração propriamente dita - fixamos ou observamos uma amostra aleatória de tamanho k ($k \geq 1$) de um valor variável de Y , digamos Y_0 , correspondente a um valor de x desconhecido. Então, desejamos estimar este valor desconhecido x baseado nas informações do ponto de interesse Y_0 e da função estimada no experimento de calibração. Resumidamente temos Y_0 e queremos determinar o valor x correspondente. Salientamos que este procedimento é o inverso do executado nos métodos de previsão utilizando uma curva de regressão, onde fixamos ou observamos um valor de x , digamos x_0 , e estimamos o valor Y correspondente.

Muitas vezes, o que ocorre é que temos duas técnicas pa-

ra obter uma medida de um fenômeno, uma x exata mas demorada e trabalhosa e outra Y rápida e simples mas não precisa. Supondo as duas medidas de alguma forma relacionadas, o experimentador quer, usando o método impreciso e mais simples, determinar o valor exato da medida. Este procedimento é, também, uma calibração.

1.2. ESQUEMAS DE CLASSIFICAÇÃO DA CALIBRAÇÃO

Williams (1969a) enfatizou que o termo calibração na literatura é aplicado, sem distinção, a dois tipos de problemas que são conceitualmente diferentes, conduzindo a modelos estatísticos diferentes. Ele os chamou de calibração "absoluta" e calibração "comparativa".

Na calibração "absoluta", um instrumento ou uma técnica de medida sujeitos a erro são calibrados versus uma medida padrão ou graduada que é conhecida ou é feita com erro experimental desprezível. Este uso do termo é o mais ligado com o sentido original de calibração que era a medida do diâmetro interno (calibre) de um tubo para podermos classificá-lo. A calibração de testes químicos, usando como referência materiais de composição conhecida, assim como as aplicações citadas na última seção deste capítulo são exemplos deste tipo de calibração. Neste trabalho, examinaremos essencialmente a calibração "absoluta", sendo referenciada apenas por calibração.

Ao passo que, na calibração "comparativa", um instrumento ou técnica de medida são calibrados versus outros com nenhum deles sendo medida padrão. Neste tipo de calibração pretendemos determinar a relação entre diversos testes ou instrumentos que fornecem medidas indiretas similares, isto é, do mesmo teor, não existindo contudo medidas padrões como referência. Um exemplo é a capacidade pulmonar humana que pode ser medida por dois instrumentos, um, mais tradicional, e outro mais moderno, portátil. Submetendo um grupo de indivíduos aos dois instrumentos, podemos calibrar as medidas (ambas sujeitas a erro) dos dois aparelhos. Outro exemplo é a concentração de hidrocarbonetos

polinucleares aromáticos na água que pode ser determinada por dois métodos pela cromatografia líquida e pela fluorescência. Pela calibração "comparativa", podemos estabelecer uma relação entre estas duas medidas.

A calibração "absoluta" pode ser classificada sob diversos aspectos quanto: ao uso dos resultados da curva de calibração; a quem produz a curva de calibração, e à natureza do experimento de calibração e da leitura desconhecida.

Inferências estatísticas diferentes são necessárias conforme o uso dos resultados obtidos da curva de calibração. Quanto ao uso, podemos classificar a calibração em: uso simples - neste caso um experimentador calibra um procedimento com a finalidade de obter um único valor desconhecido e relatá-lo por estimador pontual ou/e por intervalos, e uso múltiplo - quando a experiência de calibração é relativamente difícil de ser executada e o instrumento ou o procedimento é estabelecido para repetidos usos, então os resultados são relatados por estimadores pontuais ou/e por intervalos simultâneos para a série de determinações.

A distinção entre quem produz a curva de calibração foi salientada por Berkson (1969). Temos: usuário que produz - que é o caso dos procedimentos de testes químicos usando amostras padrões onde, geralmente, as duas etapas, a calibração do experimento e os subsequentes testes dos materiais desconhecidos, são realizados pelo mesmo analista e nas mesmas condições ambientais, e externamente produzida - que ocorre quando um instrumento deve ser enviado para um laboratório para ser calibrado e o futuro uso do instrumento é feito no campo de teste sob condições diversas, não controladas como as de laboratório e por

indivíduos, às vezes, menos qualificados. Esta separação é importante pois pode implicar numa distorção da suposição de igualdade de variância dos erros de medida das duas etapas que será imposta ao modelo de calibração.

Quanto à natureza do experimento de calibração, podemos classificar a calibração em: planejada - quando ela é realizada em laboratórios físicos ou químicos onde podemos selecionar os padrões de modo que o experimento de calibração atinja a extensão da amplitude esperada das futuras leituras desconhecidas, e natural - é o caso da calibração de procedimentos biológicos ou clínicos onde os padrões são um conjunto de materiais disponíveis, podendo ocorrer que os extremos da amplitude dos valores não sejam bem representados pelo material experimental e, então, a exatidão da linha de calibração pode ser prejudicada.

Sob o ponto de vista da natureza da leitura futura do ponto de interesse da curva de calibração, podemos dividir as calibrações em: aleatórias - se o usuário pretende obter valor ou valores da curva de calibração correspondentes a um ou mais pontos desconhecidos sobre os quais ele não tem nenhuma informação a priori além de ter razões para esperar que as leituras pertençam ao intervalo definido pelo experimento (chamado de intervalo de calibração), e natural - quando as leituras da curva de calibração são valores desconhecidos que pertencem a uma população específica.

1.3. EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

EXEMPLO 1.1

Tomemos um exemplo descrito em Montgomery e Peck (1982) da calibração de um termopar por um engenheiro mecânico. O termopar é um sensor de temperatura, constituído por dois metais diferentes (ferro e constantã) soldados juntos que, sob efeito do calor, converte a energia térmica em energia elétrica. Associando ao termopar um galvanômetro, podemos medir a voltagem que é proporcional à temperatura, obtendo, desta forma, uma leitura da temperatura. A experiência de calibração foi feita por um banho de temperatura constante em 16 níveis diferentes de temperatura igualmente espaçada no intervalo de 100°C a 400°C . Em cada uma destas 16 temperaturas reais x_i (medidas por um termômetro padrão de exatidão conhecida) observamos uma leitura Y_i no termopar. O resultado do experimento é apresentado na Tabela 1.1 e o gráfico de sua dispersão na Figura 1.1. Considerando a existência de uma relação entre as duas medidas, podemos ajustar uma função $Y_i = f(x_i) + \epsilon_i$, $i = 1, \dots, 16$. Subsequentemente o engenheiro obtém uma nova temperatura $Y_0 = 200^{\circ}\text{C}$ usando o termopar, necessitando então saber a temperatura real correspondente a esta leitura de 200°C do termopar.

EXEMPLO 1.2

Em um novo tipo de termômetro, n leituras Y_i são realizadas a partir de temperaturas x_i predeterminadas e conhecidas pelo uso de uma escala de temperatura padrão (de erro de medi-

TABELA 1.1: Temperatura real e observada
do Exemplo 1.1

OBSERVAÇÃO	TEMPERATURA REAL	TEMPERATURA OBSERVADA
i	x_i	y_i
1	100	88,8
2	120	108,7
3	140	129,8
4	160	146,2
5	180	161,6
6	200	179,9
7	220	202,4
8	240	224,5
9	260	245,1
10	280	257,7
11	300	277,0
12	320	298,1
13	340	318,8
14	360	334,6
15	380	355,2
16	400	377,0

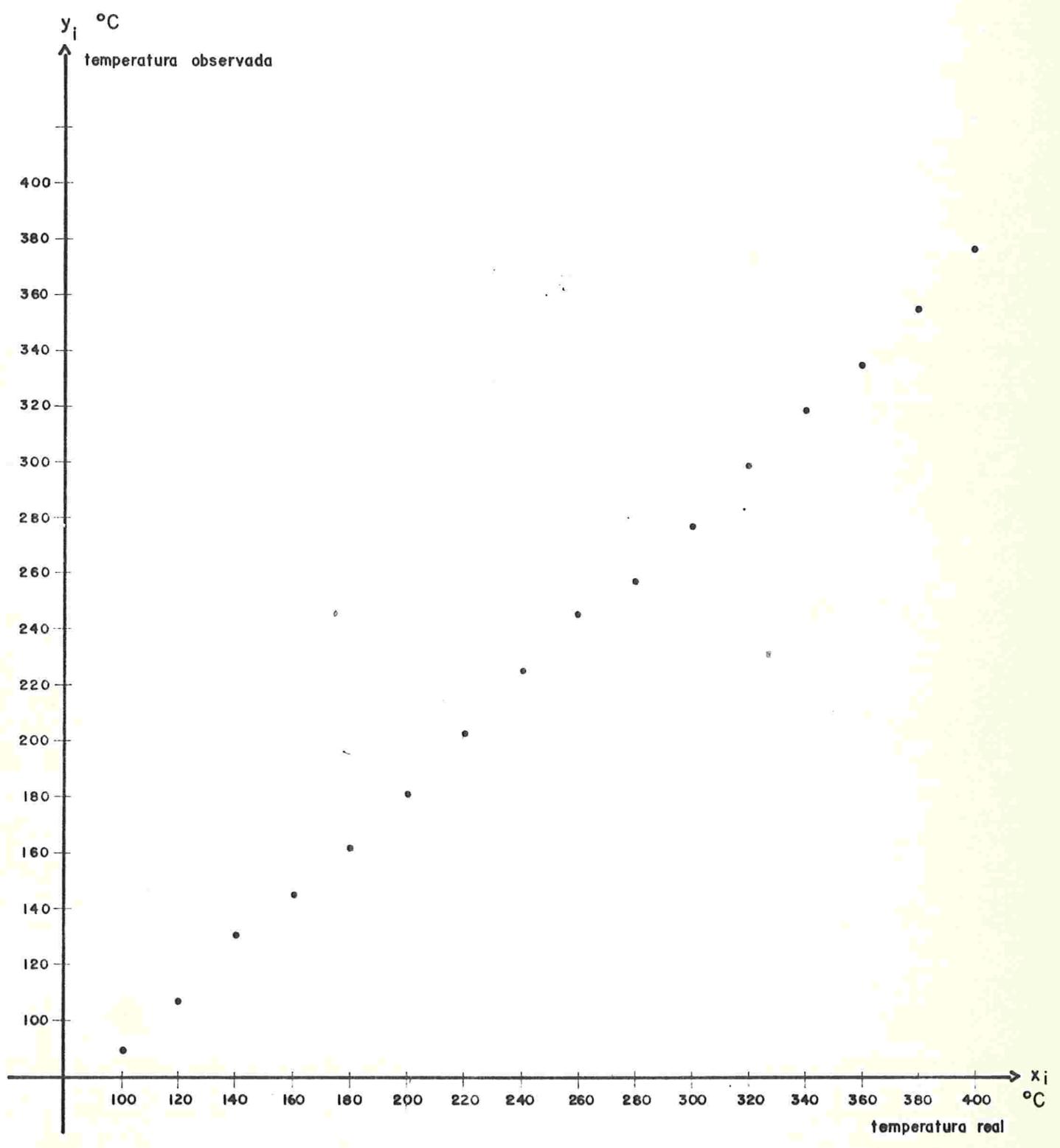


Figura 1.1: Gráfico da dispersão dos dados do Exemplo 1.1

da desprezível). Supomos que a relação entre as leituras Y_i do novo termômetro e as leituras x_i da escala padrão possa ser expressa por um modelo $Y_i = f(x_i) + \epsilon_i$, $i = 1, \dots, n$, sendo ϵ_i o erro aleatório da variável Y . Então, uma leitura (dita Y_0) é observada no novo termômetro e é necessário estimar a temperatura correta correspondente ou seja, a leitura na escala padrão quando no novo termômetro obtemos Y_0 .

EXEMPLO 1.3

Utilizando um fotômetro de chama podemos estimar a concentração de sódio numa amostra de material. A determinação exata da concentração de sódio pode ser obtida por métodos padrões que são trabalhosos, enquanto que a leitura do fotômetro de chama é rápida. Admitindo que exista uma relação, $Y = f(x) + \epsilon$, entre as concentrações de sódio x e as suas correspondentes leituras Y no fotômetro de chama. Submetemos um conjunto de n amostras dos materiais, com concentração de sódio predeterminada, ao fotômetro de chama. Seja Y_0 a leitura observada no fotômetro de um material qualquer, que podemos converter em concentração de sódio através do modelo estimado no experimento anterior.

EXEMPLO 1.4

Supomos que podemos relacionar através de um modelo de regressão o peso Y (em gramas) de certa raça de galinhas com o tempo x (em semanas) em que elas foram submetidas a uma alimentação com uma determinada ração. O fazendeiro recebe um grupo de galinhas que foram alimentadas com esta ração por um determi-

nado número de semanas (desconhecido para ele). Observando o peso Y_0 das galinhas, o fazendeiro quer estimar o número de semanas em que as galinhas foram alimentadas por esta ração.

EXEMPLO 1.5

Certa droga é ensaiada para baixar a pressão sanguínea. Notamos que o número de unidades de que a pressão sanguínea se reduz é uma função da quantidade de droga administrada em uma semana. Por este período de tempo, n pacientes são tratados com diferentes níveis x_i da droga e os decréscimos da pressão sanguínea Y_i são observados. Na aplicação do tratamento, um médico mede a pressão do paciente e verifica de quantas unidades Y_0 ela deve ser reduzida. O problema é saber quantas unidades da droga deve ser administrada ao paciente para baixar a pressão de Y_0 unidades.

EXEMPLO 1.6

Podemos medir a densidade do corpo das pessoas obesas. A densidade pode ser determinada de modo exato pela imersão na água. Consideramos que existe uma relação entre a medida da densidade x e o logaritmo da medida do diâmetro externo do triceps Y . Calculamos a densidade de x_i de n pessoas pela imersão em água e medimos a grossura Y_i de seus respectivos triceps, estimamos a partir destes dados a função entre as duas medidas. Dado Y_0 o logaritmo da medida do triceps de uma pessoa, desejamos obter a densidade correspondente ao seu corpo.

EXEMPLO 1.7

Seja uma partícula movendo-se em movimento uniforme a partir de um ponto de referência, ou seja, $S = \alpha + \beta x$ sendo S a distância percorrida em determinado espaço de tempo x . Assumimos que o tempo pode ser observado sem erro de medida. Entretanto, a distância S não pode ser medida exatamente, de modo que podemos somente observar o valor Y onde $Y = S + \epsilon$, isto é, a verdadeira distância percorrida S mais um erro aleatório ϵ . Uma amostra de n valores é obtida pelo pesquisador prefixando o tempo x_i e observando as distâncias Y_i correspondentes. Assim, o pesquisador pode estimar o modelo $Y = \alpha + \beta x + \epsilon$. Posteriormente, o pesquisador observa que a partícula se moveu uma distância de Y_0 unidades e deseja determinar qual foi o tempo necessário para que a partícula percorresse esta distância Y_0 .

CAPÍTULO 2

O ESTIMADOR CLÁSSICO

Vamos admitir válido o modelo linear:

$$Y = \alpha + \beta x + \epsilon \quad (2.A)$$

onde Y é uma variável aleatória;

x é um valor fixo pertencente a um intervalo fechado I ;

α e β são parâmetros definidos em um espaço paramétrico Ω ;

ϵ é o erro casual não observável,

e seja $(y_1, x_1), \dots, (y_n, x_n)$ uma amostra aleatória de tamanho n do par (Y, x) (não necessariamente de valores diferentes). Supomos, também, que os erros sejam identicamente distribuídos com média zero e variância σ^2 desconhecida, e não correlacionados.

Pelo método dos mínimos quadrados (Graybill (1976)), podemos obter o modelo ajustado, chamado no problema de calibração de linha de regressão padrão ou linha de calibração,

$$\hat{Y} = a + bx \quad (2.B)$$

onde

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

é o estimador do parâmetro β ,

$$a = \bar{Y} - b\bar{x}$$

é o estimador do parâmetro α ,

sendo que

$$\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i, \quad \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

Consideremos, agora, y_0 um valor observado ou fixado da variável Y . O estimador do parâmetro ξ (valor do eixo x correspondente a este valor y_0) baseado na linha ajustada acima é usualmente chamado de estimador de ξ , pelo método clássico.

2.1. ESTIMADOR CLÁSSICO PONTUAL

Obtemos o estimador do parâmetro ξ mais intuitivo considerando a linha de calibração no ponto (y_0, ξ) e resolvendo a equação em ξ , isto é

$$y_0 = a + b\hat{\xi} \quad (2.1.1)$$

conduzindo a

$$\hat{\xi} = x_c = \frac{y_0 - a}{b} \quad (2.1.2)$$

que é um possível estimador de ξ , sendo a e b os estimadores de mínimos quadrados dos parâmetros α e β dados em (2.B). Em (2.1.2) é necessário supor b estatisticamente diferente de zero. Por estatisticamente diferente de zero entendemos que $P(b=0) = 0$.

Este estimador é frequentemente chamado de estimador clássico de ξ . Geometricamente, conforme ilustrado na Figura 2.1.1, consideramos a linha de regressão ajustada ou de calibração, $\hat{Y} = a + bx$; desenhamos uma linha paralela ao eixo dos x no ponto y_0 , e simplesmente construímos a perpendicular a esta linha no ponto de sua intersecção com a linha de regressão. Obtemos como estimador de ξ a intersecção desta perpendicular com o eixo x .

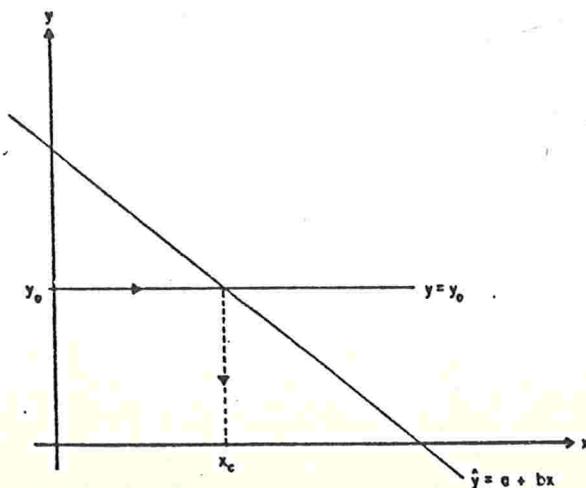


Figura 2.1.1 : Obtenção gráfica de x_c

Podemos generalizar o problema, não mais considerando y_0 como um valor fixo ou a variável aleatória Y_0 como uma única observação da função de densidade determinada por ξ , mas o vetor $\underline{Y}_0 = (Y_{01}, Y_{02}, \dots, Y_{0k})$ como sendo uma amostra aleatória, de tamanho k , dos valores de Y_0 observados da função de densidade determinada por ξ .

2.1.1. ESTIMADOR DE MÁXIMA VEROSSIMILHANÇA

O estimador clássico, acima construído de modo intuitivo, é, também, o estimador de máxima verossimilhança de ξ . Para mostrar isto, assumimos que observamos uma amostra aleatória de tamanho $n+k$ do modelo

$$Y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$$

com $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ e mutuamente independentes, denotada por

$$(x_1, Y_1), (x_2, Y_2), \dots, (x_n, Y_n), (\xi, Y_{n+1}), (\xi, Y_{n+2}), \dots, (\xi, Y_{n+k})$$

onde α , β , σ^2 e ξ são valores desconhecidos.

Notemos que, pela notação acima, os k últimos valores de Y (isto é, $Y_{n+1}, Y_{n+2}, \dots, Y_{n+k}$) são observações da distribuição normal com média $\alpha + \beta\xi$ e variância σ^2 , ou seja, os valores de Y_0 correspondentes ao valor desconhecido e fixado ξ . As outras n primeiras são referentes à distribuição normal com média $\alpha + \beta x_i$ e variância σ^2 , sendo cada x_i fixado e conhecido.

Portanto, temos o seguinte modelo:

$$\begin{aligned} Y_i &= \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i & i &= 1, \dots, n \\ Y_i &= \alpha + \beta \xi + \varepsilon_i & i &= n+1, \dots, n+k \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

sendo ε_i identicamente distribuídos com distribuição normal com média zero e variância σ^2 e mutuamente independentes ($i=1,2,\dots, n, n+1, n+2, \dots, n+k$).

A função de verossimilhança correspondente ao modelo acima é dada por:

$$L(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi / x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n, y_{n+1}, y_{n+2}, \dots, y_{n+k}) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n+k}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (y_i - \alpha - \beta \xi)^2 \right] \right\}$$

(2.1.4)

Os estimadores de máxima verossimilhança dos parâmetros α , β , σ^2 e ξ são dados pelo ponto de máximo da função de verossimilhança, ou equivalentemente, pelo ponto de máximo de

$$L = \ln L = -\frac{n+k}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (y_i - \alpha - \beta \xi)^2 \right]$$

(2.1.5)

Igualando a zero as derivadas parciais temos

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})(x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

$$a = \bar{Y} - b\bar{x},$$

(2.1.6)

$$x_c = \frac{\bar{Y}_0 - a}{b},$$

e

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n+k} \left[\sum_{i=1}^n (Y_i - a - bx_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (Y_i - \bar{Y}_0)^2 \right],$$

que são respectivamente os estimadores de máxima verossimilhança de β , α , ξ e σ^2 , sendo $b \neq 0$ com probabilidade 1, e onde

$$\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i, \quad \bar{Y}_0 = \frac{1}{k} \sum_{i=n+1}^{n+k} Y_i \quad \text{e} \quad \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

Isto pode ser resumido no seguinte teorema:

TEOREMA 2.1.1

Seja uma amostra aleatória (x_i, Y_i) , $i=1, 2, \dots, n$, com as variáveis x e Y relacionadas pelo modelo linear $Y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i$ onde ϵ_i são independentes e identicamente distribuídos com distribuição $N(0, \sigma^2)$. Posteriormente, seja Y_{n+i} , $i=1, 2, \dots, k$, ($k \geq 1$) uma amostra aleatória da distribuição normal com média $\alpha + \beta \xi$ (ξ desconhecido) e variância σ^2 . Sendo todas as variáveis Y_i independentes, os estimadores de máxima verossimilhança de α , β , ξ e σ^2 são dados pelas equações (2.1.6).

OBSERVAÇÕES 1.1

(i) Pode-se mostrar que:

$$E(\hat{\sigma}^2) = \frac{n+k-3}{n+k} \sigma^2$$

e, portanto, $\hat{\sigma}^2$ é um estimador viciado do parâmetro σ^2 . Definimos $\hat{\sigma}_c^2$, o estimador corrigido, como

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_c^2 &= \frac{n+k}{n+k-3} \hat{\sigma}^2 = \\ &= \frac{1}{n+k-3} \left(\sum_{i=1}^n (Y_i - a - bx_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (Y_i - \bar{Y}_0)^2 \right) \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

(ii) O estimador de σ^2 , $\hat{\sigma}_c^2$, depende tanto dos n valores iniciais como dos k últimos de Y_i , observados posteriormente para se estimar ξ . Isto não ocorre quando $k=1$, ou seja, quando temos uma única observação da variável aleatória Y_0 ou quando y_0 é um valor fixo. Cumpre salientar que estes são os casos mais comuns na prática.

Este estimador da variância, em termos de soma de quadrados, engloba os desvios devidos a duas fontes de variação:

$$- \sum_{i=1}^n (Y_i - a - bx_i)^2; \text{ a variação devida aos erros do ajuste da linha de calibração, chamada usualmente de soma de quadrados do resíduo;}$$

$$- \sum_{i=n+k}^{n+k} (Y_i - \bar{Y}_0)^2; \text{ a variação devida aos erros de medida da variável } Y_0.$$

Notamos, também, que este estimador de σ^2 com $n+k-3$ graus de liberdade, para $k \geq 1$, tem uma variância menor que a do estimador usual não viciado de σ^2 da regressão simples com $n-2$ graus de liberdade, melhorando, deste modo, a sua estimativa se a suposição de σ^2 for constante nas duas etapas da calibração não for violada.

(iii) Se y_0 é um ponto fixo, temos

$$x_c = \frac{y_0 - a}{b}, \text{ o estimador de } \xi \text{ que foi construído intuitivamente, em (2.1.2), invertendo a linha de regressão ajustada no ponto } (y_0, \xi);$$

e

$$\hat{\sigma}_c = \frac{1}{n-2} \left(\sum_{i=1}^n (Y_i - a - bx_i)^2 \right), \text{ o estimador corrigido de}$$

σ^2 do modelo de regressão simples.

(iv) No estimador de máxima verossimilhança de ξ substituindo $a = \bar{Y} - b\bar{x}$, temos

$$x_c = \bar{x} + \frac{1}{b}(\bar{Y}_0 - \bar{Y}) \quad (2.1.8)$$

(v) Os estimadores a e b dos parâmetros α e β respectivamente, dependem somente dos n primeiros valores (Y_i, x_i) , de modo que toda a teoria de regressão linear simples referente a estes estimadores é válida.

Portanto, segundo Graybill (1976), sob hipótese de normalidade, além de estimadores de máxima verossimilhança, os estimadores a e b são os estimadores lineares não viciados de mínima variância pois são funções da estatística suficiente completa. São também eficientes e consistentes em probabilidade.

(vi) Os estimadores (2.1.6) e (2.1.7) são baseados na estatística suficiente completa dos parâmetros α , β , σ^2 e ξ .

Seja f a função de densidade conjunta de $Y_1, Y_2, \dots, Y_n, Y_{n+1}, Y_{n+2}, \dots, Y_{n+k}$,

$$\begin{aligned} f(y; \alpha, \beta, \sigma^2, \xi) &= \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n+k}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (y_i - \alpha - \beta \xi)^2 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n+k}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n (\alpha + \beta x_i)^2 + k(\alpha + \beta \xi)^2 \right] \right\}. \end{aligned}$$

$$\cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n+k} y_i^2 + \frac{\alpha}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n y_i + \frac{\beta}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i y_i + \frac{\alpha + \beta \xi}{\sigma^2} \sum_{i=n+1}^{n+k} y_i \right\}$$

que podemos escrever na forma:

$$h(\underline{y}) c(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi) \exp \left\{ \sum_{j=1}^4 Q_j(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi) T_j(\underline{y}) \right\}$$

sendo

$$T_1(\underline{y}) = \sum_{i=1}^{n+k} y_i^2 \qquad T_3(\underline{y}) = \sum_{i=1}^n y_i x_i$$

$$T_2(\underline{y}) = \sum_{i=1}^n y_i \qquad T_4(\underline{y}) = \sum_{i=n+1}^{n+k} y_i$$

implicando que a função distribuição acima pertence à família exponencial multi-paramétrica de funções de distribuição com dimensão 4 e que $\underline{T} = (T_1, T_2, T_3, T_4)$ é uma estatística suficiente completa para o parâmetro $\underline{\theta} = (\alpha, \beta, \sigma^2, \xi)$ (ver Teorema 5.6, Seção 1.5, Lehmann (1983)).

Desenvolvendo as fórmulas dos estimadores de máxima verossimilhança de α , β , σ^2 e ξ , notamos que eles dependem das observações $Y_i, i=1, 2, \dots, n+k$, somente através da estatística suficiente completa \underline{T} .

EXEMPLO 2.1 (continuação do Exemplo 1.1)

Seja o exemplo da calibração de um termopar descrito no capítulo anterior. Pela análise de seu gráfico de dispersão (Fig. 1.1), podemos supor que a temperatura real é linearmente relacionada com a temperatura observada e adotar o modelo linear. A linha de calibração por (2.1.2) é:

$$\hat{Y} = -6,6698 + 0,9530x \qquad \text{com } \hat{\sigma}_c^2 = 5,8835 \text{ (se } k=1)$$

A estatística para o teste do modelo (ver Drapper & Smith (1981)) é $t_{obs} = 144,896$, de modo que rejeitamos a hipótese $H_0 : \beta = 0$ e, portanto, a inclinação da reta de calibração é diferente de zero. Os resíduos (Tabela 2.1) da regressão mostram que não existe um comportamento atípico em nenhum ponto. Concluimos que a linha de calibração tem bom ajuste e que pode ser utilizada para estimações da temperatura real correspondente a futuras temperaturas observadas no termopar.

TABELA 2.1: Temperatura estimada pelo modelo.

OBS.	TEMPERATURA OBSERVADA	TEMPERATURA ESTIMADA	ERRO
i	y_i	\hat{y}_i	e_i
1	88,8	88,63	0,17
2	108,7	107,69	1,01
3	129,8	126,75	3,05
4	146,2	145,81	0,39
5	161,6	164,87	-3,27
6	179,9	183,93	-4,03
7	202,4	203,00	-0,60
8	224,5	222,06	2,44
9	245,1	241,12	3,98
10	257,7	260,18	-2,48
11	277,0	279,24	-2,24
12	298,1	298,30	-0,20
13	318,8	317,36	1,44
14	334,6	336,45	-1,82
15	355,2	355,48	-0,28
16	377,0	374,54	2,46

 $\bar{y} = 231,6$

=

Suponhamos que o experimentador obtenha a leitura de $Y_0 = 200^\circ\text{C}$ no termopar e deseje determinar a temperatura real correspondente. Pelo estimador clássico, a estimativa deste ponto (por (2.1.8)) é:

$$x_c = 250 + \frac{1}{0,9530}(200 - 231,5875) = 216,856^\circ\text{C}$$

2.1.2. NOTAÇÃO MATRICIAL

Com as condições do Teorema 2.1.1, podemos construir o estimador do parâmetro (α, β, ξ) usando a notação matricial dos modelos lineares:

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon} \quad (2.1.9)$$

onde

$$\underline{Y}_{(n+k, 1)} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \\ Y_{n+1} \\ Y_{n+2} \\ \vdots \\ Y_{n+k} \end{bmatrix}, \quad \underline{X}_{(n+k, 3)} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & 0 \\ 1 & x_2 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\underline{\beta}_{(3, 1)} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix}, \quad \underline{\varepsilon}_{(n+k, 1)} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_{n+k} \end{bmatrix}$$

são respectivamente as matrizes dos dados observados, de planejamento, dos parâmetros (onde $\gamma = \beta\xi$, implicando que $\xi = \gamma/\beta$) e dos erros.

Pelo método dos mínimos quadrados temos

$$\hat{\beta}' = (a, b, \hat{\gamma}) = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{Y}$$

como o estimador de mínimos quadrados de β . O estimador do parâmetro $\gamma = \xi\beta$ é $\hat{\gamma} = \bar{Y}_0 - a$, e, portanto, o estimador de $\xi = \gamma/\beta$

é $x_c = \frac{\bar{Y}_0 - a}{b}$, o estimador clássico.

2.1.3. APROXIMAÇÕES E RESULTADOS ASSINTÓTICOS

Considerando as suposições do Teorema 2.1.1, podemos afirmar que b tem distribuição normal com média β e variância $\sigma^2 / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, e que $(\bar{Y}_0 - a)$ também tem distribuição normal mas com média $\xi\beta$ e variância $\sigma^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right)$ e que b e

$(\bar{Y}_0 - a)$ são correlacionados com covariância $\sigma^2 \bar{x} / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$. Portanto, $x_c = (\bar{Y}_0 - a)/b$ é o quociente de duas variáveis aleatórias com distribuição normal e correlacionadas, cuja distribuição será considerada a seguir no Teorema 2.1.2. Segundo Williams (1969), esta distribuição tem média indefinida e variância infinita.

Supondo $\beta \neq 0$, Shukla (1972), expandindo a expressão do estimador clássico por séries de Taylor no ponto (α, β) e ignorando os termos de ordem maior que n^{-2} , obteve uma aproximação

para a esperança e a variância, que são dadas por:

$$E(x_c) \approx \xi + \frac{\sigma^2 (\xi - \bar{x})}{\beta^2 S_{XX}} \quad (2.1.8)$$

e

$$\text{Var}(x_c) \approx \frac{\sigma^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{n} + \frac{1}{k} + \frac{3\sigma^2}{k\beta^2 S_{XX}} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right] \quad (2.1.9)$$

Portanto,

$$\text{EQM}(x_c) \approx \frac{\sigma^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{n} + \frac{1}{k} + \frac{3\sigma^2}{k\beta^2 S_{XX}} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right] \quad (2.1.10)$$

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.

A expansão de Taylor para x_c em torno do ponto (η, α, β) , onde η é o verdadeiro valor de Y_0 , é dada por

$$\begin{aligned} x_c &= \frac{\eta - \alpha}{\beta} - (a - \alpha) \frac{1}{\beta} - (b - \beta) \frac{\eta - \alpha}{\beta^2} + (\bar{Y}_0 - \eta) \frac{1}{\beta} + \frac{\eta - \alpha}{\beta^3} (b - \beta)^2 - \\ &\quad - \frac{1}{\beta^2} (\bar{Y}_0 - \eta) (b - \beta) + \frac{1}{\beta^2} (a - \alpha) (b - \beta) + R_2 \end{aligned}$$

sendo R_2 o resto de segunda ordem da expansão. Para a média, por exemplo, temos:

$$\begin{aligned} E(x_c) &\approx \frac{\eta - \alpha}{\beta} - \frac{1}{\beta} E(a - \alpha) - \frac{\eta - \alpha}{\beta^2} E(b - \beta) + \frac{1}{\beta} E(\bar{Y}_0 - \eta) + \frac{\eta - \alpha}{\beta^3} E(b - \beta)^2 - \\ &\quad - \frac{1}{\beta^2} E\left[(\bar{Y}_0 - \eta)(b - \beta)\right] + \frac{1}{\beta^2} E\left[(a - \alpha)(b - \beta)\right] = \\ &= \xi + \frac{\xi}{\beta^2} \text{Var}(b) + \frac{1}{\beta^2} \text{Cov}(a, b) - \frac{1}{\beta^2} \text{Cov}(\bar{Y}_0, b). \end{aligned}$$

Pelo Teorema 2.1.2 (i) que vem a seguir e como $\text{Cov}(\bar{Y}_0, b) = 0$

temos que $E(x_c) = \xi + \frac{\sigma^2(\xi - \bar{x})}{\beta^2 s_{XX}}$, de modo que (2.1.8) segue.

A expressão (2.1.9) pode ser obtida de maneira similar.

Se o número de observações de Y_i , na estimação da linha de calibração, tender a infinito ou seja $n \rightarrow \infty$, pelas aproximações acima temos,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E(x_c) = \xi,$$

isto é, o estimador x_c é assintoticamente não viciado;

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Var}(x_c) = \frac{\sigma^2}{\beta^2 k},$$

de modo que a diminuição da variância de x_c depende não só do aumento do número de observações de Y_0 mas também do aumento da inclinação da reta de calibração, que é o parâmetro β ,

e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{EQM}(x_c) = \frac{\sigma^2}{\beta^2 k}. \quad (2.1.10a)$$

Além disto, se o valor y_0 for fixo sem erro de observação ou se o tamanho da amostra dos Y_0 for muito "grande"

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \text{EQM}(x_c) = 0$$

isto é, o estimador é aproximadamente consistente.

Os resultados (2.1.8), (2.1.9) e (2.1.10) foram obtidos também por Lwin (1981) sem a suposição de normalidade dos erros, admitindo apenas que a distribuição do ϵ pertence a uma família de distribuições com $E(\epsilon) = 0$, $E(\epsilon^2) = \sigma^2$, $E(\epsilon^3) = \mu_3$ e $E(\epsilon^4) = \mu_4 < \infty$.

Devemos ter pelo menos um número "razoável" de observações do par (x_i, Y_i) , $i = 1, \dots, n$, de modo a obter um bom ajuste

da linha de calibração, uma vez que esta escala estimada será utilizada para prever os valores futuros de ξ_j , $j=1, \dots, m$. Por isto é importante verificar a consequência do número de observações (x_i, Y_i) tender a infinito nos estimadores dos parâmetros α , β e ξ . Considerando a observação (v) do Teorema 2.1.1 e pela teoria de regressão simples, temos que os estimadores a e b são consistentes em probabilidade, ou seja,

$$\begin{array}{l} \rho \\ a \rightarrow \alpha \end{array} \quad \begin{array}{l} \rho \\ b \rightarrow \beta \end{array}$$

quando $n \rightarrow \infty$.

Portanto, pelo Teorema de Slutsky (ver, por exemplo, Bickel and Dekson (1977)) temos,

$$x_c \xrightarrow{\rho} \xi$$

isto é, x_c é um estimador consistente em probabilidade para ξ supondo $b \neq 0$ com probabilidade 1 e $\beta \neq 0$.

O estimador clássico de ξ , x_c , definido em (2.1.6), é uma função dos estimadores a e b que depende do tamanho n da amostra dos (Y_i, x_i) somente através de a e b com derivadas de primeira e segunda ordem contínuas em uma vizinhança de $a=\alpha$ e $b=\beta$. Os estimadores a e b são consistentes em probabilidade para α e β respectivamente. Então, nestas condições e com $|\beta| > 0$, pode-se demonstrar (ver Finney (1978)), usando expansão em séries de Taylor até a ordem n^{-1} de x_c e o Teorema do Limite Central, que x_c tem distribuição assintoticamente normal com média ξ e variância

$$\text{Var}_A(x_c) = \frac{\sigma^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x} - \xi)^2}{S_{XX}} \right] \quad (2.1.11)$$

que é estimada por

$$\widehat{\text{Var}}_A(x_c) = \frac{\hat{\sigma}_c^2}{b^2} \left[\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x} - x_c)^2}{S_{XX}} \right] \quad (2.1.12)$$

onde $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, sendo $|b| > 0$.

2.1.4. DISTRIBUIÇÃO DOS ESTIMADORES E DE ALGUMAS ESTATÍSTICAS

Nesta seção estudaremos as distribuições dos estimadores dados em (2.1.6) e algumas de suas propriedades que podem ser resumidas no seguinte teorema:

TEOREMA 2.1.2

Considerando as suposições e o modelo do Teorema 2.1.1 e, também, os estimadores de máxima verossimilhança obtidos em (2.1.6) temos:

(i) os estimadores a e b têm distribuição conjunta normal bivariada com média (α, β) e matriz de covariância dada por:

$$\sigma^2 \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} & - \frac{\bar{x}}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \\ - \frac{\bar{x}}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} & \frac{1}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \end{bmatrix}$$

(ii) a estatística

$$U = (n+k-3) \frac{\hat{\sigma}^2}{\sigma^2}$$

tem distribuição qui-quadrado com $(n+k-3)$ graus de liberdade;

(iii) o estimador x_c tem distribuição com a seguinte densidade:

$$g(x_c) = \frac{g_2(x_c) g_3(x_c)}{\sqrt{2\pi}\sigma_1\sigma_2 g_1^3(x_c)} \Phi\left(\frac{g_2(x_c)}{\sqrt{1-\rho^2} g_1(x_c)}\right) + \frac{\sqrt{1-\rho^2}}{\pi\sigma_1\sigma_2 g_1^2(x_c)} \exp\left\{-\frac{c}{2(1-\rho^2)}\right\}$$

onde

$$g_1(x_c) = \left(\frac{x_c^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho x_c}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{1}{\sigma_2^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$g_2(x_c) = \frac{(\bar{Y}_0 - \alpha)x_c}{\sigma_1^2} - \frac{\rho(\bar{Y}_0 - \alpha + \beta x_c)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{\beta}{\sigma_2^2},$$

$$g_3(x_c) = \exp\left\{\frac{g_2^2(x_c) - c g_1^2(x_c)}{2(1-\rho^2)g_1^2(x_c)}\right\},$$

$$c = \frac{(\bar{Y}_0 - \alpha)^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(\bar{Y}_0 - \alpha)\beta}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{\beta^2}{\sigma_2^2},$$

$\Phi(\omega) = P(-\omega < Z < \omega)$, sendo $Z \sim N(0,1)$,

com

$$\sigma_1^2 = \text{Var}(\bar{Y}_0 - a) = \sigma^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right),$$

$$\sigma_2^2 = \text{Var}(b) = \sigma^2 \left(\frac{1}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right),$$

$$\rho = \frac{\text{Cov}(\bar{Y}_0 - a, b)}{\sigma_1 \sigma_2} \quad (2.1.13)$$

e

$$\text{Cov}(\bar{Y}_0 - a, b) = \sigma^2 \left(\frac{\bar{x}}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right);$$

(iv) o estimador $\hat{\sigma}_c^2$ (2.1.7) é independente dos estimadores a , b e x_c ;

(v) a estatística

$$Z = \frac{\bar{Y}_0 - a - b\xi}{\left(\text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi) \right)^{\frac{1}{2}}}$$

tem distribuição normal com média zero e variância 1 e é independente da estatística U definida no item (ii). Aqui,

$$\text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi) = \sigma^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right), \text{ e}$$

(vi) a estatística

$$T = \frac{Z}{\left(U / (n+k-3) \right)^{\frac{1}{2}}}$$

tem distribuição t-student com $(n+k-3)$ graus de liberdade, onde Z e U são as estatísticas definidas nos itens (v) e (ii) deste teorema.

PROVA

Considerando a observação (v) do Teorema 2.1.1, o item (i) é provado usando resultados bastante conhecidos da regressão simples (veja, por exemplo, Draper e Smith (1981)).

Para a demonstração da segunda parte do teorema, tomemos as estatísticas

$$S_1^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - a - bx_i)^2 \quad \text{e} \quad S_2^2 = \sum_{i=n+1}^{n+k} (Y_i - \bar{Y}_0)^2$$

isto é

$$\hat{\sigma}_c^2 = \frac{1}{n+k-3} (S_1^2 + S_2^2)$$

Pela teoria de regressão simples, $U_1 = \frac{S_1^2}{\sigma^2}$ tem distribuição qui-quadrado com $(n-2)$ graus de liberdade. Supondo $Y_i, i = n+1, \dots, n+k$, com distribuição normal temos que a estatística $U_2 = \frac{S_2^2}{\sigma^2}$ tem distribuição qui-quadrado com $(k-1)$ graus de liberdade. Sendo os $Y_i, i = 1, \dots, n+k$, mutuamente independentes e como U_1 depende dos n primeiros Y_i e U_2 , somente dos k últimos Y_i temos que U_1 e U_2 são independentes. Portanto, a estatística $(U_1 + U_2)$, sendo soma de duas distribuições qui-quadrado independentes, tem distribuição qui-quadrado com $(n+k-3)$ graus de liberdade, ou seja

$$U_1 + U_2 = \frac{S_1^2 + S_2^2}{\sigma^2} = (n+k-3) \frac{\hat{\sigma}_c^2}{\sigma^2}$$

tem distribuição qui-quadrado com $(n+k-3)$ graus de liberdade.

Temos que as variáveis b e $\bar{Y}_0 - a$ têm densidade conjunta normal bivariada, $h(b, \bar{Y}_0 - a)$, com média $(\beta, \beta\xi)$ e matriz de covariância:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \text{Cov}(b, \bar{Y}_0 - a) \\ \text{Cov}(b, \bar{Y}_0 - a) & \sigma_2^2 \end{bmatrix}$$

com σ_1^2 , σ_2^2 e $\text{Cov}(b, \bar{Y}_0 - a)$ definidos em (2.1.13). Sendo $x_c = (\bar{Y}_0 - a)/b$, temos que $(\bar{Y}_0 - a) = x_c b$, e, por transformação de variáveis, temos que a distribuição de x_c é:

$$g(x_c) = \int_{-\infty}^{\infty} |b| h(x_c b, b) db$$

A afirmação do item (iii) é exatamente o resultado desta integral (veja, por exemplo, Hinkley (1969)).

Quanto à quarta parte, usando o modelo matricial (2.1.9) e pela teoria dos modelos lineares com distribuição normal, podemos afirmar que $\hat{\sigma}_c^2$ é independente dos estimadores $(a, b, \hat{\gamma})$, sendo $\hat{\gamma} = b x_c$ onde $\gamma = \beta\xi$. Como o estimador x_c depende somente de b e $\hat{\gamma}$ implica que $\hat{\sigma}_c^2$ é, também, independente de x_c .

A distribuição da estatística Z é normal, pois é uma combinação linear das variáveis aleatórias Y_i , $i = n+1, \dots, n+k$, com distribuição normal de média $\alpha + \beta\xi$ e variância σ^2 , e das variáveis aleatórias a e b também com distribuição normal, pelo item (i) deste teorema. Os parâmetros da distribuição da estatística Z são

$$E(Z) = \frac{1}{\left(\text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi)\right)^{\frac{1}{2}}} E(\bar{Y}_0 - a - b\xi) =$$

$$= \frac{1}{\left(\text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi)\right)^{\frac{1}{2}}} (\alpha + \beta\xi - \alpha - \beta\xi) = 0$$

$$\text{Var}(Z) = \frac{1}{\text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi)} \text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi) = 1$$

onde

$$\begin{aligned} \text{Var}(\bar{Y}_0 - a - b\xi) &= \text{Var}(\bar{Y}_0) + \text{Var}(\bar{Y}) + \text{Var}(b)(\bar{x} - \xi)^2 = \\ &= \sigma^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x} - \xi)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right) \end{aligned}$$

Para demonstrar o item (vi), temos que provar que as estatísticas Z e U são independentes. A estatística Z é função das variáveis \bar{Y}_0 , a e b , enquanto que a estatística U é função da variável $\hat{\sigma}_c^2$. Sabemos, pela parte (iv), que a e b são independentes de $\hat{\sigma}_c^2$. Como foi feito na demonstração do item (ii), a variável $\hat{\sigma}_c^2$ pode ser particionada na soma de U_1 e U_2 , sendo U_1 independente de \bar{Y}_0 . Portanto, basta provar que \bar{Y}_0 e U_2 são independentes para concluir a independência de Z e U . Pela notação matricial (2.1.9) podemos escrever:

$$U_2 = \underline{Y}' (\underline{I}^* - \underline{A}(\underline{A}'\underline{A})^{-1}) \underline{Y} \quad e$$

$$\underline{Y}_0 = (\underline{A}'\underline{A})^{-1} \underline{A}'\underline{Y}$$

onde

$$(\underline{n+k}, \underline{n+k}) \underline{I}^* = \begin{bmatrix} \underline{0}(n, n) & \underline{0}(n, k) \\ \underline{0}(k, n) & \underline{I}(k, k) \end{bmatrix} \quad e$$

$$\begin{pmatrix} \underline{A}' \\ (1, \underline{n+k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{0} & \underline{1} \\ (1, n) & (1, k) \end{pmatrix}$$

sendo \underline{I} a matriz identidade de ordem k . O produto:

$$\left[(\underline{A}' \underline{A})^{-1} \underline{A}' \right] \left[\underline{I}^* - \underline{A} (\underline{A}' \underline{A})^{-1} \underline{A}' \right]$$

é nulo e, então, pelo teorema de independência de formas lineares e quadráticas (ver Graybill (1976)), temos que U_2 e \bar{Y}_0 são independentes.

Obtemos imediatamente a distribuição da estatística T considerando os itens (ii) e (v), a independência das estatísticas U e Z e a definição da distribuição t -student.

Este teorema será útil, principalmente, na construção de intervalos de confiança e de intervalos de confiança simultâneos para o estimador clássico que serão abordados nas próximas seções.

2.1.5. ESTIMADORES CLÁSSICOS MODIFICADOS

O fato do estimador clássico, com $|\beta| > 0$, ser viciado e a procura de um estimador de ξ com variância mínima fizeram Williams (1969) definir outro estimador para ξ . Este estimador é baseado no Teorema de Lehmann-Scheffé (ver seção 2.1, Teorema 1.2, Lehmann (1983)) que afirma que se existe um estimador não viciado de uma função paramétrica e se existe uma estatística suficiente completa para os parâmetros desta função, então a esperança do estimador não viciado condicionado à estatística suficiente completa é o estimador não viciado e de variância mínima (MVU) da função dos parâmetros.

No caso, a função paramétrica é

$$\xi = \frac{\eta - \alpha}{\beta},$$

sendo η o valor esperado de Y_0 e α e β os parâmetros da linha de calibração.

Pela observação (vi) do Teorema 2.1.1 (considerando σ^2 conhecido), temos que $\left(\sum_{i=1}^n y_i, \sum_{i=1}^n x_i y_i, \sum_{i=n+1}^{n+k} y_i \right)$ ou equivalentemente (\bar{y}, b, \bar{Y}_0) é uma estatística suficiente completa para o parâmetro $\theta^* = (\alpha, \beta, \xi)$. Pelo Teorema 2.1.2, estas estatísticas têm distribuição normal e são mutuamente independentes.

Supondo β conhecido, um estimador não viciado para ξ é dado por

$$\bar{x} + \frac{\bar{Y}_0 - \bar{Y}}{\beta}$$

Sendo a variância de b conhecida, podemos provar que o único estimador não viciado de β^{-1} baseado em b é $h(b)$ onde

$$h(b) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_2^2} \exp\left(\frac{b^2}{2\sigma_2^2}\right) \int_b^{\infty} \exp\left(-\frac{t^2}{2\sigma_2^2}\right) dt & \text{se } \beta > 0 \\ \frac{1}{\sigma_2^2} \exp\left(\frac{b^2}{2\sigma_2^2}\right) \int_{-\infty}^b \exp\left(-\frac{t^2}{2\sigma_2^2}\right) dt & \text{se } \beta < 0 \end{cases} \quad (2.1.14)$$

$$\text{sendo } \sigma_2^2 = \text{Var}(b) = \sigma^2 / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

Assim o estimador não viciado de ξ , definido por Williams (1969) e baseado na estatística suficiente completa é dado por

$$x_c^* = \bar{x} + h(b)(\bar{Y}_0 - \bar{Y}) \quad (2.1.15)$$

Apesar desta função $h(b)$ ser tabelada (ver, por exemplo, Sheppard (1939)), temos duas objeções teóricas para o seu uso. A primeira, menos importante, é que devemos saber o sinal do parâmetro β antes da escolha do estimador. Isto pode ser auxiliado por argumentos teóricos pertinentes ao próprio experimento ou pelo teste de significância estatística de β . A sua maior desvantagem é considerar a variância de b e, em consequência, a variância de σ^2 , conhecida. Para utilizar o estimador (2.1.15), na prática, temos que substituir σ^2 por seu estimador corrigido (2.1.7). Mas, infelizmente, como (2.1.14) é uma expansão de potências de σ , quando substituirmos as potências de σ por seus estimadores não viciados correspondentes, obtemos séries divergentes e, portanto, x_c^* só pode ser visto, neste caso, como ótimo assintoticamente. Segundo Williams (1969), esta limitação no uso de x_c^* é de importância mais teórica do que prática.

A variância de $h(b)$ é infinita e, em consequência, a variância de x_c^* também é infinita e como, por construção, x_c^* é o estimador não viciado de variância mínima, temos que não existe um estimador para ξ não viciado com variância finita.

Naszódi (1978) propôs outro estimador para ξ , baseado na esperança aproximada, por expansão de Taylor, do estimador clássico (2.1.8) quando o valor esperado do resto desta aproximação for desprezível. Considerando o resto de Lagrange da aproximação de Taylor de 2.^a ordem, para que o valor esperado do resto seja pequeno, basta que a distribuição de b seja tal que o estimador de $\alpha + \beta\bar{x}$ seja independente de b ; a densidade de b seja unimodal e simétrica, e exista um limite, q , de modo que a densidade de b seja zero para os valores no domínio $b \leq q$ (se $q > 0$) ou $b \geq q$ (se $q < 0$).

O viés aproximado de x_c , por (2.1.8)

$$\text{Vies}(x_c) = \frac{(\xi - \bar{x})\sigma^2}{\beta^2 S_{XX}}$$

Notamos que o valor absoluto deste viés aumenta linearmente com o distanciamento de \bar{x} . Admitindo as suposições acima sobre a distribuição de b para que o resto da expansão de Taylor seja desprezível, o viés do estimador clássico pode ser praticamente eliminado do seguinte modo. Seja

$$\widehat{\text{Viés}}(x_c) = \frac{(x_c - \bar{x})\sigma^2}{S_{XX} b^2}$$

um estimador do viés de x_c . Usando o estimador

$$x_c^{**} = x_c - \widehat{\text{Viés}}(x_c^{**}) \quad (2.1.16)$$

no lugar de x_c , o viés desaparece na aproximação considerada. Reescrevendo (2.1.16), temos

$$x_c^{**} = \bar{x} + \frac{1}{b + \sigma^2 / b S_{XX}} (Y_0 - \bar{Y}) \quad (2.1.17)$$

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$

* Tucker (1980) desenvolveu um estimador mais realista, semelhante ao proposto por Nazōdi (1978), apenas substituindo, no viés estimado (2.1.16), a variância σ^2 por seu estimador corrigido (2.1.7), obtendo:

$$x_c^{***} = \bar{x} + \frac{1}{b + \hat{\sigma}_c^2 / b S_{XX}} (Y_0 - \bar{Y}) \quad (2.1.18)$$

Demonstrou que este estimador tem erro quadrado médio finito e, conseqüentemente, também variância finita. Com a supo-

sição de normalidade dos erros, provou que x_c^{***} tem todas as "boas" propriedades (consistência, eficiência, etc.) do estimador de máxima verossimilhança e que é o único estimador, para uma aproximação da ordem n^{-1} , não viciado e de variância mínima (MVU).

EXEMPLO 2.2

Retornando ao exemplo da calibração do termopar, quando o experimentador deseja estimar o verdadeiro valor da temperatura correspondente à leitura de 200°C . Pelo estimador de Tucker, (2.1.18), o valor estimado é

$$x_c^{***} = 250 + \frac{1}{0,9530 + \frac{5,8835}{0,9530 \times 136000}} =$$

$$= (200 - 231,5875) = 216,857^{\circ}\text{C}$$

que é bastante próximo da estimativa obtida utilizando-se o estimador clássico.

2.2. ESTIMADOR CLÁSSICO POR INTERVALO DE CONFIANÇA

Nesta seção apresentaremos dois métodos de construir um intervalo de confiança do parâmetro ξ para um dado Y_0 , com grau (ou coeficiente) de confiança $(1-\alpha)$. O primeiro utiliza as distribuições amostrais dos estimadores dos parâmetros α , β , e σ e o outro, mais simples de ser calculado, é baseado na distribuição assintótica do estimador x_c . Os intervalos de confiança simultâneos, isto é, para diversos $\xi_j, j = 1, \dots, m$, conjuntamente, sendo dados os seus respectivos valores $Y_{0j}, j = 1, \dots, m$, com grau de confiança conjunto $(1-\alpha)$, serão discutidos na Seção 2.3.

Como feito, para o estimador pontual na Seção 2.1, podemos construir um intervalo para ξ intuitivamente, baseado na regressão simples entre x e Y . Pela teoria da regressão, o intervalo de confiança para a variável aleatória Y com um coeficiente de $(1-\alpha)$ dado um x qualquer são as duas curvas Y_{sup} e Y_{inf} , de modo que $Y_{inf} < Y < Y_{sup}$, onde

$$Y_{sup} = \hat{Y} + t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

e

(2.2.1)

$$Y_{inf} = \hat{Y} - t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

que são funções de x , sendo $t_{\alpha/2}$ a abcissa da distribuição t -student correspondente à probabilidade $(1-\alpha/2)$ e com grau de liberdade equivalente a da distribuição do estimador de σ^2 (ver, por exemplo, Drapper & Smith (1981)). Geometricamente, o intervalo para Y é apresentado na Figura 2.2.1.

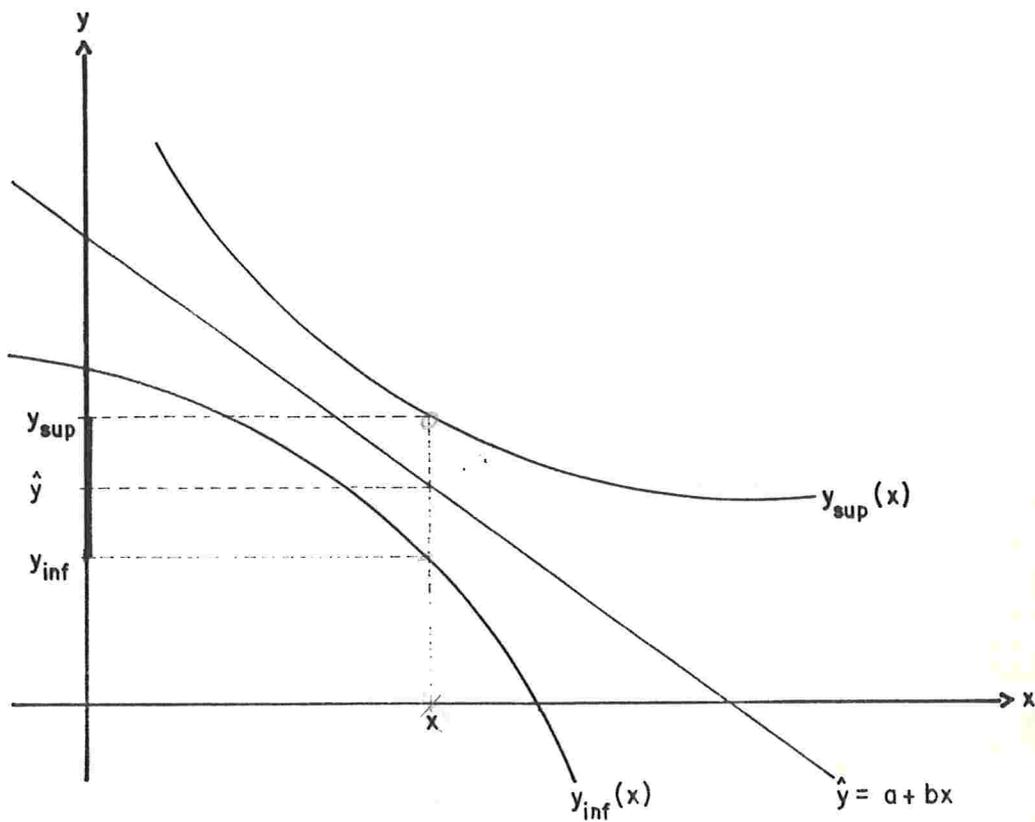


Figura 2.2.1: Intervalo para y dado x

Reescrevendo a equação 2.2.1 onde substituímos $\hat{Y} = a + bx$, temos mais explicitamente a função em \bar{x} ,

$$Y_{sup} = a + bx + t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

e

(2.2.2)

$$Y_{inf} = a + bx - t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.

Invertendo, as curvas Y_{sup} e Y_{inf} tornam-se funções de Y , de modo que, para cada Y fixado, obtemos, em cada uma das duas curvas, um valor de x . Fazendo Y no ponto y_0 fixado, não sujeito a erro de observação, nas equações (2.2.2), temos

$$y_0 = a + bx_{\text{sup}} + t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_{\text{sup}} - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

e

(2.2.3)

$$y_0 = a + bx_{\text{inf}} - t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_{\text{inf}} - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{\frac{1}{2}},$$

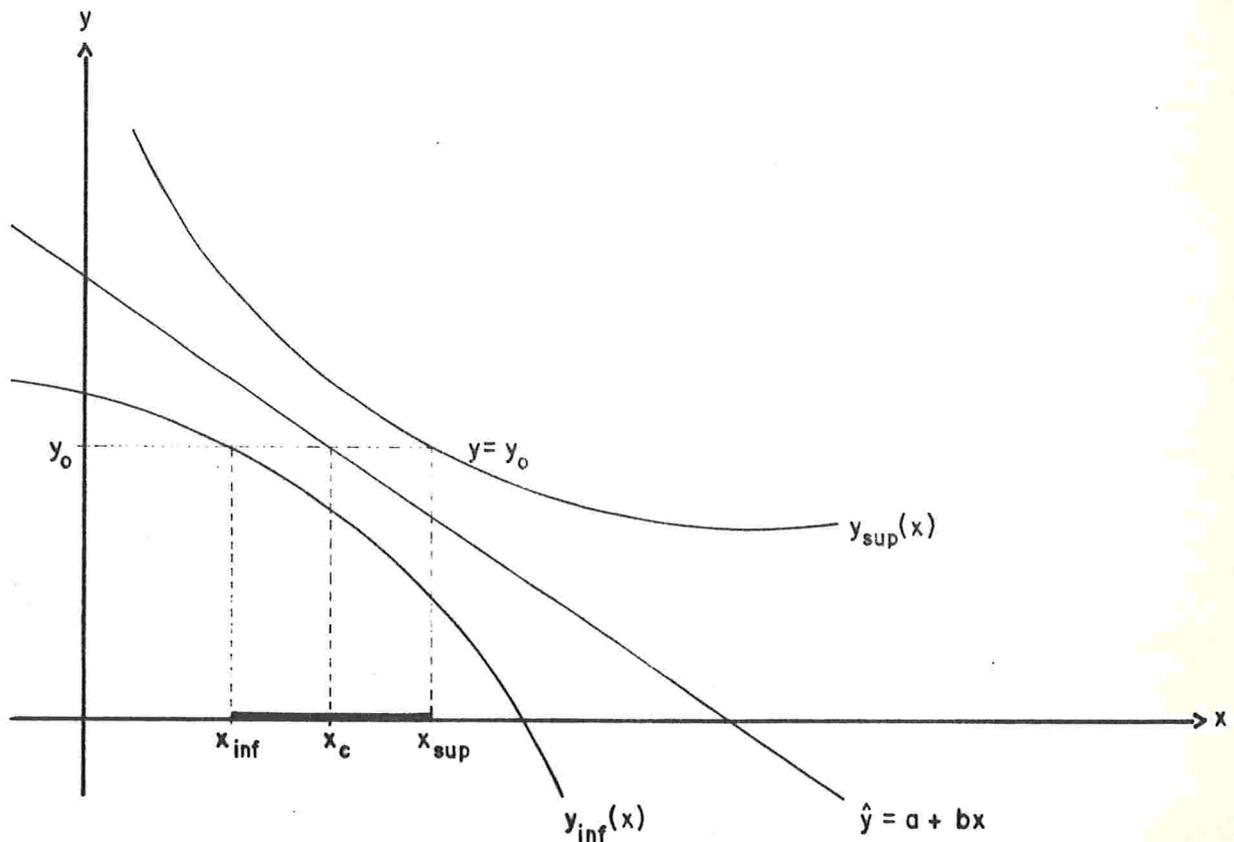


Figura 2.2.2 : Intervalo para x_c dado y_0

sendo que os únicos valores desconhecidos nestas equações são x_{sup} e x_{inf} , os quais podemos considerar como os limites superior e inferior, respectivamente, de um intervalo de confiança para o parâmetro ξ . Graficamente esta "inversão" das funções pode ser vista na Figura (2.2.2).

Podemos reescrever as equações (2.2.3) como

$$x_{\text{sup}} = \bar{x} + \frac{b(y_0 - \bar{Y}) + t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left\{ \left[(y_0 - \bar{Y})^2 / S_{XX} \right] + b^2/n - \frac{D}{n} \right\}^{\frac{1}{2}}}{b^2 - D}$$

e

$$x_{\text{inf}} = \bar{x} + \frac{b(y_0 - \bar{Y}) - t_{\alpha/2} \hat{\sigma} \left\{ \left[(y_0 - \bar{Y})^2 / S_{XX} \right] + b^2/n - \frac{D}{n} \right\}^{\frac{1}{2}}}{b^2 - D}$$

(2.2.4)

onde $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, $D = t_{\alpha/2}^2 \hat{\sigma}^2 / S_{XX}$

sendo $\hat{\sigma}^2$ o estimador do parâmetro σ^2 e, pelo que já foi visto (Observação 2.1, itens (i) e (ii)), estimado por

$$\hat{\sigma}_c^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (Y_i - a - bx_i)^2.$$

Portanto, o valor $t_{\alpha/2}$ deve ser calculado a partir da distribuição t-student com n-2 graus de liberdade.

Notemos, também, que existem situações em que o intervalo não pode ser construído: quando (Figura 2.2.3a) não existe intersecção entre a linha $Y = y_0$ e as curvas do limite inferior e superior (no caso, raízes complexas) de modo que o intervalo não pode ser definido ou quando (Figura 2.2.3b) a linha $Y = y_0$ intercepta duas vezes a mesma curva (temos raízes reais, mas ambas do mesmo lado da linha de regressão) sendo o suposto intervalo duas semi retas infinitas.

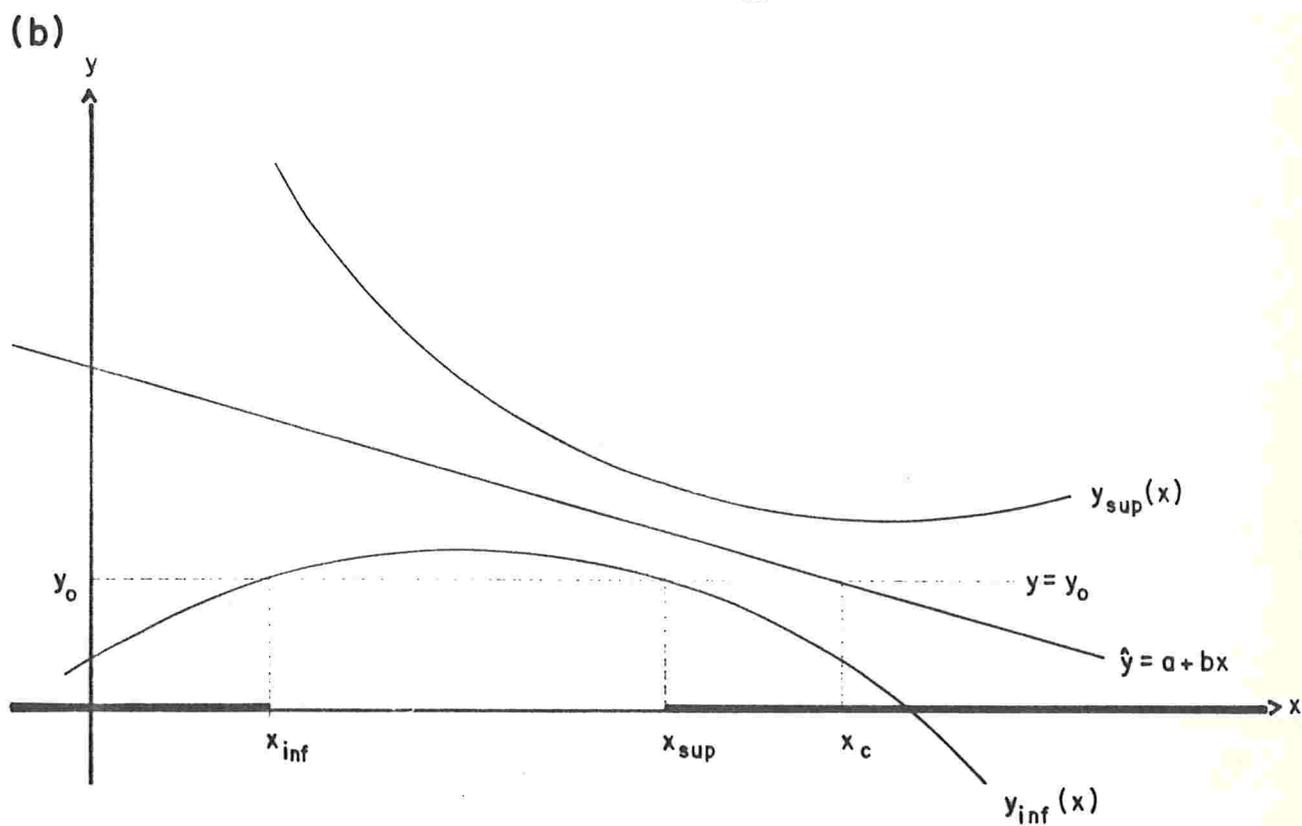
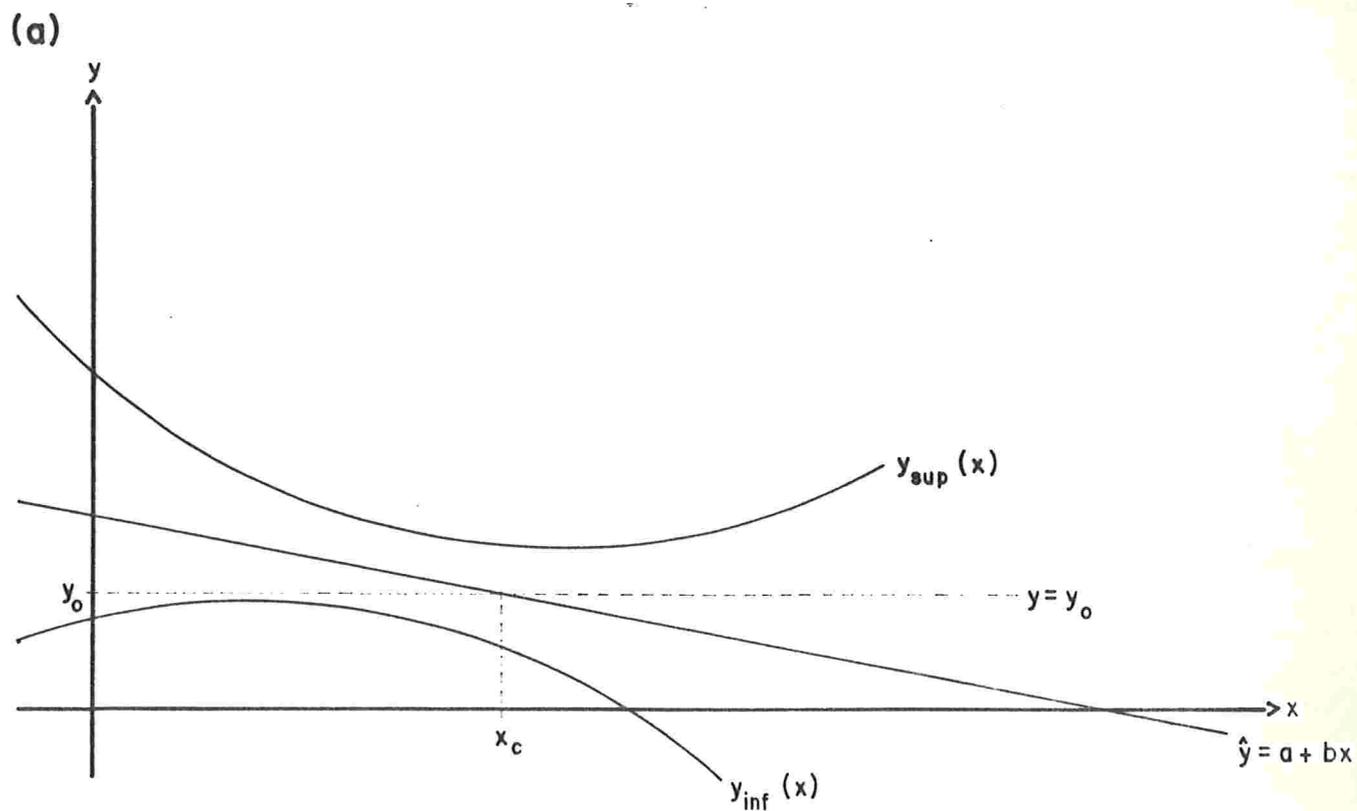


Figura 2.2.3: Casos em que o intervalo para x_c dado y_0 não pode ser construído

Outra maneira, mais formal, de se obter este mesmo resultado é considerando o Teorema 2.1.2. Seja a estatística T definida no item (vi) do Teorema 2.1.2. Podemos calcular a probabilidade desta estatística pertencer a um determinado intervalo

$$P(-t_{\alpha/2} \leq T \leq t_{\alpha/2}) = (1 - \alpha) \quad (2.2.5)$$

sendo, de acordo com o teorema, $t_{\alpha/2}$ a abscissa da distribuição t-student com $(n+k-3)$ graus de liberdade. Assim, substituindo os respectivos valores, temos

$$P((\bar{Y}_0 - a - b\xi)^2 - \hat{\sigma}_c^2 A t_{\alpha/2}^2 \leq 0) = (1 - \alpha)$$

onde

$$A = \frac{1}{n} + \frac{1}{k} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (2.2.6)$$

sendo ξ o único parâmetro desconhecido da desigualdade, entre parênteses acima, e, portanto, podemos escrever

$$P(q(\xi) \leq 0) = (1 - \alpha)$$

Expandindo esta função $q(\xi)$, obtemos a seguinte desigualdade em ξ :

$$q(\xi) = (b^2 - D)\xi^2 + 2\left[\bar{x}D - b(\bar{Y}_0 - \bar{Y}) - b^2\bar{x}\right]\xi + \left[(\bar{Y}_0 - a)^2 - DS_{XX}\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{XX}}\right)\right] \leq 0 \quad (2.2.7)$$

onde $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ e $D = t_{\alpha/2}^2 \hat{\sigma}_c^2 / S_{XX}$.

Resolvendo em ξ a inequação (2.2.7), calculamos as duas raízes

$$\xi_1 = \bar{x} + \frac{b(\bar{Y}_0 - \bar{Y})}{\lambda} + \frac{t_{\alpha/2} \hat{\sigma}_c}{\lambda} \left[\lambda \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{k} \right) + \frac{(\bar{Y}_0 - \bar{Y})^2}{S_{XX}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.2.8)$$

e

$$\xi_2 = \bar{x} + \frac{b(\bar{Y}_0 - \bar{Y})}{\lambda} - \frac{t_{\alpha/2} \hat{\sigma}_c}{\lambda} \left[\lambda \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{k} \right) + \frac{(\bar{Y}_0 - \bar{Y})^2}{S_{XX}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

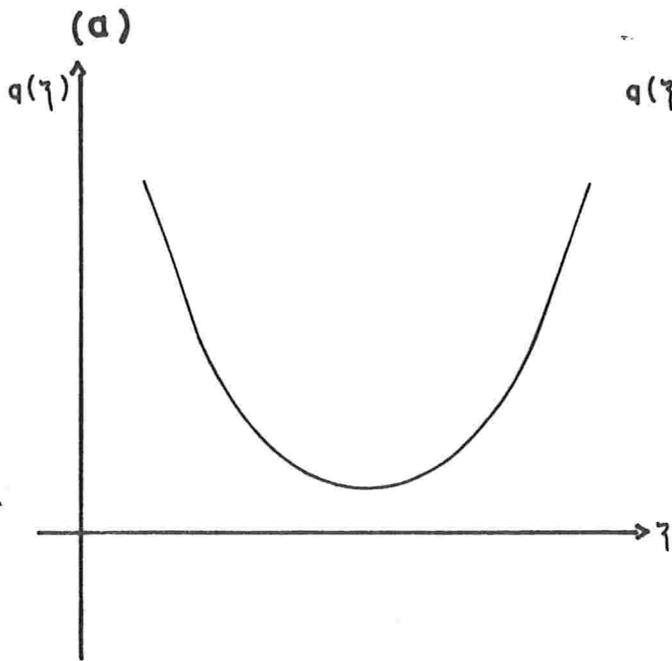
$b^2(1/k)$

onde $\lambda = b^2 - (t_{\alpha/2}^2 \hat{\sigma}_c^2 / S_{XX})$ e $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$. $\lambda \left[\frac{1}{n} + \frac{1}{k} \right]$

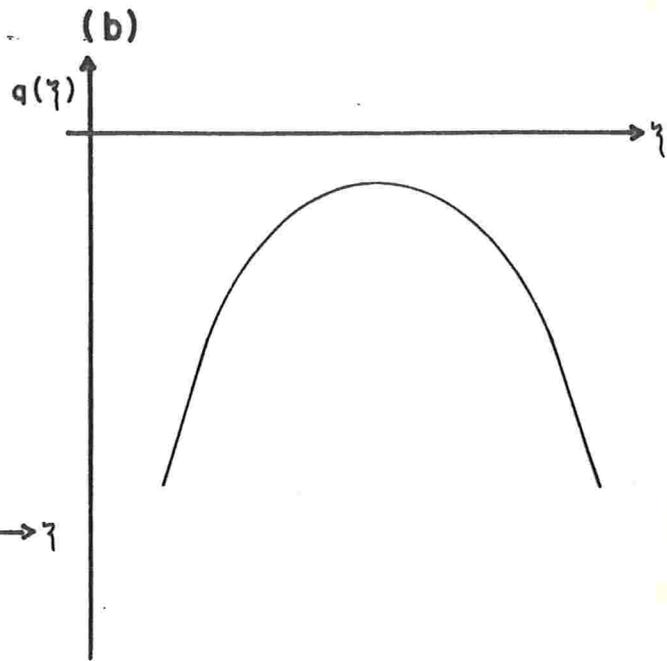
$b^2 \left[1 - \frac{t^2 \hat{\sigma}_c^2}{S_{XX}} \right]$

Deste modo, o intervalo de confiança para ξ com grau $(1-\alpha)$, quando existe, é a semi-reta entre as duas raízes acima. Observamos que, para y_0 fixo, o fator $(1/k)$ desaparece e este resultado é idêntico ao obtido anteriormente intuitivamente em (2.2.4), e, também, é igual ao calculado através do Teorema de Fieller (Fieller (1940)), referente à determinação do intervalo de confiança para o quociente de dois parâmetros.

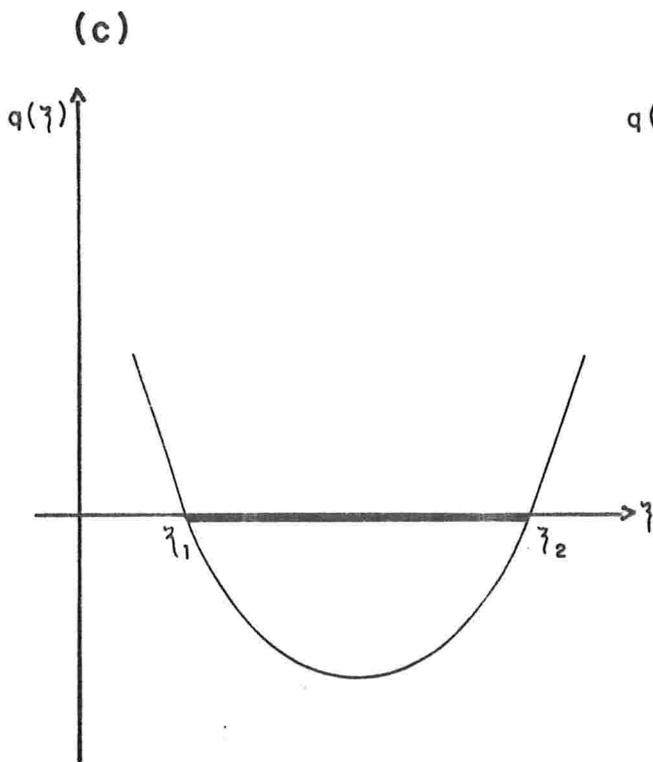
O conjunto de pontos que satisfazem a desigualdade (2.2.7) pode se constituir de um intervalo finito, duas semi-retas ou a linha real inteira (Figura 2.2.4). Seja Δ o discriminante da inequação do segundo grau (2.2.7). Se $\Delta < 0$, a função $q(\xi)$ não tem raízes reais e neste caso: ou $q(\xi) < 0$ para todo ξ (Figura 2.2.4b) e, então, o intervalo é $-\infty < \xi < \infty$ (isto ocorre quando o coeficiente do termo quadrático em ξ , digamos Q , for negativo); ou $q(\xi) > 0$ para todo ξ (Figura 2.2.4a) de modo que não existem valores que satisfaçam (2.2.7) (ocorre quando $Q > 0$). Outra possibilidade é o $\Delta > 0$. Neste caso, se $Q < 0$, ou seja, o coeficiente do termo quadrático for negativo (Figura 2.2.4d), os pontos formam duas semi-retas infinitas ($-\infty < \xi < \xi_1$ e $\xi_2 < \xi < \infty$) constituindo um intervalo não utilizável, e, finalmente, se $Q > 0$ (Figura 2.2.4c) os valores para os quais $q(\xi) \leq 0$ estão entre



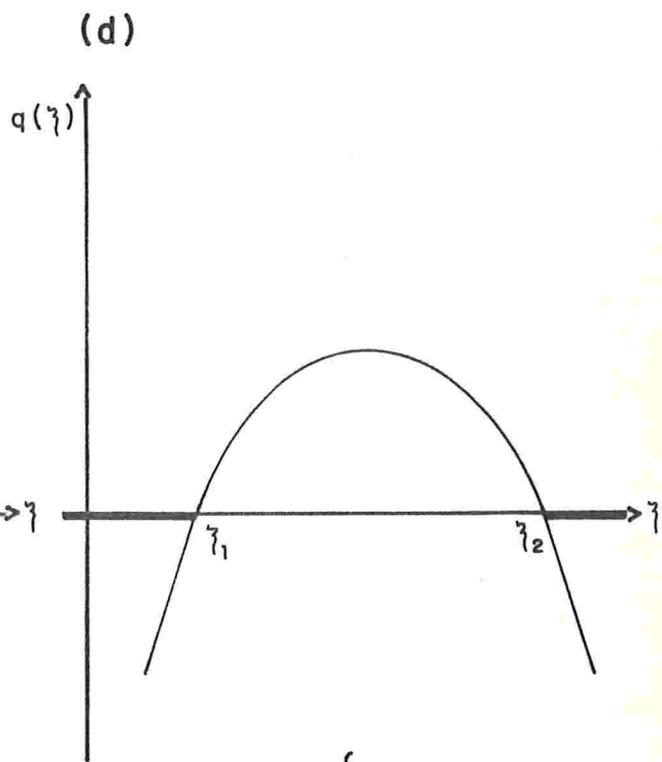
$\Delta < 0, Q > 0 \Rightarrow$ não existe intervalo



$\Delta < 0, Q < 0 \Rightarrow -\infty < \gamma < \infty$



$\Delta > 0, Q > 0 \Rightarrow \gamma_1 < \gamma < \gamma_2$



$\Delta > 0, Q < 0 \Rightarrow \begin{cases} -\infty < \gamma < \gamma_1 \\ \gamma_2 < \gamma < \infty \end{cases}$

Figura 2.2.4 : Análise da função $q(\gamma)$

as duas raízes ($\xi_1 < \xi < \xi_2$), resultando o intervalo de confiança desejado.

Concluimos, depois da discussão acima, que o intervalo existe se e somente se

$$\Delta = DS_{XX} \left[\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \right) (b^2 - D) + \frac{(b\bar{x} - \bar{Y}_0 + a)^2}{S_{XX}} \right] > 0$$

e (2.2.9)

$$b^2 - D \geq 0$$

onde $D = \hat{\sigma}_c^2 t_{\alpha/2}^2 / S_{XX}$ e $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.

Notemos que a segunda condição estando satisfeita, implica imediatamente que a primeira também está. Basta portanto que

$$b^2 - \frac{\hat{\sigma}_c^2 t_{\alpha/2}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} > 0$$

ou, simplificando,

$$\frac{|b|}{(\widehat{\text{Var}}(b))^{1/2}} > t_{\alpha/2} \quad (2.2.10)$$

que é justamente quando o teste de tamanho α para a hipótese $H_0 : \beta = 0$ versus $H_1 : \beta \neq 0$ é significativo.

O fenômeno descrito acima, no qual o intervalo pode ser indefinido, ou a linha real inteira ou a união de duas semi-retas infinitas, é referido na literatura como efeito de Fieller-Creasy (ver Lieberman et al. (1967)).

Notemos que a variância σ^2 estimada baseada em $n+k-3$ graus

de liberdade é menor que a variância amostral com $n-2$, isto é, de um experimento com uma única observação de Y_0 e que o valor da constante $t_{\alpha/2}$ da distribuição t-student com $n+k-3$ graus de liberdade é, também, menor que o correspondente valor com parâmetro $n-2$. Estes dois fatos implicam (Cox (1971)) que os intervalos com réplicas de Y_0 em média são mais estreitos e os coeficientes do termo ξ^2 da equação (2.2.7) são ^{maiores} menores do que aqueles com uma única observação, de modo que a probabilidade de se obter intervalos finitos para ξ é maior quando observamos réplicas de Y_0 ($k > 1$).

A principal desvantagem deste intervalo é ser o comprimento do intervalo (2.2.8) afetado pelo valor \bar{Y}_0 , aumentando com o crescimento de $|\bar{Y}_0 - \bar{Y}|$. Mas este método sempre produz intervalos, quando existem, simétricos em torno do ponto estimado. Quanto ao grau de confiança do intervalo construído acima, podemos garantir que é $(1-\alpha)100\%$ dado que a condição (2.2.9) está satisfeita, ou seja que a hipótese $H_0 : \beta = 0$ é rejeitada.

EXEMPLO 2.3 (continuação do Exemplo 1.1)

Ilustremos a construção de um intervalo de confiança com o exemplo da calibração. A estatística do teste de significância de β , como visto no Exemplo 2.1, é $t_{\text{obs}} = 144,896$, de modo que rejeitamos, ao nível de 5%, a hipótese $H_0 : \beta = 0$ e podemos garantir a existência de um intervalo com 95% de confiança para ξ .

Suponhamos que desejamos o intervalo, com grau de 95% de confiança, para o valor correspondente à leitura de 200°C no termopar. Por (2.2.8) temos

$$x_{\text{sup}} = 216,488 + 5,649 = 222,137^\circ\text{C}$$

e

$$x_{\text{inf}} = 216,488 - 5,649 = 210,839^{\circ}\text{C}$$

que é um intervalo de 95% de confiança para ξ , com comprimento de $11,298^{\circ}\text{C}$, condicionado à rejeição de $H_0 : \beta = 0$.

Um intervalo de confiança aproximado para ξ pode ser obtido considerando a distribuição amostral assintótica de x_c considerada na Seção 2.1.3, e com a variância assintótica estimada por (2.1.12).

Temos que a estatística

$$\frac{\frac{\xi - x_c}{(\text{Var}_A(x_c))^{1/2}}}{\left((n+k-3) \frac{\widehat{\text{Var}}_A(x_c)}{\text{Var}_A(x_c)} / (n+k-3) \right)^{1/2}} = \frac{\xi - x_c}{(\widehat{\text{Var}}_A(x_c))^{1/2}}, \quad (2.2.11)$$

sendo $\text{Var}_A(x_c)$ a variância assintótica de x_c e $\widehat{\text{Var}}_A(x_c)$ a variância assintótica estimada, tem distribuição t-student com $n+k-3$ graus de liberdade. Portanto, podemos construir um intervalo de confiança de grau $(1-\alpha)$ para ξ , aproximado para grandes amostras do par (x_i, Y_i) , que é dado por

$$x_c - t_{\alpha/2} \sqrt{\widehat{\text{Var}}_A(x_c)} < \xi < x_c + t_{\alpha/2} \sqrt{\widehat{\text{Var}}_A(x_c)} \quad (2.2.12)$$

Este intervalo é muito semelhante ao anterior se

$$\frac{t_{\alpha/2}^2 \widehat{\sigma}_c^2}{S_{XX} b^2} < 0,05, \quad (2.2.13)$$

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, mas sua amplitude é bastante subestimada caso contrário (Finney (1978)).

EXEMPLO 2.4 (continuação do Exemplo 1.1)

Considerando a distribuição assintótica de x_c , um intervalo aproximado de 95% de confiança para a temperatura real correspondente à leitura de 200°C observada no termopar é

$$x_{\text{sup}} = 216,86 + 5,653 = 222,51^\circ\text{C}$$

e

$$x_{\text{inf}} = 216,86 - 5,653 = 211,21^\circ\text{C}$$

Comparando com o intervalo calculado no Exemplo 2.3, vemos que são semelhantes. Este resultado é esperado pois

$$\frac{t_{\alpha/2}^2 \hat{\sigma}_c^2}{S_{XX} b^2} = \frac{2,19}{1,02} \times 10^{-4}$$

satisfaz a condição (2.2.13).

2.3. ESTIMADOR CLÁSSICO POR INTERVALO DE CONFIANÇA SIMULTÂNEO

A teoria desenvolvida na Seção 2.2 pode ser estendida para o problema de se encontrar m intervalos simultâneos (também chamados de intervalos de discriminação nos ensaios biológicos) para ξ_j , $j = 1, 2, \dots, m$, com probabilidade conjunta $(1-\alpha)$, correspondentes a m diferentes valores de Y_{0j} , $j = 1, \dots, m$. Cada Y_{0j} pode ter k repetições, isto é, Y_{0ij} , $i = 1, \dots, k$, $j = 1, \dots, m$.

Em seguida, será analisado o caso, que mais frequentemente ocorre na prática, no qual o número de futuras observações, m , não é conhecido. Este caso é, usualmente, chamado de intervalo de confiança simultâneo ilimitado.

2.3.1. INTERVALOS DE CONFIANÇA SIMULTÂNEOS LIMITADOS

Este problema foi tratado inicialmente por Mandel (1958). Para construí-los (sendo k fixas futuras observações de cada Y_0), atualmente, são utilizados três métodos: o de Bonferroni, o de Scheffé e o do módulo máximo (Tukey), sendo todos os três baseados na distribuição da estatística T , definida no Teorema 2.1.2 (item (vi)) em cada futuro ponto \bar{Y}_{0j} . Miller (1981) descreve detalhadamente as propriedades das três técnicas mencionadas acima.

O intervalo simultâneo de Bonferroni considera, para cada

ponto $\bar{Y}_{0j} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_{0ij}$, a estatística T e através da desigual-

dade de Bonferroni podemos escrever

$$P\left(\left|\frac{\bar{Y}_{0j}^{-a-b\xi_j}}{\widehat{\text{Var}}(\bar{Y}_{0j}^{-a-b\xi_j})^{\frac{1}{2}}}\right| < t_{\alpha/2m}, j = 1, \dots, m\right) \geq (1-\alpha), \quad (2.3.1)$$

onde $t_{\alpha/2m}$ é o $(\alpha/2m)$ -ésimo percentil da distribuição t-student com $(n+k-3)$ graus de liberdade, cujos valores aos níveis $\alpha = 0,05$ e $\alpha = 0,01$ estão tabelados no Anexo, Tabela 1 (Dunn (1961)). Imediatamente, comparando as expressões (2.3.1) e (2.2.5), temos que o intervalo resultante para cada ξ_j , $j = 1, \dots, m$, é equivalente ao encontrado na seção anterior (2.2.8), mas com a constante crítica $t_{\alpha/2m}$ no lugar de $t_{\alpha/2}$. Por uma discussão semelhante a já feita na Seção 2.2, obtemos sua condição de existência

$$b^2 > \frac{t_{\alpha/2m}^2 \hat{\sigma}_c^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

que corresponde ao teste de tamanho (α/m) para hipótese $H_0 : \beta = 0$ versus $H_1 : \beta \neq 0$.

O intervalo de Scheffé provém da desigualdade

$$P\left(\left|\frac{\bar{Y}_{0j}^{-a-b\xi_j}}{\widehat{\text{Var}}(\bar{Y}_{0j}^{-a-b\xi_j})^{\frac{1}{2}}}\right| \leq (mF_\alpha)^{\frac{1}{2}}, j = 1, \dots, m\right) \geq (1-\alpha), \quad (2.3.2)$$

sendo F_α o α -ésimo percentil da distribuição de Fisher-Snedecor com parâmetro $(m, n+k-3)$. A única alteração deste intervalo de discriminação em relação ao anterior é a constante, sendo substituída por $(mF_\alpha)^{\frac{1}{2}}$ e existindo quando

$$b^2 > \frac{mF_\alpha \hat{\sigma}_c^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

Por último, o intervalo simultâneo do módulo máximo baseia-se na seguinte probabilidade

$$P\left(\max_{j=1, \dots, m} |T_j| \leq q_\alpha\right) = (1-\alpha),$$

onde

$$T_j = \frac{\bar{Y}_{0j}^{-a-b\xi_j}}{\left(\widehat{\text{var}}(\bar{Y}_{0j}^{-a-b\xi_j})\right)^{\frac{1}{2}}},$$

sendo q_α o α -ésimo percentil da distribuição do máximo de m variáveis com distribuição t-student central com $(n+k-3)$ graus de liberdade, tabelada no Anexo, Tabela 2 (Hahn e Hendrickson (1971)) para $\alpha = 0,10, 0,05$ e $0,01$. Novamente encontramos para cada ξ_j um intervalo semelhante ao (2.2.8) mas, neste caso, com valor crítico q_α e condição de existência

$$b^2 > \frac{q_\alpha^2 \hat{\sigma}_c^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

Comparando os três métodos de construção dos intervalos de discriminação calculados acima, notamos que eles diferem somente pela constante crítica. Portanto, o melhor método, no sentido do que tem menor comprimento, é aquele que tem a constante crítica de menor valor. Através de uma comparação numérica dos valores tabelados para $\alpha = 0,05$, temos

$$q_\alpha < t_{\alpha/2m} < (mF_\alpha)^{\frac{1}{2}}$$

qualquer que seja m . Concluímos, neste caso, que o intervalo simultâneo de menor comprimento é o obtido pela técnica do módulo máximo. Notemos que esta conclusão só é válida para $\alpha = 0,05$, sendo que, para as demais probabilidades, cada caso deve ser analisado em particular.

A idéia inicial de Mendel (1958), para construção de intervalos de discriminação, era ligeiramente diferente da de Scheffé, sendo sua constante crítica $(m+2)F_\alpha$, onde F_α é o valor do α -ésimo percentil da distribuição de Fisher-Snedecor com $(m+2, n+k-3)$ graus de liberdade. Houve um abandono deste método depois de se constatar que sua constante é sempre maior que a do intervalo de Scheffé, produzindo intervalos de maior amplitude.

EXEMPLO 2.5 (continuação do Exemplo 1.1)

Suponhamos que, no exemplo do termopar, o experimentador esteja, não mais interessado em uma única leitura, mas no conjunto de cinco leituras (150°C , 200°C , 250°C , 300°C e 350°C). A Tabela 2.2 mostra os estimadores clássicos pontuais das cinco leituras e os intervalos simultâneos com 95% de confiança conjunta calculados pelas três técnicas descritas acima: Método de Bonferroni, Método de Scheffé e Método do Módulo Máximo.

A existência dos intervalos está garantida pois $b^2=0,90826$ é maior que $3,83 \times 10^{-4}$, que $6,40 \times 10^{-4}$ e que $3,66 \times 10^{-4}$ que são respectivamente as condições de existência do Método de Bonferroni, de Scheffé e do Módulo Máximo.

Observamos que, conforme o exposto na teoria, para $(1-\alpha) = 0,95$, o Método do Módulo Máximo é o que apresenta intervalos simultâneos de menor comprimento, apesar do Método de Bonferroni apresentar intervalos muito próximos.

TABELA 2.2: Intervalo Simultâneo Limitado (95%)

A - MÉTODO DE BONFERRONI

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf}; x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(156,35; 172,36)	16,01
200	216,85	(209,00; 224,68)	15,68
250	269,32	(261,51; 277,15)	15,64
300	321,78	(313,86; 329,76)	15,90
350	374,25	(366,08; 382,52)	16,44

OBS.: $t_{\alpha/10} = 2,977$

B - MÉTODO DE SCHEFFÉ

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf}; x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(153,98; 174,68)	20,70
200	216,85	(206,70; 226,97)	20,27
250	269,32	(259,22; 279,44)	20,22
300	321,78	(311,56; 332,11)	20,55
350	374,25	(363,71; 384,96)	21,25

OBS.: $(5F_{\alpha})^{\frac{1}{2}} = 3,847$

C - MÉTODO DO MÓDULO MÁXIMO

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf}; x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(156,53; 172,18)	15,65
200	216,85	(209,18; 224,51)	15,33
250	269,32	(261,68; 276,97)	15,29
300	321,78	(314,04; 329,58)	15,54
350	374,25	(366,26; 382,33)	16,07

OBS.: $q_{\alpha} = 2,91$

2.3.2. INTERVALOS DE CONFIANÇA SIMULTÂNEOS ILIMITADOS

Infelizmente os métodos da Seção 2.3.1 não podem ser utilizados quando m (o número de diferentes ξ_j , $j = 1, \dots, m$, correspondentes a Y_{0j} observados) é desconhecido. Tais problemas ocorrem quando a linha de regressão é usada para estimar ou corrigir um número ilimitado de futuras observações de Y_0 . Este problema é particularmente importante em ensaios biológicos, onde a linha de regressão (dita, linha padrão) é construída e então são feitos todos os possíveis ensaios futuros (discriminações). Também é importante na calibração de instrumentos de medição, geralmente físicos ou de engenharia, quando a linha (linha de calibração) é utilizada para corrigir todas as possíveis futuras leituras. Nestes casos, o número de ensaios futuros não está fixado a priori. Também não são utilizáveis os intervalos de discriminação limitados quando o número de futuras leituras, m , apesar de conhecido, for grande pois a sua constante crítica correspondente terá valor alto, tornando-os muito extensos. Nestes casos, para m desconhecido ou grande, aplicamos o que chamamos de intervalos simultâneos ilimitados ou, em ensaios biológicos, intervalos de discriminação ilimitados.

Temos duas técnicas para se obter estes intervalos, uma imperfeita em termos probabilísticos, mas, na prática, plenamente satisfatória, os intervalos de Bonferroni, baseados na intersecção da região de confiança de $\mu = \alpha + \beta x$ com o intervalo de confiança de $E(Y_0) = \eta_0$, descrito por Miller (1981); e outra alternativa, chamada de intervalos de argumento F , que se fundamenta nas idéias de Liebermann et al (1967).

Estes dois métodos possibilitam a construção de interva-

los simultâneos ilimitados baseados em uma única linha de calibração estimada, com a propriedade de que pelo menos $100p\%$ (sendo p uma probabilidade fixada) dos intervalos simultâneos contêm o verdadeiro valor de ξ com coeficiente de confiança de $(1-\alpha)$ fixado. Assim, para uma linha de regressão estimada, afirmamos que pelo menos $100p\%$ dos intervalos de discriminação conterão os valores corretos de ξ ; e, se similar suposição é feita repetidamente para diferentes linhas de regressão, então para $100(1-\alpha)\%$ destas diferentes linhas a suposição (de pelo menos $100p\%$ dos intervalos de discriminação conter os valores corretos de ξ) será verdadeira. Para as outras $100\alpha\%$, a porcentagem de intervalos de discriminação que contém os verdadeiros ξ pode ser maior ou menor que $(100p)\%$ para cada linha. Salienciamos que o coeficiente de confiança $(1-\alpha)$ se refere à distribuição da amostra (x_i, Y_i) da qual a linha de regressão é estimada, enquanto que a probabilidade "de pelo menos p " à distribuição amostral das futuras observações Y_{0j} .

No final desta seção, será ainda apresentada uma modificação do primeiro método feita por Oden (1973) que produz intervalos de menor amplitude; e um outro intervalo desenvolvido por Scheffé (1973) obtendo resultados semelhantes ao método de Bonferroni, partindo de outras premissas.

Como já foi dito acima, o intervalo pelo método de Bonferroni para um dado Y_0 consiste na combinação do intervalo de confiança de sua média, η_0 , com a região de confiança da linha de calibração, $\mu = \alpha + \beta x$, projetada no eixo x . Este procedimento é ilustrado na Figura 2.3.1 (com a variância σ^2 conhecida). Se a variância σ^2 é conhecida, temos que o intervalo de confiança para a média de um dado Y_0 , η_0 , resulta da seguinte

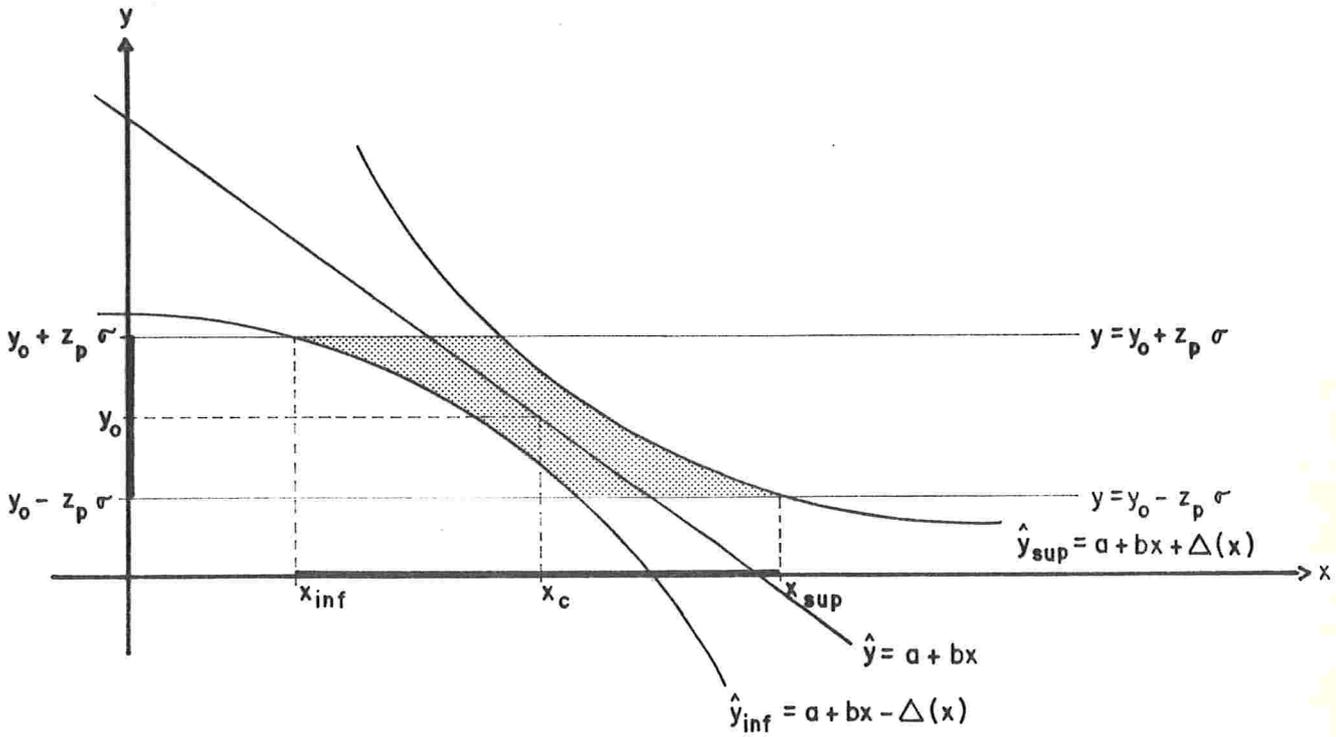
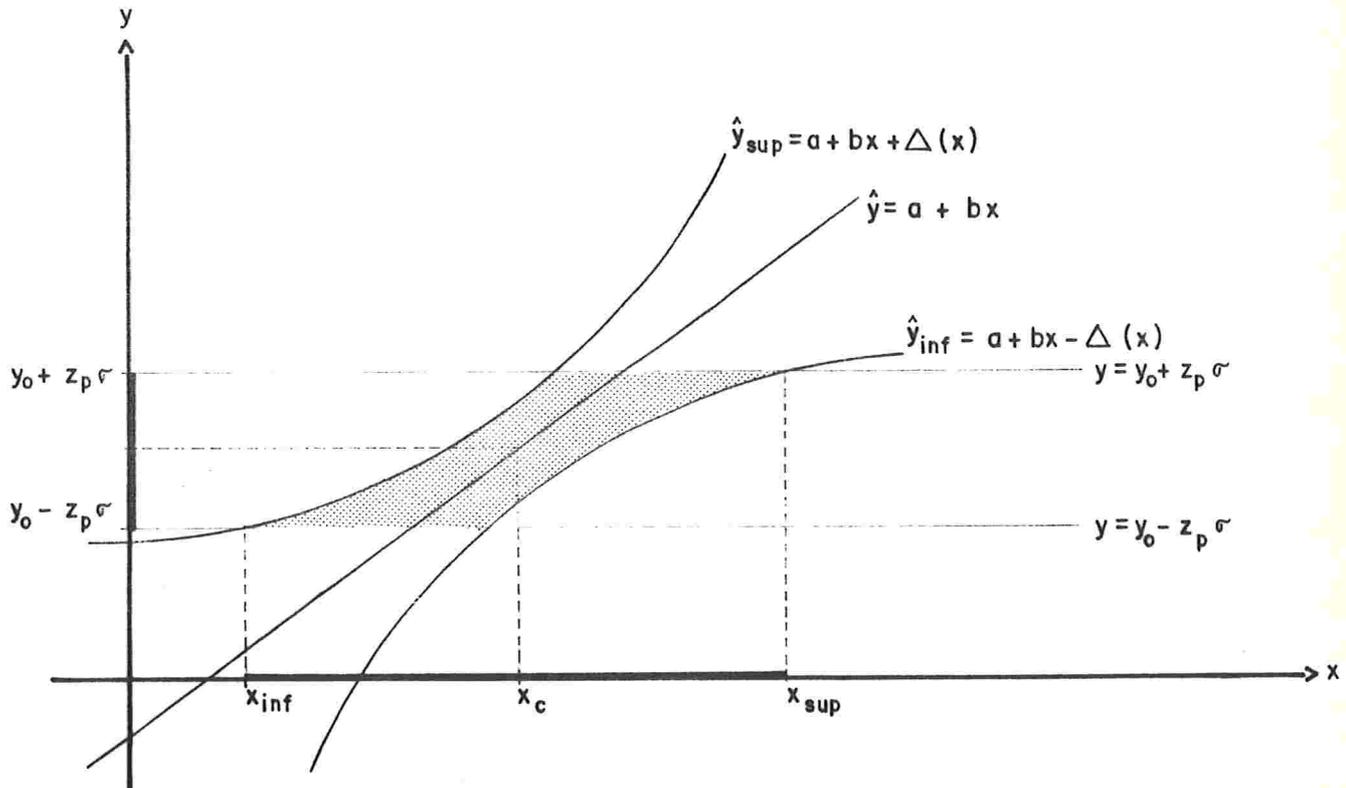
(a) se $\beta < 0$ (b) se $\beta > 0$ 

Figura 2.3.1: Intervalo Simultâneo Ilimitado para x_c pelo método Bonferroni (σ conhecido)

probabilidade:

$$P\left(\left|\frac{\eta_0 - Y_0}{\sigma}\right| \leq Z_p\right) = p$$

sendo Z_p o $(1-p/2)$ -ésimo quartil da distribuição normal padronizada e p a probabilidade, fixada, do intervalo

$$(Y_0 \pm Z_p \sigma) \tag{2.3.4}$$

conter o verdadeiro valor de η_0 . Para cada η_0 do intervalo acima, a região de confiança de Working-Hotelling da linha $\mu = \alpha + \beta x$ (veja, por exemplo, em Miller (1981), a construção detalhada desta região) oferece um intervalo de confiança para o correspondente $x = (\mu - \alpha)/\beta$. Da união de todos estes intervalos resulta um intervalo de discriminação ilimitado para ξ com σ^2 conhecido.

Mas, o que ocorre mais frequentemente na prática é a variância σ^2 ser desconhecida. Neste caso, um limite superior para σ^2 pode ser obtido, baseado na distribuição da estatística U , definida no Teorema 2.1.2, (ii) (com y_0 fixo):

$$P\left(\sigma \leq (n-2)^{1/2} \hat{\sigma}_c / u_{(1-\alpha/2)}^{1/2}\right) = (1-\alpha/2) \tag{2.3.5}$$

sendo $u_{(1-\alpha/2)}$ o $(1-\alpha/2)$ -ésimo percentil da distribuição qui-quadrado com $(n-2)$ graus de liberdade. Uma vez que σ é limitado (veja (2.3.5)) por um múltiplo de $\hat{\sigma}_c$ com probabilidade $(1-\alpha/2)$, concluímos que todos os intervalos (2.3.4) devem estar contidos em

$$\left(Y_0 \pm Z_p \left\{ \frac{n-2}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{1/2} \hat{\sigma}_c \right) \tag{2.3.6}$$

com probabilidade $(1-\alpha/2)$.

Matematicamente, a região de confiança de Working-Hotelling da linha $\mu = \alpha + \beta x$ é fundamentada na probabilidade:

$$P \left(|\alpha + \beta x - a - bx| \leq \hat{\sigma}_c \left(2F_{(1-\alpha/2)} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \text{ para todo } x \right) =$$

$$= (1 - \alpha/2) \quad (2.3.7)$$

sendo $F_{(1-\alpha/2)}$ o percentil $(1-\alpha/2)$ da distribuição F com $(2, n-2)$ graus de liberdade, com a probabilidade $(1-\alpha/2)$ da região conter o verdadeiro valor da linha de regressão $\alpha + \beta x$.

Pelo método de Bonferroni obtemos a probabilidade de ambos os eventos (2.3.6) e (2.3.7) ocorrerem conjuntamente, que é maior ou igual a $(1-\alpha)$. O intervalo de confiança simultâneo ilimitado resulta da projeção no eixo x da intersecção do intervalo de confiança de $E(Y_0) = \eta_0$, truncado (dado em (2.3.6)), com a região de confiança de $\alpha + \beta x$ (dado em (2.3.7)); ver Figura 2.3.1.

Quando a inclinação da reta de calibração é positiva (isto é, $b > 0$), o limite inferior do intervalo, obtido a partir da intersecção das regiões descritas acima, é uma das soluções da equação do segundo grau em ξ :

$$a + b\xi - \left(2F_{(1-\alpha/2)} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{\frac{1}{2}} = Y_0 + Z_p \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{n-2}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.3.8)$$

e o limite superior uma das soluções de:

$$a + b\xi + \left(2F_{(1-\alpha/2)} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{\frac{1}{2}} = Y_0 - Z_p \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{n-2}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.3.9)$$

Inversamente, se $b < 0$, o limite inferior será uma solução de (2.3.9) e o superior de (2.3.8). Este fenômeno pode ser facilmente visto na Figura 2.3.1. Pelas equações acima, obte-

mos para a reta com $b > 0$ o limite superior

Superior!

$$x_{\text{sup}} = \bar{x} + \frac{b(Y_0 - \bar{Y} + Q) + R^{1/2} \left[(Y_0 - \bar{Y} + Q)^2 + \frac{S_{XX}}{n} (b^2 - R) \right]^{1/2}}{b^2 - R}$$

e o inferior:

$$x_{\text{inf}} = \bar{x} - \frac{b(\bar{Y} - Y_0 + Q) + R^{1/2} \left[(\bar{Y} - Y_0 + Q)^2 + \frac{S_{XX}}{n} (b^2 - R) \right]^{1/2}}{b^2 - R}$$

(2.3.10)

onde $R = 2F_{(1-\alpha/2)} \hat{\sigma}_c^2 / S_{XX}$

e $Q = Z_P \left\{ \frac{(n-2)}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{\frac{1}{2}} \hat{\sigma}_c$

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ e $F_{(1-\alpha/2)}$, Z_P e $u_{(1-\alpha/2)}$ as respectivas abcissas da distribuição F com $(2, n-2)$ graus de liberdade, da normal padronizada e da qui-quadrado com $(n-2)$ graus de liberdade. Se $b < 0$ então os limites serão invertidos.

Na intersecção das linhas $Y = Y_0 \oplus Z_P \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{n-2}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{\frac{1}{2}}$ e $Y = Y_0 \ominus Z_P \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{n-2}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{\frac{1}{2}}$ com as curvas da região de confiança da

linha de calibração (isto é, solução das equações (2.3.8) e (2.3.9)), dependendo da inclinação da linha de calibração (se β for próximo de zero), podemos ter o efeito de Fieller-Creasy da mesma forma que ocorreu na construção do intervalo de confiança de x_c (Seção 2.2) quando tivemos a intersecção da li-

na $Y = Y_0$ com as curvas do intervalo de confiança de Y (ver Figura 2.2.3). Por uma análise análoga à feita anteriormente na Seção 2.2, concluímos que a condição necessária e suficiente para a existência deste intervalo de discriminação ilimitado é

$$b^2 > \frac{(2F_{1-\alpha/2})\hat{\sigma}_c^2}{S_{XX}}$$

O raciocínio para construirmos o intervalo de discriminação ilimitado de argumento F é semelhante ao do intervalo ilimitado de Bonferroni. A única modificação é a aproximação usada para a obtenção das constantes críticas dos intervalos para σ e $\alpha + \beta x$. Anteriormente, tal aproximação foi feita pelo método de Bonferroni e agora o será pela probabilidade exata obtida por Lieberman e Miller (1963),

$$P \left(|a - \alpha + (b - \beta)x \pm Z_p \sigma| \leq c^* \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{S_{XX}} + Z_p^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \text{ para todo } x, p \right) =$$

$$= (1 - \alpha), \quad (2.3.11)$$

onde Z_p é o $(1-p/2)$ -ésimo quartil da distribuição normal padronizada e c^* é definido como

$$P \left(\frac{Z_1^2 + Z_2^2 + 1}{\chi^2 / (n-2)} \leq (c^*)^2 \right) = (1 - \alpha)$$

sendo Z_1 e Z_2 variáveis aleatórias independentes com distribuição normal padronizada e χ^2 uma variável aleatória com distribuição qui-quadrado com parâmetro $(n-2)$ e independente de Z_1 e Z_2 . Esta estatística:

$$\frac{Z_1^2 + Z_2^2 + 1}{\chi^2 / (n-2)}$$

é muitas vezes chamada de argumento F e sua tabela pode ser encontrada no Anexo, Tabela 3.

Fazendo primeiramente $Z_p = 0$ e depois $Z_p \rightarrow \infty$ na inequação de (2.3.11) obtemos

$$P \left(|(a-\alpha)+(b-\beta)x| \leq c^* \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{\frac{1}{2}} \text{ para todo } x \text{ e } \sigma \leq c^* \hat{\sigma}_c \right) \geq (1-\alpha)$$

Assim obtemos uma região de confiança para $\alpha + \beta x$,

$$a + bx \pm c^* \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{\frac{1}{2}} \text{ para todo } x, \quad (2.3.13)$$

$$\text{sendo } S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

e um limite superior para σ ,

$$\sigma \leq c^* \hat{\sigma}_c, \quad (2.3.14)$$

com probabilidade conjunta maior que $(1-\alpha)$. A construção do intervalo simultâneo ilimitado de argumento F é semelhante ao anterior substituindo (2.3.7) por (2.3.13) e (2.3.5) por (2.3.14). Analogamente os intervalos são finitos quando:

$$b^2 > \frac{(c^*)^2 \hat{\sigma}_c^2}{S_{XX}}$$

O limite superior do intervalo, sendo $b > 0$, será, então, uma solução da equação em ξ :

$$a + b\xi - c^* \hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{\frac{1}{2}} = Y_0 + Z_p c^* \hat{\sigma}_c \quad (2.3.15)$$

e o inferior da equação:

$$a + b\xi + c^*\hat{\sigma}_c \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{\frac{1}{2}} = Y_0 - Z_p c^*\hat{\sigma}_c; \quad (2.3.16)$$

resultando no limite superior

$$x_{\text{sup}} = \bar{x} + \frac{b(Y_0 - \bar{Y} + B) + E^{1/2} \left[(Y_0 - \bar{Y} + B)^2 + \left\{ \frac{S_{XX}}{n} \right\} (b^2 - E) \right]^{1/2}}{b^2 - E} \quad (2.3.17)$$

e no inferior

$$x_{\text{inf}} = \bar{x} - \frac{b(\bar{Y} - Y_0 + B) + E^{1/2} \left[(\bar{Y} - Y_0 + B)^2 + \left\{ \frac{S_{XX}}{n} \right\} (b^2 - E) \right]^{1/2}}{b^2 - E} \quad (2.3.18)$$

onde $E = (c^*\hat{\sigma}_c)^2 / S_{XX}$ e $B = Z_p c^*\hat{\sigma}_c$,

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, Z_p abscissa da distribuição normal padronizada e c^* tabelado no Anexo. Ao contrário, se a linha de regressão padrão tiver inclinação negativa, os limites serão invertidos; limite superior, a equação (2.3.18), e inferior, (2.3.17).

A comparação de comprimento dos intervalos obtidos pelas duas técnicas, de Bonferroni e do argumento F, só pode ser feita numericamente pois uma comparação algébrica entre os dois intervalos é praticamente impossível. Através de algumas tabulações numéricas das constantes c^* e $2F_{1-\alpha/2}$ Lieberman et al, (1967), não chegaram a conclusões explícitas, mas apenas "à impressão" de que, na maioria dos problemas, o método baseado na técnica de Bonferroni produz intervalos menores, especialmente quando as futuras observações, Y_0 , estão próximas de $a + b\bar{x}$.

Oden (1973) apresentou um artigo aperfeiçoando, em termos

probabilísticos, os intervalos simultâneos ilimitados, obtidos pelo método de Bonferroni. Considerou que, para um dado Y_0 , os intervalos deveriam ser do seguinte tipo:

$$Y_0 = a + b\xi \pm \hat{\sigma}_c f(\xi), \quad (2.3.19)$$

sendo $f(\xi)$ uma função unimodal, contínua e positiva em ξ , satisfazendo a seguinte condição:

$$\inf \left[\lim_{m \rightarrow \infty} \inf P \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j(\xi_j) \frac{1}{m} \geq p \right) \right] \geq (1-\alpha) \quad (2.3.20)$$

onde, o primeiro \inf é com respeito a ξ_1, \dots, ξ_m e o segundo com respeito a uma sequência infinita $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots\}$, sendo

$$\alpha_j(\xi_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } Y_{0j} \in \text{ao intervalo (2.3.19)} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

com $j = 1, \dots, m$, de modo que, se considerarmos um conjunto de intervalos de confiança, de um determinado processo de calibração, 100p% dos valores não conhecidos de ξ estão contidos em seus respectivos intervalos com uma probabilidade aproximada igual ou maior que $(1-\alpha)$.

Também, em seu trabalho, Oden provou que a função:

$$f_B(\xi) = (2F_{1-\alpha/2})^{1/2} \left(\frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{1/2} + Z_p \left\{ \frac{n-2}{u_{(1-\alpha/2)}} \right\}^{1/2} \quad (2.3.21)$$

satisfaz a condição (2.3.20), sendo $F_{1-\alpha/2}$ o percentil $(1-\alpha/2)$ da distribuição F com $(2, n-2)$ graus de liberdade, $u_{(1-\alpha/2)}$ o $(1-\alpha/2)$ -ésimo percentil da distribuição qui-quadrado com $(n-2)$ graus de liberdade e Z_p o $(1-p/2)$ -ésimo percentil da distribuição nor-

mal padronizada

Observamos que fazendo $f = f_B$ em (2.3.19) encontramos exatamente o intervalo de discriminação ilimitado de Bonferroni (2.3.8). Além disto, Oden (1973) demonstrou que existe uma constante λ ($\lambda < 1$) dependente das probabilidades p e α tal que a condição (2.3.20) está satisfeita para $f = \lambda f_B$, quando t^* for finito, sendo

$$t^* = \sup \left\{ \left\{ \frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right\}^{1/2} \text{ tal que } \xi \in I \right\}, \quad (2.3.22)$$

onde I é o intervalo dos valores x_i observados, chamado de intervalo de calibração de Y e $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$. Deste modo, podemos construir intervalos com amplitude sempre menores que os de Bonferroni mas semelhantes analiticamente, sendo necessário apenas, em (2.3.10), substituir R e Q por $R^* = \lambda^2 R$ e $Q^* = \lambda Q$ respectivamente e sua condição de existência é $b^2 > \frac{\lambda^2 (2F_{(1-\alpha)}) \hat{\sigma}_c^2}{S_{XX}}$.

Assumindo que I , o intervalo de calibração de Y , é finito e que os x_i fixados para estimar a linha de calibração são uniformemente distribuídos em I temos que t^* , definido em (2.3.22), é aproximadamente $2n^{-1/2}$. Com a condição $t^* \approx 2n^{-1/2}$, foram tabelados por Oden (1973) alguns valores de λ que são encontrados no Anexo, Tabela 4.

Levando em consideração as conclusões rudimentares de Lieberman et al (1967) descritas acima, podemos ter o "sentimento" que os intervalos de discriminação simultâneos ilimitados modificados por Oden devem ser os melhores intervalos dentre os três analisados, principalmente quando as futuras obser-

vações Y_0 estão próximas de $a + b\bar{x}$.

Para construirmos os intervalos simultâneos ilimitados propostos por Scheffé (1973), consideramos que os intervalos estão entre duas curvas a uma distância vertical $\hat{\sigma}_c f(\xi)$ da linha de calibração ajustada, ou seja, para um dado Y_0 temos,

$$Y_0 = a + b\xi \pm \hat{\sigma}_c f(\xi) ,$$

onde $\hat{\sigma}_c$ é o estimador de máxima verossimilhança corrigido do parâmetro σ , definido em (2.1.7), a e b são os estimadores de máxima verossimilhança de α e β , respectivamente, definidos em (2.1.6) e $f(\xi)$ uma função positiva em ξ que depende de uma ou mais constantes que serão determinadas para as probabilidades p e α fixadas (estas probabilidades têm a mesma interpretação descrita no início desta seção para os métodos anteriores de obtenção de intervalos ilimitados). Estes intervalos são construídos somente entre as linhas $x^{(1)} = \min x_i$ e $x^{(2)} = \max x_i$, $i = 1, \dots, n$ (ver Figura 2.3.2).

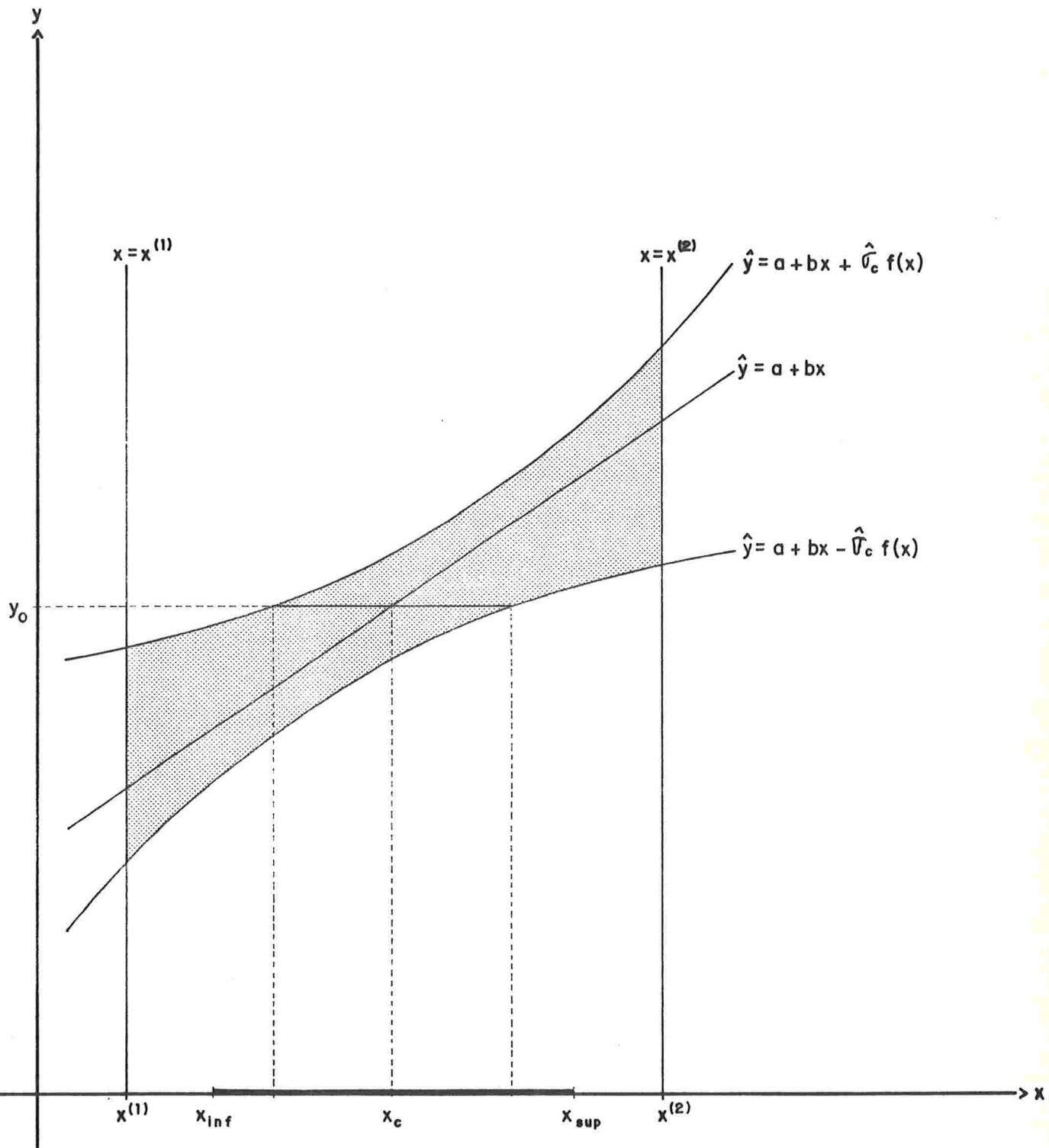


Figura 2.3.2 : Intervalo Simultâneo Ilimitado para x_c pelo método de Scheffé

Supondo $b > 0$ e se $\xi \in I = [x^{(1)}, x^{(2)}]$, intervalo de calibração, temos,

$$\begin{aligned} P \left(a + b\xi - \hat{\sigma}_c f(\xi) \leq Y_0 \leq a + b\xi + \hat{\sigma}_c f(\xi) \right) &= \\ &= P \left(\tilde{a} + \tilde{b}\xi - \tilde{\sigma} f(\xi) \leq \frac{Y_0 - \alpha - \beta\xi}{\sigma} \leq \tilde{a} + \tilde{b}\xi + \tilde{\sigma} f(\xi) \right), \end{aligned}$$

sendo $\tilde{a} = \frac{a - \alpha}{\sigma}$, $\tilde{b} = \frac{b - \beta}{\sigma}$ e $\tilde{\sigma} = \frac{\hat{\sigma}_c}{\sigma}$,

onde $\frac{Y_0 - \alpha - \beta\xi}{\sigma}$ tem distribuição normal padronizada. Assim uma condição suficiente para que a probabilidade acima seja maior ou igual a p é

$$|\tilde{a} + \tilde{b}\xi| \leq \tilde{\sigma} f(\xi) - Z_p, \text{ para todo } \xi \in I \quad (2.3.23)$$

sendo Z_p o $(1-p/2)$ -ésimo quartil da distribuição $N(0,1)$.

Seja a função $V(\xi)$ definida como o cociente do desvio padrão de $a + bY_0$ por σ , isto é,

$$V(\xi) = \left(\frac{1}{n} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} \right)^{1/2},$$

sendo $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$

e seja o vetor $\tilde{\beta}' = (\tilde{a}, \tilde{b})$ que tem distribuição $N(0, (\underline{X}'\underline{X})^{-1})$, sendo \underline{X} a matriz de planejamento definida em (2.1.9).

Como $(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$ é uma matriz positiva definida, existe uma matriz \underline{M} tal que $\underline{M}'(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{M} = \underline{I}$ e assim $(\underline{X}'\underline{X}) = \underline{M}'\underline{M}$.

Por outro lado, temos,

$$\tilde{a} + \tilde{b}\xi = \underline{g}'\tilde{\beta}.$$

Aplicando a desigualdade de Schwartz na equação $\tilde{a} + \tilde{b}\xi = (\underline{M}^{-1}\underline{g})'(\underline{M}'\underline{\beta})$ obtemos

$$|\tilde{a} + \tilde{b}\xi| \leq \|\underline{M}^{-1}\underline{g}\| \|\underline{M}'\underline{\beta}\|$$

Pela notação matricial temos

$$v(\xi) = \left(\underline{g}'(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{g} \right)^{1/2} = \|\underline{M}^{-1}\underline{g}\|$$

e

$$v = \left(\underline{\beta}'(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{\beta} \right)^{1/2} = \|\underline{M}'\underline{\beta}\|$$

implicando que:

$$|\tilde{a} + \tilde{b}\xi| \leq vV(\xi) \text{ para todo } \xi \in I \quad (2.3.24)$$

Portanto, por (2.3.24), a condição (2.3.23) está satisfeita se:

$$v \leq \frac{1}{V(\xi)} (\tilde{\sigma}f(\xi) - Z_\alpha) \text{ para todo } \xi \in I$$

e este evento ocorre para todo $\xi \in I$ se e somente se:

$$v \leq \inf_{\xi \in I} \frac{1}{V(\xi)} (\tilde{\sigma}f(\xi) - Z_\alpha) \quad (2.3.25)$$

onde v^2 tem distribuição qui-quadrado com 2 graus de liberdade, independente de $\tilde{\sigma}^2$ (pelo Teorema 2.1.2 (iv)), enquanto $\tilde{\sigma}^2(n-2)$ tem distribuição qui-quadrado com (n-2) graus de liberdade (pelo Teorema 2.1.2 (ii)).

Assumindo a função $f(\xi)$ como sendo linearem $V(\xi)$, isto é,

$$f(\xi) = c_1 + c_2V(\xi),$$

onde c_1 e c_2 são constantes e tomando

$$V_1 = \inf_{\xi \in I} V(\xi) = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/2}$$

e

$$V_2 = \sup_{\xi \in I} V(\xi) = \left(\frac{1}{n} + \frac{(\max(\bar{x} - x^{(1)}, x^{(2)} - \bar{x}))^2}{S_{XX}} \right)^{1/2},$$

a relação (2.3.25) fica

$$\begin{aligned} v &\leq (c_2 + V_1^{-1}c_1)\tilde{\sigma} - V_1^{-1}Z_p \quad \text{se } \tilde{\sigma} \leq Z_p/c_1 \\ &\leq (c_2 + V_2^{-1}c_1)\tilde{\sigma} - V_2^{-1}Z_p \quad \text{se } \tilde{\sigma} \geq Z_p/c_1 \end{aligned} \quad (2.3.26)$$

Temos, portanto, que encontrar os valores para as constantes c_1 e c_2 tais que a probabilidade do evento (2.3.26) seja $(1-\alpha)$, de modo que com uma probabilidade maior ou igual a $(1-\alpha)$ tenhamos o evento (2.3.23).

Verifiquemos o que ocorre com a probabilidade do evento (2.3.26) quando $V_2 \rightarrow 0$ (e conseqüentemente $V_1 \rightarrow 0$). Tomemos a Figura 2.3.3a, quando $V_2 \rightarrow 0$, o ponto $-Z_p/V_1$ se encontra com o ponto $-Z_p/V_2$ e $-Z_p/V_2$ recua indefinidamente ao longo do eixo v . Então as duas semi-retas, que são o limite da região de definição do evento (2.3.26), giram em torno do ponto fixo $(c_2 Z_p/c_1, Z_p/c_1)$ até a posição horizontal $\tilde{\sigma} = Z_p/c_1$ (Figura 2.3.3b). Portanto, a probabilidade limite, quando $V_2 \rightarrow 0$, será $P(\tilde{\sigma} \geq Z_p/c_1)$. Esta probabilidade será igual a $(1-\alpha)$ se e somente se Z_p/c_1 for o $(1-\alpha)$ -ésimo quartil da distribuição de $\tilde{\sigma}$, isto é,

$$c_1 \rightarrow Z_p \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2}$$

quando $V_2 \rightarrow 0$, sendo $u_{(1-\alpha)}$ o quartil $(1-\alpha)$ da distribuição qui-

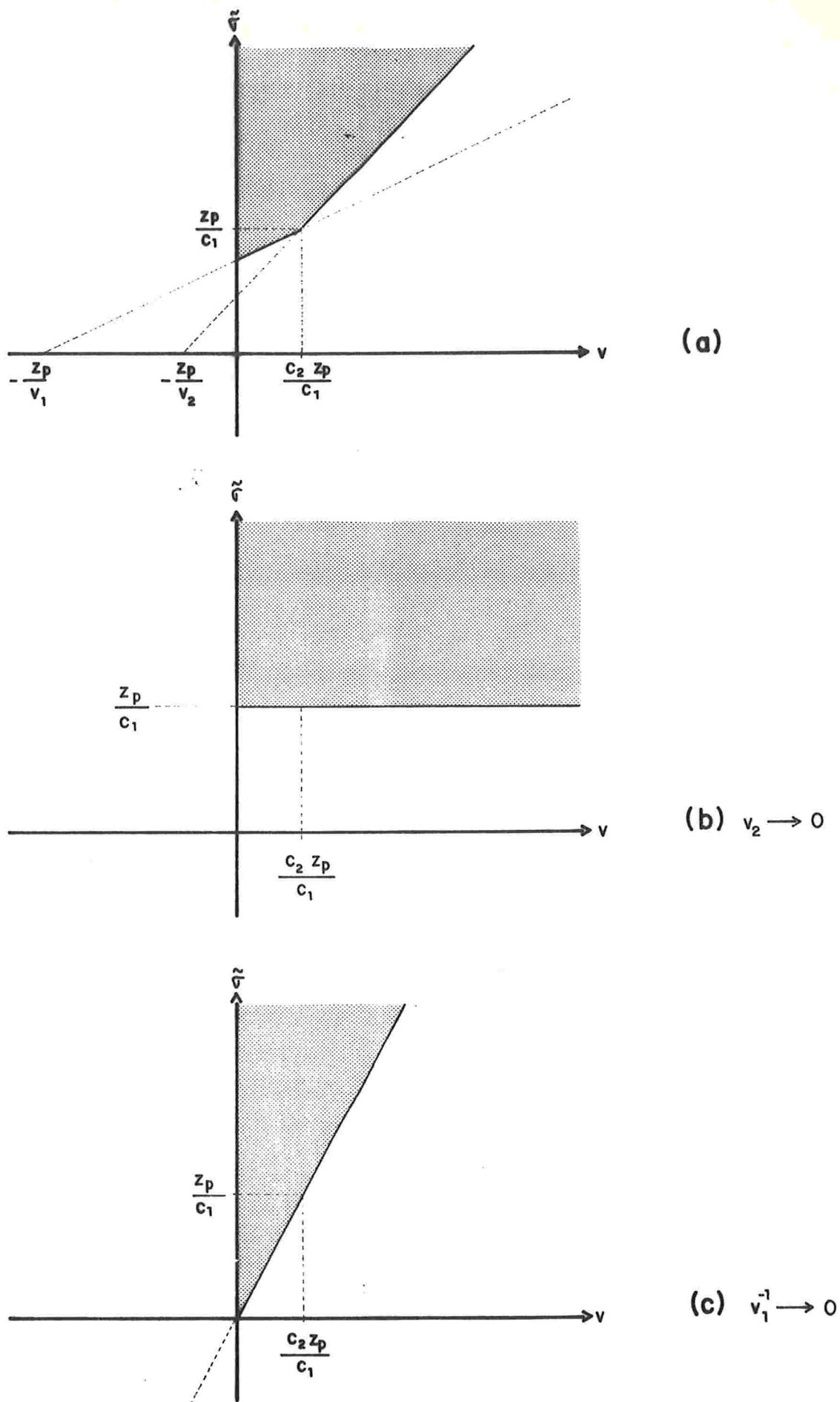


Figura 2.3.3: Esquema do evento (2.3.26) e suas condições limites

-quadrado com $(n-2)$ graus de liberdade.

Analisemos agora o que acontece com a probabilidade do evento (2.3.26) quando $V_1^{-1} \rightarrow 0$ (e por consequência $V_2^{-1} \rightarrow 0$). Neste caso, o evento (2.3.26) fica $v \leq c_2 \tilde{\sigma}$, qualquer que seja $\tilde{\sigma}$ (Figura 2.3.3c). Então a probabilidade limite, quando $V_1^{-1} \rightarrow 0$, será $P(v/\tilde{\sigma} \leq c_2)$. Esta será igual a $(1-\alpha)$ se e somente se c_2 for o $(1-\alpha)$ -ésimo quartil da distribuição de $v/\tilde{\sigma}$, ou seja,

$$c_2 \rightarrow \left(2F_{(1-\alpha)} \right)^{1/2}$$

quando $V_1^{-1} \rightarrow 0$, sendo $F_{(1-\alpha)}$ o quartil $(1-\alpha)$ da distribuição F com $(2, n-2)$ graus de liberdade.

Assim, devemos determinar uma constante c de modo que a probabilidade do evento (2.3.26) seja $(1-\alpha)$ quando

$$c_1 = c Z_p \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2} \quad \text{e} \quad c_2 = c \left(2F_{(1-\alpha)} \right)^{1/2} .$$

Isto implica em que a forma das duas curvas, entre as quais os intervalos simultâneos ilimitados estão compreendidos, seja

$$Y_0 = a + b\xi \pm \hat{\sigma}_c \left[Z_p \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2} + \left(2F_{(1-\alpha)} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x} - \xi)^2}{S_{XX}} \right)^{1/2} \right] \quad (2.3.27)$$

e que o evento (2.3.26), considerando

$$v_1^* = \frac{V_1}{Z_p} \quad \text{e} \quad v_2^* = \frac{V_2}{Z_p} , \quad \text{seja}$$

$$v \leq c \left[\left(2F_{(1-\alpha)} \right)^{1/2} + \frac{1}{v_1^*} \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2} \right] \frac{\hat{\sigma}_c}{\sigma} - \frac{1}{v_1^*} \quad \text{se} \quad \frac{\hat{\sigma}_c}{\sigma} \leq \frac{1}{c} \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2}$$

$$\leq c \left[\left(2F_{(1-\alpha)} \right)^{1/2} + \frac{1}{V_2^*} \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2} \right] \frac{\hat{\sigma}_c}{\sigma} - \frac{1}{V_2^*} \quad \text{se } \frac{\hat{\sigma}_c}{\sigma} \geq \frac{1}{c} \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2}$$

(2.3.28)

Salientamos que a probabilidade do evento (2.3.28) ser igual a $(1-\alpha)$ depende de quatro quantidades, α , n , V_1^* e V_2^* . No trabalho de Scheffé (1973) encontramos tabelados os valores da constante c (Tabela 5, Anexo), tal que a probabilidade (2.3.28) seja $(1-\alpha)$, em função destas quatro quantidades.

Para ξ pertencente ao intervalo de calibração, $\xi \in I$, o método de Bonferroni é equivalente ao método de Scheffé se nas duas curvas (2.3.27) substituirmos a constante c por 1 e a probabilidade α por $\alpha/2$. Os intervalos resultantes do método de Bonferroni (2.3.10) são geralmente - e certamente se $c < 1$ - mais compridos que os de Scheffé.

Para obtermos as expressões dos intervalos simultâneos ilimitados pelo método de Scheffé, basta, em (2.3.10), substituir R e Q por

$$R^{**} = c^2 2F_{(1-\alpha)} \hat{\sigma}_c^2 / S_{XX}$$

e

$$Q^{**} = c Z_P \left(\frac{n-2}{u_{(1-\alpha)}} \right)^{1/2} \hat{\sigma}_c$$

respectivamente. E a sua condição de existência é,

$$b^2 > \frac{c^2 2F_{(1-\alpha)} \hat{\sigma}_c^2}{S_{XX}}$$

EXEMPLO 2.6.(continuação do Exemplo 1.1)

Unicamente com intuito de exemplificar a construção dos intervalos de confiança simultâneos ilimitados, tomemos o problema da calibração do termopar. Suponhamos que o experimenter esteja interessado em obter os intervalos conjuntos para "todas" as possíveis leituras do termopar com a característica de que pelo menos 95% dos intervalos contenham os seus respectivos ξ estimados com coeficiente de confiança maior ou igual a 95%. Temos quatro alternativas para construí-los: o método de Bonferroni, o método do argumento F, o método de Bonferroni modificado por Oden e o método de Scheffé. A existência dos intervalos por estes quatro métodos está garantida pois $b^2 = 0,90826$ é maior que $4,20 \times 10^{-4}$, que $3,92 \times 10^{-4}$, que $2,66 \times 10^{-4}$ e que $3,05 \times 10^{-4}$ que são as suas respectivas condições de existência. Os resultados dos intervalos para alguns pontos encontram-se na Tabela 2.3.

Neste caso, os intervalos modificados por Oden são os que apresentam menor comprimento, mas esta conclusão não pode ser generalizada para outros experimentos de calibração e de ensaios biológicos.

TABELA 2.3: Intervalo Simultâneo Ilimitado
 $((1 - \alpha) = 95\%$ e $p = 95\%$)

A - MÉTODO DE BONFERRONI

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf}; x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(157,94; 170,66)	12,73
200	216,85	(211,05; 222,58)	11,53
250	269,32	(263,66; 275,03)	11,37
300	321,78	(315,70; 328,03)	12,33
350	374,25	(367,38; 381,35)	13,97

B - MÉTODO DO ARGUMENTO F

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf}; x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(146,49; 181,79)	35,30
200	216,85	(199,65; 233,82)	34,17
250	269,32	(252,38; 286,40)	34,02
300	321,78	(304,54; 339,47)	34,93
350	374,25	(356,30; 392,80)	36,50

C - MÉTODO DE BONFERRONI MODIFICADO POR ODEN

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf} \ x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(159,27; 169,39)	10,12
200	216,85	(212,25; 221,41)	9,16
250	269,32	(264,82; 273,85)	9,03
300	321,78	(316,93; 326,74)	9,81
350	374,25	(368,78; 379,88)	11,10

OBS.: $\lambda = 0,795$

D - MÉTODO DE SCHEFFÉ

TEMPERATURA OBSERVADA	ESTIMADOR PONTUAL	INTERVALO DE CONFIANÇA	COMPRIMENTO DO INTERVALO
Y_0	x_c	$(x_{inf}; x_{sup})$	$x_{sup} - x_{inf}$
150	164,39	(158,29; 170,34)	12,05
200	216,85	(211,30; 222,34)	11,04
250	269,32	(263,89; 274,79)	10,90
300	321,78	(315,99; 327,71)	11,72
350	374,25	(367,79; 380,90)	13,11

OBS.: $c = 0,97$

2.4. VIOLAÇÃO DAS SUPOSIÇÕES DO MODELO

As suposições básicas do modelo de calibração (2.A) podem ser resumidas do seguinte modo: (i) as variáveis Y e x são linearmente relacionadas; (ii) os valores x_i , $i = 1, \dots, n$, são prefixados e pertencem a um intervalo - chamado intervalo de calibração; (iii) os erros aleatórios ε_i , $i = 1, \dots, n$, da variável observada Y_i são mutuamente independentes e identicamente distribuídos com média zero e variância σ^2 ; (iv) os erros aleatórios, posteriores, ε_i , $i = 1, \dots, k$, da variável observada Y_{0i} correspondente a um dado ξ fixado e desconhecido, também, são mutuamente independentes e identicamente distribuídos com média zero e variância σ^2 ; (v) a variância σ^2 dos erros aleatórios das duas fases do procedimento de calibração - do ajuste da linha de calibração e da leitura posterior do experimento - é constante. Nesta seção, faremos algumas considerações de como resolver o problema de calibração quando as restrições acima não estão satisfeitas.

A suposição de igualdade da variância nas duas etapas da calibração é facilmente transgredida, devido ao fato que usualmente a primeira fase da calibração é realizada em laboratório, em condições ambientais altamente controladas em comparação às em que os instrumentos são utilizados ou os ensaios realizados. E, também, temos que, geralmente, as fontes de erro e, portanto, a magnitude dos erros, envolvidos para fazer a leitura quando o instrumento é usado, não são as mesmas que as dos erros envolvidos para determinar a escala de calibração. Deste modo, temos, na realidade, duas variâncias no modelo: a variância dos erros da linha de calibração e a variância dos erros da leitura do

instrumento ou do ensaio, sendo esperado que a primeira seja substancialmente menor que a segunda. Podemos ilustrar esta situação pelo uso do hemoglobímetro e pelo método clínico de medição da pressão sanguínea.

Na utilização do hemoglobímetro, misturamos o sangue a ser examinado com produtos químicos de modo a reduzir a hemoglobina a metemoglobina, que é estável e que tem padrão espectral característico. A luz é focada em uma célula fotoelétrica depois de atravessar filtros sensíveis ^a e sua intensidade é relacionada com a concentração original de hemoglobina. Mas o tempo concedido para transformação de hemoglobina para metemoglobina é um fator determinante na leitura e, na prática rotineira, este é um fator relevante de erro. Este fator não está presente quando a escala de calibração é efetuada, onde as concentrações padrões de hemoglobina são reduzidas a metemoglobina sob condições rigorosamente controladas quanto ao tempo e a outros fatores relevantes. Deste modo, apesar de termos erros envolvidos no ajuste da calibração estes são de grandeza secundária comparados aos da leitura.

Na prática clínica, a medição da pressão sanguínea é efetuada do seguinte modo: prendemos no braço do paciente uma braçadeira inflável com uma escala de pressão, o médico escuta pelo estetoscópio uma artéria do cotovelo e infla a braçadeira até impedir o fluxo do sangue; depois, gradualmente, diminui a pressão da braçadeira deixando escapar o ar até ouvir o sangue passar novamente; é então lida a pressão na escala em "milímetros de mercúrio". Temos algumas variações para identificar o momento exato que assinala a passagem do sangue e, também, algumas variações surgem exatamente quando é feita a leitura que

está se alterando continuamente durante o processo. Tudo isto resulta em uma considerável fonte de erro, na estimativa da pressão sanguínea na prática. Mas nenhum destes erros é considerado quando a escala é calibrada, pois, isto é efetuado de modo inteiramente independente pela leitura direta da posição da coluna de mercúrio, envolvendo possivelmente só a variação da pressão barométrica e da leitura de uma escala linear sob condições controladas, que são infinitesimais em relação aos erros envolvidos quando o instrumento é operado.

Considerando a violação da igualdade de variância do processo, segundo Scheffé (1973), a melhor estratégia para contornar este problema é termos uma idéia grosseira de como o desvio padrão de Y varia com o x que pode ser obtida a partir de um conhecimento a priori da situação de calibração ou da dispersão dos n pontos (Y_i, x_i) em torno da linha de calibração ajustada e expressar esta idéia na forma de uma função. Obtemos

$$\text{desvio padrão } (Y_i) = \sigma F(x_i) \quad i = 1, \dots, n$$

e

(2.4.1)

$$\text{desvio padrão } (Y_{0i}) = \sigma F(\xi) \quad i = 1, \dots, k$$

sendo σ um parâmetro desconhecido e F uma função de x escolhida apropriadamente com derivadas contínuas no intervalo de calibração.

Tomando o desvio padrão de Y como sendo realmente da forma (2.4.1) e σ um parâmetro a ser estimado a partir dos dados, podemos estimar os parâmetros α , β , σ^2 e ξ pelo método dos mínimos quadrados generalizado, isto é, minimizando

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - (\alpha + \beta x_i)}{F(x_i)} \right)^2 \quad (2.4.2)$$

Ou equivalentemente pelo método dos mínimos quadrados, utilizando os valores Y transformados em "pseudo-observações", Y^* , definidas do seguinte modo:

$$Y_i^* = \frac{Y_i}{F(x_i)} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.4.3)$$

$$Y_{0i}^* = \frac{Y_{0i}}{F(\xi)} \quad i = 1, \dots, k$$

que satisfazem todas as condições básicas do modelo original (2.A).

Analisemos, agora, a suposição de linearidade entre as variáveis Y e x . O modelo linear (2.A) é adequado quando os desvios da regressão da função linear são pequenos em relação aos desvios dos erros que pode ser testado através da estatística

$$F = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 / 1}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 / n-2} \quad (2.4.4)$$

que, com a suposição de normalidade dos erros e sob a hipótese $H_0 : \beta = 0$, tem distribuição de Fisher-Snedecor com $(1, n-2)$ graus de liberdade. Também é conveniente verificar o gráfico da dispersão dos pontos (Y_i, x_i) , $i = 1, \dots, n$ e analisar o comportamento dos resíduos (as diferenças entre os valores observados de Y e os seus respectivos valores estimados \hat{Y}) - ver por exemplo,

Draper e Smith (1981). Em algumas situações de calibração, temos que a própria estrutura teórica da relação entre Y e x implica na linearidade da regressão.

Mas existem circunstâncias nas quais a curva de calibração linear simples não é ajustável tais como nos termômetros, nos amperímetros e nos ensaios radio-imunológicos (radioimmunoassay). Nestes casos, podemos ou linearizar os dados através de transformações e ajustar uma curva de calibração linear pelo método dos mínimos quadrados, ou ajustar, diretamente, uma curva de calibração não linear. A seguir salientamos alguns artigos que tratam do problema da calibração não linear. O texto de Schwartz (1977) apresenta a estimação de ξ quando a curva de calibração pode ser ajustada ou por segmentos lineares ou por funções de três parâmetros ou por funções polinomiais, além disto, mostra as consequências da violação da suposição de igualdade de variância em cada um destes tipos de ajuste. No trabalho de Tiede e Pagano (1979), encontramos o estudo do ajuste da linha de calibração por hipérbolas modificadas que são utilizadas em especial nos ensaios radio-imunológicos para determinar minúsculas concentrações de substâncias importantes do ponto de vista biológico e químico. O uso de segmentos de funções polinomiais chamados de funções "spline" é exposto por Lechner et al (1982). Knafel et al (1984) desenvolveram um método para ajustar o modelo geral $Y = f(x) + \epsilon$, impondo apenas que a função $f(x)$ tenha uma expansão por séries de Taylor de uma determinada ordem cujo resto tenha limites conhecidos.

Se a suposição dos valores x_i , $i = 1, \dots, n$, fixos ou ao menos sujeitos a erros desprezíveis em relação aos da variável Y , for infringida, não teremos mais um problema de calibração

no sentido discutido neste trabalho e sim de calibração comparativa conforme foi definido na Seção 1.2.

Existem situações em que a independência dos erros pode ficar comprometida, em particular, quando os valores da variável Y_i são observados em função do tempo, surgindo então a autocorrelação dos erros. Pepper (1973) analisa esta questão e faz comparações entre vários métodos alternativos.

CAPÍTULO 3

O ESTIMADOR INVERSO

Supondo que as variáveis Y e x sejam linearmente relacionadas, e sendo as observações da variável aleatória Y obtidas a partir dos valores de x fixados, podemos reescrever o modelo (2A) como

$$x = \lambda_0 + \lambda_1 E(Y), \quad (3.A)$$

sendo $E(Y) = Y - \varepsilon$ e onde λ_0 e λ_1 são parâmetros definidos no espaço paramétrico Ω e ε é o erro casual não observável da variável Y com média zero e desvio padrão σ .

Podemos então escrever:

$$x = \lambda_0 + \lambda_1 Y + \varepsilon', \quad (3.B)$$

sendo $\varepsilon' = -\varepsilon\lambda_1$.

Tomamos uma amostra aleatória de tamanho n $(x_1, Y_1), \dots, (x_n, Y_n)$ do par (x, Y) . Pelo método dos mínimos quadrados, com a suposição (falsa) de que os ε'_i são independentes de Y_i , obtemos a reta ajustada:

$$\hat{x} = \ell_0 + \ell_1 Y$$

onde

$$\ell_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} \quad (3.C)$$

e $\ell_0 = \bar{x} - \ell_1 \bar{Y}$,

$$\text{com } \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad \text{e} \quad \bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i$$

Estabelecendo um valor de y_0 da variável Y no modelo acima, temos um estimador para o ξ correspondente. Este usualmente é chamado de estimador inverso pois é baseado na regressão inversa de x em Y , apesar de x não ser uma variável aleatória.

Um histórico e a comparação deste método com os clássicos é apresentado na Seção 3.3. Salientamos que as estimativas produzidas por esta técnica são completamente independentes das obtidas pelo método clássico.

3.1. ESTIMADOR PONTUAL INVERSO

O estimador pontual do parâmetro ξ pelo método inverso é obtido diretamente, considerando a linha ajustada (3.C) no ponto (y_0, ξ) :

$$\hat{\xi} = x_I = l_0 + l_1 y_0, \quad (3.1.1)$$

sendo l_0 e l_1 os estimadores de mínimo quadrado dos parâmetros λ_0 e λ_1 . A expressão (3.1.1) pode ser reescrita como

$$x_I = \bar{x} + l_1 (y_0 - \bar{y}) \quad (3.1.2)$$

Graficamente, este procedimento pode ser visualizado na Figura 3.1.1.

No caso de y_0 não ser um valor fixado, mas uma variável aleatória cuja função de densidade é determinada por ξ , e com uma amostra aleatória de tamanho k de Y_{0i} obtemos:

$$x_I = l_0 + l_1 \bar{Y}_0 \quad (3.1.3)$$

onde $\bar{Y}_0 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_{0i}$

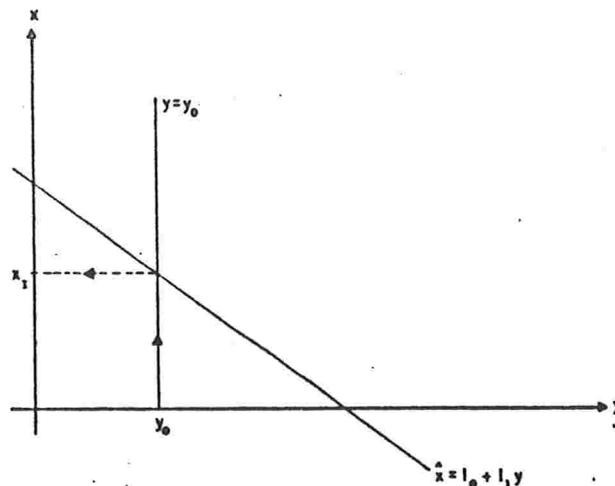


Figura 3.1.1 : Obtenção gráfica de x_I

EXEMPLO 3.1 (continuação do Exemplo 1.1)

No exemplo da calibração do termopar construímos a regressão "invertida" da temperatura real pela temperatura observada obtendo por (3.C),

$$\hat{x} = 7,1605 + 1,0486Y$$

Se o experimentador observa no termopar a temperatura de $Y_0 = 200^\circ\text{C}$ então, por (3.1.2), a estimativa da temperatura real correspondente será

$$x_I = 250 + 1,0486(200 - 231,5875) = 216,877^\circ\text{C}$$

Comparando com a temperatura estimada pelo método clássico (no Exemplo 2.1), vemos que o valor estimado pela técnica inversa é ligeiramente maior ($x_I - x_c = 0,021^\circ\text{C}$) que o do método clássico. Como veremos na Seção 3.3, esta diferença aumenta, em valor absoluto, com o aumento do distanciamento entre o ponto observado e a média \bar{Y} . Seja, por exemplo, a temperatura observada no termopar de $Y_0 = 100^\circ\text{C}$. Pelo método clássico, (2.1.8), o valor estimado da temperatura real é $x_c = 111,923^\circ\text{C}$ enquanto pelo inverso, (3.1.2), é $x_I = 112,020^\circ\text{C}$. Neste caso, a diferença entre o valor estimado pelas duas técnicas será de $0,097^\circ\text{C}$.

Na notação matricial, o modelo (3.A) pode ser escrito como

$$\underline{X} = E(\underline{Y}^*)\underline{\lambda} \quad (3.1.4)$$

com $E(\underline{Y}^*) = (\underline{Y}^* - \underline{\varepsilon})$,

$$X = \alpha_0 + \alpha_1 E(Y)$$

onde

$$\underset{(n,1)}{\tilde{X}} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \underset{(2,1)}{\tilde{\lambda}} = \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \end{bmatrix},$$

$$\underset{(n,2)}{\tilde{Y}^*} = \begin{bmatrix} 1 & Y_1 \\ 1 & Y_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & Y_n \end{bmatrix} \quad e \quad \underset{\sim}{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_1 \\ 0 & \varepsilon_2 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

são respectivamente o vetor dos valores x_i fixados, a matriz dos parâmetros, a matriz dos dados observados e a matriz dos erros.

O estimador de ξ corresponderá a uma combinação linear apropriada dos elementos do estimador do vetor paramétrico $\underline{\lambda}$. Sendo $\underline{\omega}'$ o vetor $(1, y_0)$ fixado (o que implica em y_0 ser uma constante) temos

$$\xi = \underline{\omega}' \underline{\lambda}$$

Substituindo $E(\underline{Y}^*)$ em (3.1.4) obtemos

$$\underline{X} = \underline{Y}^* \underline{\lambda} + \underline{\varepsilon}^*, \quad (3.1.5)$$

sendo $\underline{\varepsilon}^* = -\underline{\varepsilon} \underline{\lambda}$.

O estimador dos parâmetros (λ_0, λ_1) é obtido minimizando-se $\underline{\varepsilon}^{*'} \underline{\varepsilon}^*$, supondo (erroneamente) que $\underline{\varepsilon}^*$ e \underline{Y}^* são independentes. Isto resulta em

$$\hat{\underline{\lambda}} = (\underline{\ell}_0, \underline{\ell}_1) = (\underline{Y}^{*'} \underline{Y}^*)^{-1} \underline{Y}^{*'} \underline{X} \quad (3.1.6)$$

Portanto

$$x_I = \underline{\omega}' (\underline{Y}^*{}' \underline{Y}^*)^{-1} \underline{Y}^* \underline{X} \quad (3.1.7)$$

Outro modo de obtermos este estimador é pelo método de estimação composta (compound estimation) proposto inicialmente por Robbins (1950) e aplicado ao problema de calibração por Lwin e Maritz (1982). Consiste em assumir o modelo

$$Y = \alpha + \beta x + \varepsilon ,$$

sendo ε com média zero e desvio padrão σ e encontrar as constantes c_1 e c_2 que minimizam o erro médio quadrado total (compound error) do experimento inicial. Isto é, minimizando

$$\sum_{i=1}^n E \left(\phi(Y_i) - x_i \right)^2 \quad (3.1.8)$$

na classe das funções $\phi(Y) = c_1 + c_2 Y$, onde a esperança é em relação às variáveis aleatórias Y_1, \dots, Y_n para x_1, \dots, x_n fixas. Sendo a função linear ϕ , com c_1 e c_2 correspondentes ao mínimo de (3.1.8), a que melhor se ajusta para os valores conhecidos x_i , parece ser uma candidata razoável para estimar ξ quando este é desconhecido e pertence ao intervalo de calibração definido pelos x_i , $i = 1, \dots, n$.

Assumindo que os parâmetros α , β e σ^2 são conhecidos, as constantes c_1 e c_2 que minimizam (3.1.8) são tais que, ~~OBTENHO~~ ;

$$\xi = \left(1 + \frac{\beta^2}{\sigma^2} \frac{S_{XX}}{n} \right)^{-1} \left[\bar{x} + \frac{\beta^2}{\sigma^2} \frac{S_{XX}}{n} \frac{Y_0^{-\alpha}}{\beta} \right] \quad (3.1.9)$$

onde $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$.

Notemos que (3.1.9) é uma média ponderada de \bar{x} e do esti-

mador clássico, sendo os parâmetros α , β e σ^2 conhecidos e os x_i fixos, $i = 1, \dots, n$. Observemos, também, que o estimador utiliza, além do valor Y_0 , os x_i , $i = 1, \dots, n$, da primeira fase.

Retornemos à situação mais real na qual os parâmetros α , β e σ^2 são desconhecidos. Podemos escrever (3.1.9) como:

$$\xi = \bar{x} + \frac{\beta \frac{S_{XX}}{n-1}}{\left(\frac{n}{n-1}\right) \sigma^2 + \beta^2 \frac{S_{XX}}{n-1}} (Y_0 - \alpha - \beta \bar{x}) \quad (3.1.10)$$

Por outro lado, temos

$$E(\bar{Y}) = \alpha + \beta \bar{x},$$

$$E\left(\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{n-1}\right) = \beta \frac{S_{XX}}{n-1}$$

e

$$E\left(\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{n-1}\right) = \sigma^2 + \beta^2 \frac{S_{XX}}{n-1}$$

Portanto, pelo método dos momentos, sendo $n-1 \approx n$, segue de (3.1.10) que um estimador de ξ é dado por

$$\hat{\xi} = \bar{x} + \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} (Y_0 - \bar{Y}) \quad (3.1.11)$$

que é exatamente o estimador (3.1.2) obtido utilizando (erroneamente) o método dos mínimos quadrados e sem a suposição de qualquer distribuição para os erros.

Williams (1969) afirma que, para amostras de tamanho $n \geq 4$ o estimador inverso tem esperança definida e erro quadrático médio finito.

Expressões aproximadas para a esperança, para o erro quadrático médio e para a variância foram obtidas, desenvolvendo x_I em séries de Taylor até o termo de ordem n^{-1} , no trabalho de Lwin (1981). É imposto somente que a distribuição dos erros ϵ_i seja tal que $E(\epsilon_i) = 0$, $E(\epsilon_i^2) = \sigma^2$, $E(\epsilon_i^3) = \mu_3$ e $E(\epsilon_i^4) = \mu_4 < \infty$, ou seja, que o quarto momento seja finito. Estas expressões são dadas por

$$E(x_I) \approx \xi + \frac{\sigma^2(\bar{x} - \xi)}{\Delta \beta^2 \sigma_x^2} - \frac{2(\bar{x} - \xi)\sigma^2}{\beta^2 \Delta^3 \sigma_x^2 (n-1)} - \frac{(\bar{x} - \xi)\sigma^4 (\beta_2 - 3)}{n \beta^4 \sigma_x^4 \Delta^3}, \quad (3.1.13)$$

$$\begin{aligned} \text{EQM}(x_I) \approx & \frac{\sigma^2}{\beta^2 \Delta^2} \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{k} + \frac{(\xi - \bar{x})^2}{S_{XX}} + \frac{\sigma^2 (\Delta^2 - 2\Delta + 6)}{k S_{XX} \beta^2 \Delta^2} \right) + \\ & + \frac{\sigma^4 (\xi - \bar{x})^2}{\beta^4 \sigma_x^4 \Delta^2} \left(1 - \frac{6}{(n-1)\Delta^2} \right) + \\ & + \frac{(\beta_2 - 3)\sigma^4 (\xi - \bar{x})^2}{n \beta^4 \Delta^4 \sigma_x^4} \left(1 - \frac{2\sigma^2}{\beta^2 \sigma_x^2 \Delta^2} + \frac{3\sigma^2}{k} \right) + \\ & + \frac{4\mu_3 (\xi - \bar{x})}{n \beta^3 \Delta^3 \sigma_x^2} \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

sendo $\Delta = 1 + \frac{\sigma^2}{\beta^2 \sigma_x^2}$, $\sigma_x^2 = \frac{S_{XX}}{n}$ com $S_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ e $\beta_2 = \frac{\mu_4}{\sigma^4}$

O estimador inverso \bar{x}_I é assintoticamente viciado pois sua esperança assintótica é dada por

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E(x_I) = \xi + \frac{\sigma^2 (\bar{x} - \xi)}{\beta^2 \Delta \sigma_x^2} \quad (3.1.15)$$

O seu erro quadrático médio assintótico é dado por

$$\lim_{n \rightarrow \infty} EQM(x_I) = \frac{\sigma^2}{k \beta^2 \Delta^2} + \frac{\sigma^4 (\bar{x} - \xi)^2}{\beta^4 \sigma_x^4 \Delta^2} \quad (3.1.16)$$

Assim quando $n \rightarrow \infty$ e $k \rightarrow \infty$ temos que

$$E(x_I) \rightarrow \xi + \frac{\sigma^2 (\bar{x} - \xi)}{\beta^2 \Delta \sigma_x^2} \quad (3.1.17)$$

e

$$EQM(x_I) \rightarrow \frac{\sigma^4 (\bar{x} - \xi)^2}{\beta^4 \sigma_x^4 \Delta^2} \quad (3.1.18)$$

mostrando que o estimador inverso não é consistente.

É interessante examinar o que ocorre com os estimadores dos parâmetros α e β da linha de calibração (2.A) para n grande. Por definição,

$$\lambda_0 = -\frac{\alpha}{\beta} \quad \text{e} \quad \lambda_1 = \frac{1}{\beta}$$

$$\text{Então, } \ell'_0 = -\frac{\ell_0}{\ell_1} \quad \text{e} \quad \ell'_1 = \frac{1}{\ell_1} \quad ,$$

são os estimadores de α e β pelo método inverso. Para $n \rightarrow \infty$ temos que

$$\ell'_1 \rightarrow \beta + \frac{\sigma^2}{\beta \sigma_x^2} = \beta + f$$

$$l'_0 \rightarrow \alpha - \frac{\sigma^2}{\beta\sigma_x^2} \bar{x} = \alpha - f\bar{x} .$$

não sendo portanto consistentes. Utilizando estes estimadores para a linha de calibração temos

$$E(x_I) \rightarrow \frac{f}{f+\beta} \bar{x} + \frac{\beta}{\beta+f} \xi ,$$

$$\text{Var}(x_I) \rightarrow \frac{\sigma^2}{(\beta+f)^2} \tag{3.1.20}$$

e

$$\text{EQM}(x_I) \rightarrow \frac{\sigma^2}{(\beta+f)^2} + \frac{f^2 (\bar{x} - \xi)^2}{(\beta+f)^2} .$$

quando $n \rightarrow \infty$.

Notemos que, se β for muito grande, os estimadores de α e β pelo método inverso tendem a seus estimadores pelo método clássico e portanto x_I tende a x_c .

3.2. ESTIMADOR INVERSO POR INTERVALO DE CONFIANÇA

Utilizando a notação matricial (3.1.4) da Seção 3.1, podemos construir um intervalo de confiança para $\xi = \underline{\omega}' \underline{\lambda}$ com grau de confiança $(1-\alpha)$. Consideremos a seguinte variável:

$$T^* = \sqrt{n} \underline{\omega}' (\underline{\hat{\lambda}} - \underline{\lambda}) \quad (3.2.1)$$

Suponhamos que a distribuição assintótica dos erros $\underline{\varepsilon}^*$ seja normal, isto é

$$\sqrt{n} \underline{\varepsilon}^* \stackrel{f}{\sim} N(0, \underline{v}) \text{ quando } n \rightarrow \infty,$$

com

$$\underline{v}_{(n, n)} = \begin{bmatrix} v_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & v_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & v_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_n \end{bmatrix},$$

uma matriz positiva definida.

Shuster e Dietrich (1976) provaram que a estatística T^* dada em (3.2.1) tem, sob as condições acima, distribuição assintoticamente normal com média zero e variância σ^{*2} , ou seja

$$T^* \stackrel{f}{\sim} N(0, \sigma^{*2}), \quad (3.2.2)$$

sendo

$$\sigma^{*2} = \sum_{i=1}^n (a_{i\sim}^2 B' v_{i\sim} B + c_{i\sim}^2 D' v_{i\sim} D - 2a_{i\sim} c_{i\sim} B' v_{i\sim} D) \quad (3.2.3)$$

e onde

$$\underset{(1,n)}{\underline{A}} = (a_1, a_2, \dots, a_n) = \underline{X}' \left[\underline{I} - E(\underline{Y}^*) \left(E(\underline{Y}^*)' E(\underline{Y}^*) \right)^{-1} E(\underline{Y}^*)' \right],$$

$$\underset{(2,1)}{\underline{B}} = \left(E(\underline{Y}^*)' E(\underline{Y}^*) \right)^{-1} \underline{\omega},$$

$$\underset{(1,n)}{\underline{C}} = (c_1, c_2, \dots, c_n) = \underline{\omega}' \left(E(\underline{Y}^*)' E(\underline{Y}^*) \right)^{-1} E(\underline{Y}^*)',$$

$$e \quad \underset{(2,1)}{\underline{D}} = \left(E(\underline{Y}^*)' E(\underline{Y}^*) \right)^{-1} E(\underline{Y}^*)' \underline{X}$$

Supondo \underline{v} conhecida e substituindo $E(\underline{Y}^*)'$ por \underline{Y}^* em (3.2.3) obtemos um estimador consistente de σ^{*2} , denotado por $\hat{\sigma}^{*2}$. Através da estatística T^* podemos construir um intervalo de confiança assintótico com grau de confiança $(1-\alpha)$ para o parâmetro $\xi = \underline{\omega}' \underline{\lambda}$. O seu limite superior será

$$x_{\text{sup}} = \underline{\omega}' \hat{\underline{\lambda}} + Z_{\alpha/2} \hat{\sigma}^* n^{-1/2}$$

e seu limite inferior

(3.2.4)

$$x_{\text{inf}} = \underline{\omega}' \hat{\underline{\lambda}} - Z_{\alpha/2} \hat{\sigma}^* n^{-1/2}$$

onde $Z_{\alpha/2}$ é o $(1-\alpha/2)$ -ésimo quartil da distribuição normal padronizada.

Notemos que, no caso, $\underline{\omega}' = (1, y_0)$ é um vetor fixo de modo que o intervalo acima só pode ser utilizado quando a "observação" y_0 for fixa, não sujeita a erro aleatório. Salientamos, também, que, da maneira como foi construído o intervalo de confiança, a variância assintótica dos erros, v_i , $i = 1, \dots, n$, não necessariamente tem de ser considerada conhecida, apenas estimável.

EXEMPLO 3.2 (continuação do Exemplo 1.1)

Retornemos ao exemplo da calibração do termopar, consideramos, neste caso, os erros identicamente distribuídos e portanto

$$\underline{v} = \sigma^2 \underline{I}_n$$

sendo \underline{I}_n a matriz identidade de ordem n e σ^2 a variância da distribuição assintótica dos erros, ou seja

$$\sigma^{*2} = \sigma^2 \left[\underline{B}' \underline{B} \sum_{i=1}^n a_i^2 + \underline{D}' \underline{D} \sum_{i=1}^n c_i^2 - 2 \underline{B}' \underline{D} \sum_{i=1}^n a_i c_i \right] \quad (3.2.5)$$

sendo as matrizes definidas em (3.2.3)

Uma estimativa para σ^{*2} é obtida substituindo σ^2 por $\hat{\sigma}_c^2$, estimador de máxima verossimilhança corrigido (definido em (2.1.7)) e $E(\underline{Y}^*)'$ por \underline{Y}^* .

O intervalo com 95% de confiança para a estimativa da temperatura real correspondente à temperatura de $y_0 = 200^\circ\text{C}$ fixada no termopar por (3.2.4) e (3.2.5) é

$$x_{\text{sup}} = 216,877 + 38,506 = 255,38^\circ\text{C}$$

e

$$x_{\text{inf}} = 216,877 - 38,506 = 178,37^\circ\text{C}$$

com comprimento de $77,01^\circ\text{C}$ e sendo $\hat{\sigma}^{*2} = \hat{\sigma}_c^2(4,1) = 24,122$.

3.3. COMPARAÇÃO DOS ESTIMADORES PONTUAIS

Existe uma grande polêmica sobre qual dos estimadores pontuais, o clássico, definido em (2.1.2), ou o inverso, definido em (3.1.1), é o melhor estimador para ξ e, também, sobre qual o melhor critério para compará-los.

Historicamente esta discussão pode ser resumida do seguinte modo. Inicialmente Eisenhart (1939) rejeitou o método inverso de estimação alegando que este não apresentava a propriedade de ser um estimador de máxima verossimilhança enquanto que o clássico tinha esta característica. A partir daí, todos os artigos trataram exclusivamente do estimador clássico como notamos em Williams (1959), Brownlee (1960), Ott (1966), Linning e Mandel (1964) entre outros. O direcionamento das pesquisas na área começou a mudar com os controvertidos artigos de Krutchkoff (1967-69) que comparam a eficiência dos dois estimadores com base no menor erro quadrático médio máximo através de simulações (procedimento de Monte Carlo). Em seu primeiro trabalho (1967), concluiu que o estimador inverso era uniformemente superior para qualquer planejamento dos valores x_i , $i=1, \dots, n$, prévios e para qualquer ponto ξ de interesse tanto extrapolado quanto interpolado em relação aos x_i . Mas, em seu segundo artigo (1969), reconsiderou os resultados anteriores mostrando que, quando ξ extrapola os limites dos valores prefixados x_i , esta superioridade desaparece. Williams (1969) criticou o método de comparação empregado por Krutchkoff provando que o erro quadrático médio do estimador clássico é infinito enquanto que o do estimador inverso é finito, para $n \geq 4$; afirmando ironicamente que, então, do ponto de vista do erro quadrático

médio, qualquer estimador constante (com erro quadrático médio finito) seria preferível ao estimador convencional.

Berkson (1969) estudou o comportamento assintótico ($n \rightarrow \infty$) dos dois estimadores, conforme visto na Seção (2.1.3) e (3.1), mostrando que o erro quadrático médio assintótico do estimador clássico (2.1.10a) é menor que o do inverso (3.1.16), exceto quando ξ se encontra próximo de \bar{x} , ou seja, se

$$|\bar{x} - \xi| < \left(\frac{2\sigma_x^2}{k} + \frac{\sigma^2}{k\beta^2} \right)^{1/2} \quad (3.3.1)$$

Halperin (1970) sugeriu, como critérios alternativos para confrontar os dois estimadores, o estudo de suas consistências, das distribuições do erro quadrático médio e da "proximidade" (closeness) relativa, no sentido definido por Pitman (1937), ou seja, x_I é um estimador mais próximo de ξ que x_c se somente se para todo ξ

$$P\left(|x_I - \xi| < |x_c - \xi|\right) > \frac{1}{2} \quad (3.3.2)$$

Conclui, então, por intermédio destas técnicas, que se o parâmetro ξ estivesse em um pequeno intervalo em torno da média dos x_i iniciais, o estimador inverso forneceria estimadores melhores, e caso contrário, o clássico seria melhor. Demonstrou, também, que o comprimento deste intervalo varia inversamente com o produto de $|\beta/\sigma|$ e do desvio padrão dos x_i iniciais σ_x . Como, na prática, o parâmetro β tende a ser grande, isto implica que o intervalo onde o estimador inverso tem melhor desempenho que o clássico é pequeno.

Martinelle (1970) obteve resultados equivalentes aos de Berkson e de Halperin observando a expressão da eficiência re-

lativa do erro quadrático médio com n suficientemente grande. Saw (1970) reescreveu as expressões dos dois estimadores reafirmando as conclusões anteriores de que não existe um estimador uniformemente melhor para todo ξ e, além disto, mostrou que sempre é possível encontrar outros estimadores melhores que o inverso em um intervalo em torno da média \bar{x} . Consequentemente, o uso do estimador inverso, neste intervalo finito, seria sem interesse.

Shukla (1972) partiu das expressões do erro quadrático médio aproximado do estimador clássico, (2.1.10) e do estimador inverso, (3.1.14), considerou a comparação sobre este aspecto e concluiu o mesmo que os demais autores. Em 1981, Lwin reconsiderou este critério de confrontação, ressaltando que as expressões do erro quadrático médio aproximado do estimador clássico e inverso podem ser escritas, respectivamente, como

$$\frac{A_1}{\sigma_x^2}(\xi - \bar{x})^2 + C_1 \quad \text{e} \quad \frac{A_2}{\sigma_x^2}(\xi - \bar{x})^2 + \frac{B_2}{\sigma_x}(\xi - \bar{x}) + C_2 ;$$

que, em função de ξ , são duas parábolas simétricas (Figura 3.3.1) centradas, respectivamente, em \bar{x} e em $\bar{x} - \frac{B_2 \sigma_x}{2A_2}$ e que se interceptam nos pontos

$$x_A = \bar{x} - \sigma_x \frac{B_2 + (B_2^2 + 4(A_2 - A_1)(C_1 - C_2))^{1/2}}{2(A_2 - A_1)} \quad \text{e} \quad (3.3.3)$$

$$x_B = \bar{x} + \sigma_x \frac{-B_2 + (B_2^2 + 4(A_2 - A_1)(C_1 - C_2))^{1/2}}{2(A_2 - A_1)}$$

conforme a notação utilizada em seu artigo.

Em 1982, Lwin e Moritz demonstraram que, do ponto de vis-

ta da estimação linear composta (linear compound estimation), a diferença essencial entre os dois métodos de estimação é que, para obtermos o estimador clássico, impomos a condição de não viciosidade para estimar os x_i , $i = 1, \dots, n$, iniciais, enquanto que para a obtenção do estimador inverso nenhuma restrição é feita.

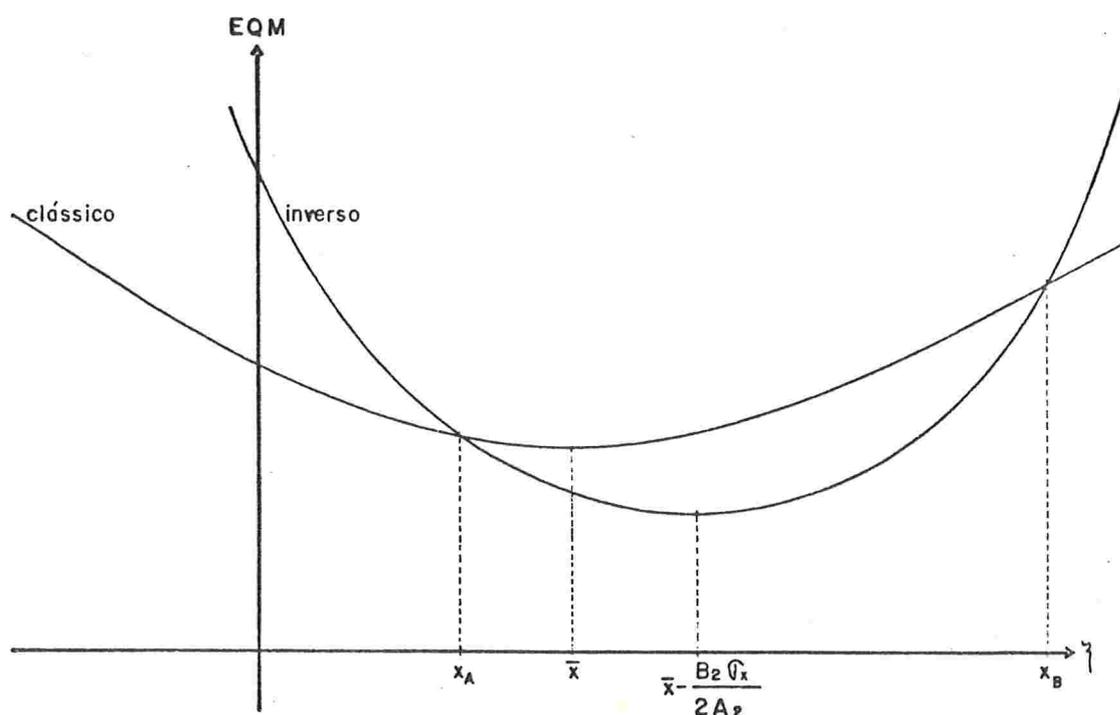


Figura 3.3.1: Comparação do erro quadrático médio (EQM) do estimador clássico e do estimador inverso

Com a finalidade de comparar os estimadores pontuais do parâmetro ξ , Tucker (1980) definiu uma classe geral de estimadores

$$\hat{x} = \bar{x} + \frac{b}{b^2 + c} (\bar{Y}_0 - \bar{Y}) \quad (3.3.4)$$

em que, dependendo do valor de c , temos diversos estimadores de ξ : - se $c = 0$, o estimador clássico, definido em (2.1.8); - se $c = (n-2)\hat{\sigma}_c^2 / S_{XX}$, o estimador inverso, definido em (3.1.2); - se

$c = \sigma^2 / S_{XX}$, o estimador proposto por Naszödi, definido em (2.1.17), e se $c = \hat{\sigma}_c^2 / S_{XX}$, o estimador de Tucker, definido em (2.1.18). Investigando esta classe de estimadores, baseado no erro quadrático médio aproximado, obtido através da expansão de Taylor e na "proximidade" de Pitman, definida em (3.3.2), tanto teoricamente quanto por algumas simulações, Tucker concluiu que o seu estimador é superior ao estimador clássico e, também, como outros já haviam apontado anteriormente, que o estimador inverso tem melhor desempenho que o clássico somente em um intervalo em torno da média \bar{x} .

CAPÍTULO 4

OUTROS MÉTODOS

Devido a fatos indesejáveis tais como: o erro quadrático médio do estimador de máxima verossimilhança de ξ ser infinito, o comprimento do intervalo de confiança clássico de ξ poder ser infinito e depender de Y_0 , outros métodos de estimação de ξ foram propostos. Entre eles, podemos citar, estimadores pelo método estrutural, estimadores pelos métodos bayesianos, estimadores pelo método sequencial e, também, uma análise mais detalhada da função de verossimilhança. Todos eles são baseados na linha de regressão de Y em x , ou seja, (2.A), no modelo clássico, e não na regressão de x em Y .

4.1. ESTIMADOR ESTRUTURAL

A técnica de análise estrutural desenvolvida por Fraser (1968) pode ser aplicada no problema da calibração, como mostra o artigo de Kalotay (1971). Basicamente este método consiste em encontrar a distribuição estrutural marginal correspondente ao parâmetro a ser estimado, integrando a distribuição estrutural no espaço definido pelos outros parâmetros. A estimativa do parâmetro é a moda, ou seja, o ponto de máximo desta distribuição marginal. A distribuição estrutural é, por definição, proporcional ao produto da função de verossimilhança com relação à medida invariante conveniente (right-invariant measure) com respeito a um grupo de transformações que deixa o problema de estimação invariante.

Utilizando a mesma notação e as suposições dos outros capítulos, definimos o seguinte modelo:

$$Y_i = \alpha + \beta x_i + \sigma \varepsilon_i^* \quad , \quad i = 1, \dots, n$$

e

$$Y_{0i} = \gamma + \sigma \varepsilon_i^* \quad , \quad i = 1, \dots, k$$
(4.1.1)

onde $\gamma = \alpha + \beta \xi$ e ε_i^* são os erros aleatórios identicamente distribuídos com média zero, variância 1 e função de probabilidade conhecida $f(\varepsilon^*)$, não sendo necessariamente a distribuição normal.

Pelo modelo estrutural, (4.1.1) pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ x_1 & \dots & x_n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 1 \\ Y_1 & \dots & Y_n & Y_{01} & \dots & Y_{0k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \alpha & \beta & \gamma & \sigma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ x_1 & \dots & x_n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 1 \\ \varepsilon_1^* & \dots & \varepsilon_n^* & \varepsilon_{n+1}^* & \dots & \varepsilon_{n+k}^* \end{bmatrix}$$

sendo que o conjunto de todas as matrizes da forma:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \alpha & \beta & \gamma & \sigma \end{bmatrix},$$

onde $\alpha \in \mathbb{R}$, $\beta \in \mathbb{R}$, $\gamma \in \mathbb{R}$ e $\sigma \in \mathbb{R}_+$, é um grupo (fechado por composição e inversão) em relação à multiplicação de matrizes.

A distribuição estrutural de $(\alpha, \beta, \gamma, \sigma)$ é proporcional a

$$\left[\prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma} f\left(\frac{Y_i - \alpha - \beta x_i}{\sigma}\right) \right] \left[\prod_{i=1}^k \frac{1}{\sigma} f\left(\frac{Y_{0i} - \gamma}{\sigma}\right) \right] \frac{1}{\sigma} d\alpha d\beta d\gamma d\sigma$$

Fazendo $\gamma = \alpha + \beta\xi$, temos

$$|\beta| \left[\prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma} f\left(\frac{Y_i - \alpha - \beta x_i}{\sigma}\right) \right] \left[\prod_{i=1}^k \frac{1}{\sigma} f\left(\frac{Y_{0i} - \alpha - \beta\xi}{\sigma}\right) \right] \frac{1}{\sigma} d\alpha d\beta d\xi d\sigma \quad (4.1.2)$$

onde $\frac{1}{\sigma} d\alpha d\beta d\xi d\sigma$ é a medida invariante.

A distribuição estrutural marginal de ξ é calculada integrando (4.1.2) no espaço definido por α , β , e σ e encontrando sua constante de proporcionalidade, igualando a 1 a integral com respeito a ξ .

Supondo que a distribuição dos ε_i^* seja a distribuição normal padronizada, então, por (4.1.2), a distribuição estrutural é proporcional a:

$$|\beta| \sigma^{-(n+k+1)} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta x_i)^2 + \sum_{i=1}^k (Y_{0i} - \alpha - \beta\xi)^2 \right]\right\} d\alpha d\beta d\sigma d\xi \quad (4.1.3)$$

Integrando (4.1.3) em α , β e σ e considerando $\sum_{i=1}^n x_i = 0$, o que não altera a generalidade dos resultados, Kabtay (1971) mos-

tra que a distribuição estrutural marginal de ξ , $EM(\xi)$ é proporcional a

$$\frac{4A}{Q} + \frac{B^2}{QC} \frac{\Gamma(\omega)}{\Gamma(\omega-1/2)} \left\{ \sum_{i=1}^{\omega-1} \frac{\Gamma(\omega-i-1/2)}{\Gamma(\omega-i)} \left(\frac{1}{1-B^2/4AC} \right)^i \right\} \quad (4.1.4)$$

onde $\omega = \frac{n+k}{2} - 1$ e $\omega \in \mathbb{N}$,

$$A = b^2 \left[x_c^2 + \sum_{i=1}^n x_i^2 \left\{ \frac{1}{n} + \frac{1}{k} \right\} \left(1 + \frac{\hat{\sigma}_c^2 (n+k-3)}{b^2 \sum_{i=1}^n x_i^2} \right) \right],$$

$$B = -2b \left[\xi x_c + \sum_{i=1}^n x_i^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{k} \right) \right],$$

$$C = \xi^2 + \sum_{i=1}^n x_i^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{k} \right)$$

e

$$Q = 4AC - B^2$$

sendo a , b , $\hat{\sigma}_c^2$ e x_c os respectivos estimadores de máxima verossimilhança dos parâmetros α , β , σ^2 e ξ definidos em (2.1.6). A constante de proporcionalidade de (4.1.4) pode ser avaliada através da integração numérica no espaço definido por ξ .

Observamos que se

$$\frac{b^2 \sum_{i=1}^n x_i^2}{\hat{\sigma}_c^2 (n+k-3)} = \frac{b^2}{\widehat{\text{Var}}(b) (n+k-3)} \quad \text{ou} \quad \frac{n+k}{2} - 1$$

for "grande", então (4.1.4) é aproximadamente proporcional a

$$\frac{B^2 \frac{n+k}{2} - 3}{Q \frac{n+k}{2} - 1} \quad (4.1.5)$$

Kalotay (1971) sugere que esta noção de "grande" é relativa, mostrando que para

$$\frac{b^2}{\widehat{\text{Var}}(b)(n+k-3)} = 0,631, \quad n=9 \quad \text{e} \quad k=1,$$

a aproximação de (4.1.5) para a distribuição estrutural marginal de ξ é razoavelmente boa.

A moda, x_E , que é o estimador do parâmetro ξ , das distribuições (4.1.4) e (4.1.5) parece estar, em valor absoluto, entre $|x_c| \left(1 + \frac{\widehat{\text{Var}}(b)(n+k-3)}{b^2}\right)$ e $|x_c|$.

No caso em que $k=1$, $x_c \left(1 + \frac{\widehat{\text{Var}}(b)(n+k-3)}{b^2}\right)$ é exatamente o estimador inverso. Pode-se mostrar, se $k \geq 1$, que

$$|x_c| \left(1 + \frac{\widehat{\text{Var}}(b)(n+k-3)}{b^2}\right) \leq |x_I| \leq |x_c| \quad (4.1.6)$$

sendo x_I o estimador inverso e x_c o estimador clássico do parâmetro ξ definidos respectivamente em (3.1.1) e (2.1.2).

Outra característica, de interesse, da distribuição estrutural marginal de ξ é o inverso da informação observada no ponto x_E (que nos fornece uma medida da "dispersão" dos valores em torno da moda), isto é,

$$-\frac{1}{\left. \frac{\partial^2 \ln EM(\xi)}{\partial \xi^2} \right|_{x_E}} \quad (4.1.7)$$

onde, $EM(\xi)$ é a distribuição estrutural marginal de ξ e x_E , a

moda desta distribuição, assim como, se possível, o seu gráfico.

EXEMPLO 4.1 (continuação do Exemplo 1.1)

OBSERVAÇÃO: nesta seção supomos que $\sum_{i=1}^n x_i = 0$, portanto, os resultados abaixo são expressos de modo a satisfazer esta condição. Entre parênteses, mostramos os mesmos na escala utilizada no restante do trabalho.

Tomemos o problema da calibração e assumamos que, na segunda etapa do processo de calibração, o experimentador observa leituras do ponto de interesse: $203,00^{\circ}\text{C}$, $200,53^{\circ}\text{C}$, $198,17^{\circ}\text{C}$ e $201,51^{\circ}\text{C}$ (para simularmos esta amostra sorteamos aleatoriamente valores da distribuição normal com média 200 e desvio padrão 2,4), obtendo $\hat{\sigma}_c^2 = 5,571$ ($k = 4$).

Seja,

$$\frac{b^2 \sum_{i=1}^n x_i^2}{\hat{\sigma}_c^2 (n+k-3)} = 1.304,328$$

pelo que foi exposto acima podemos aproximar (4.1.4) pela expressão (4.1.5), resultando que a distribuição estrutural marginal de ξ é, aproximadamente, proporcional a

$$\frac{B^2 C^7}{Q^9}$$

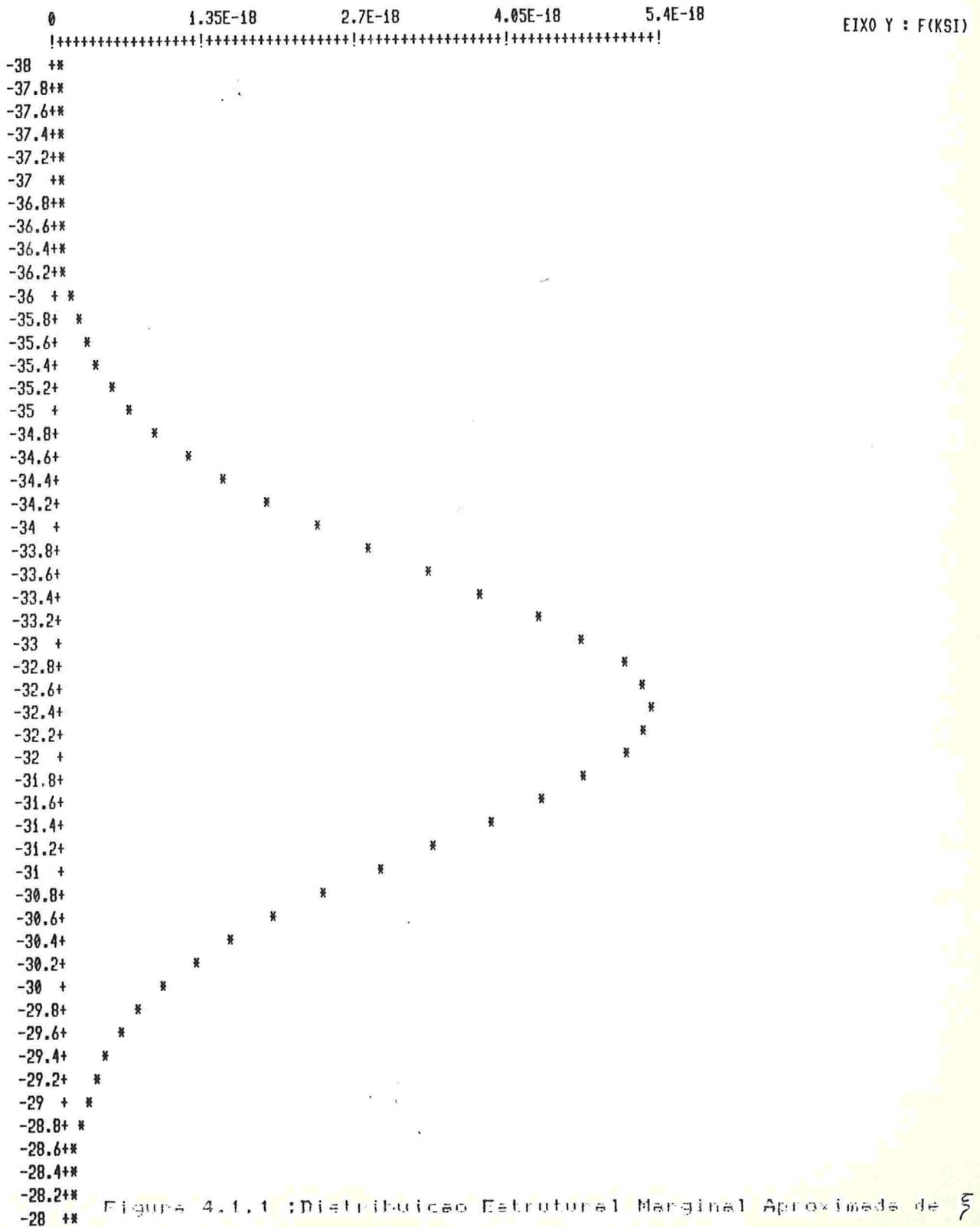
onde, $B = 61,57\xi - 81.007,50$

$$C = \xi^2 + 42.500,00$$

$$Q = 4AC - B^2 \quad \text{sendo } A = 39.578,44 ,$$

conforme representado na Figura 4.1.1. A moda, isto é, o esti-

mador da temperatura real correspondente à amostra observada da distribuição estrutural está entre o ponto $-32,327$ ($217,673^{\circ}\text{C}$) e o estimador clássico, por (2.1.6) $x_c = -32,302$ ($217,698^{\circ}\text{C}$). Notemos que, neste caso, o estimador inverso, por (3.1.3), é $x_I = -32,281$ ($217,719^{\circ}\text{C}$).



4.2. ESTIMADORES BAYESIANOS

Os estimadores bayesianos seguem duas correntes distintas: a do trabalho de Hunter e Lamboy (1981) que considera a densidade de:

$$\xi = \frac{(\eta - \alpha)}{\beta}$$

onde η é o valor esperado de Y_0 e α e β são os parâmetros da regressão, de modo que a distribuição a priori de ξ é implicitamente dada pela distribuição a priori de η , α e β ; enquanto que os estudos da linha de Dunsmore (1968) e de Hoadley (1970) usam diretamente uma distribuição a priori para ξ . Não é pretensão deste trabalho concluir qual das duas tendências é mais correta filosoficamente, nossa intenção é apenas de apresentar os resultados, as críticas e considerações que aparecem na literatura a respeito de ambas.

Hoadley (1970) argumenta que o estimador de máxima verossimilhança x_c não é satisfatório, de um ponto de vista independente da consideração de seu erro quadrático médio ser infinito, como defende Krutchkoff (1967, 1969) e contesta Williams (1969) e Halperin (1970). Ele considera o coeficiente do termo ξ^2 da equação (2.2.7), suporte do intervalo de confiança de x_c , que pode ser escrito em função da estatística F , que é o quadrado da estatística t para testar a hipótese $\beta = 0$ (definida em (2.2.10)) do seguinte modo

$$\frac{\hat{\sigma}_c}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} (F - F_\alpha)$$

sendo F_α o α -ésimo percentil da distribuição de Fisher-Snedecor

e $\hat{\sigma}_c^2$, o estimador de máxima verossimilhança corrigido (2.1.7) de σ^2 . De modo que, se F é muito maior que a constante F_α , o intervalo de discriminação é estreito e o estimador x_c é preciso, mas se, ao contrário, F for muito menor que F_α , x_c é impreciso. Em outras palavras, os dados (x_i, Y_i) e Y_{0i} contêm informações sobre a precisão do estimador x_c e parece razoável que, de algum modo, o conhecimento de sua possível incerteza seja ponderado na estimação de ξ , o que não ocorre com o estimador x_c . É exatamente isto, segundo Hoadley, que o estimador bayesiano pondera.

Outra motivação para o desenvolvimento dos estimadores bayesianos é justificar teoricamente o estimador inverso, definido em (3.1.1), provando que este estimador e o bayesiano coincidem para determinadas distribuições a priori.

Nesta seção, usaremos a seguinte notação:

dados 1 - o vetor dos n pares (x_i, y_i) , observados na primeira fase do processo de calibração: o ajuste da linha de calibração;

dados 2 - o vetor dos k valores Y_{0i} , observados para um dado ξ desconhecido e fixo na segunda fase do processo: a calibração propriamente dita;

dados - dados 1 u dados 2 - o vetor de todos os dados observados no processo.

4.2.1. DISTRIBUIÇÃO A PRIORI PARA O PARÂMETRO ξ

A solução bayesiana encontrada tanto no trabalho de Hoadley (1970) quanto a proposta por Dunsmore (1968) para o problema

de regressão inversa é baseada na distribuição a priori do parâmetro ξ , $\pi(\xi)$, definida no espaço paramétrico \mathcal{X} . Esta distribuição representa nossas impressões sobre a distribuição dos possíveis valores do parâmetro ξ na "futura" experiência (segunda fase do processo de calibração), não sendo necessariamente relacionada de qualquer maneira com os x_i , $i = 1, \dots, n$, prefixados e usados no ajuste da linha de calibração (chamada pelos Bayesianos de experimento informativo). Somente de uma análise particular do experimento dependerá a escolha subjetiva de $\pi(\xi)$ variando, desta forma, de experimento para experimento.

A distribuição a posteriori do parâmetro ξ , $\pi(\xi/\text{dados})$, será proporcional ao produto de sua distribuição a priori pela função de verossimilhança, sendo que os outros parâmetros foram eliminados do problema, ou seja, $\pi(\xi/\text{dados})$ é proporcional a

$$\pi(\xi)L(\xi/\text{dados}).$$

Será utilizado o modelo clássico (2.1.3) e, além das suas suposições habituais, a independência entre $(\alpha, \beta, \sigma^2)$ e ξ , que parece razoável, desde que β é uma propriedade do instrumento e que ξ é uma característica do objeto medido. Consideramos, também, apenas para efeito de simplificação dos cálculos, sem perda de generalidade, que os x_i , $i = 1, 2, \dots, n$, prefixados na primeira fase do experimento, são tais que,

$$\sum_{i=1}^n x_i = 0 \quad \text{e} \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 = 1$$

A função de verossimilhança $L(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi/\text{dados})$ anteriormente definida em (2.1.4) pode ser escrita como proporcional a:

$$L(\alpha, \beta, \sigma^2/\text{dados 1})L(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi/\text{dados 2})$$

ou ainda $L(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi / \text{dados})$ proporcional a

$$L(\alpha, \beta, \sigma^2 / x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n) \frac{1}{\sigma^k} \cdot \\ \cdot \exp \left\{ \left[(k-1)v^2 + k(\bar{y}_0 - \alpha - \beta\xi)^2 \right] / 2\sigma^2 \right\}$$

onde $\bar{y}_0 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_{0i}$ e

$$v^2 = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k (y_{0i} - \bar{y})^2$$

Assim $(y_1, y_2, \dots, y_n, v^2$ e $\bar{y}_0)$ é uma estatística suficiente para $(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi)$ e então temos que

$$\pi(\xi / \text{dados}) = \pi(\xi / y_1, y_2, \dots, y_n, v^2, \bar{y}_0)$$

Pelo teorema de Bayes temos que

$$\pi(\xi / y_1, y_2, \dots, y_n, v^2, \bar{y}_0) \propto \pi(\xi / y_1, \dots, y_n) \pi(\bar{y}_0, v^2 / y_1, \dots, y_n)$$

$$\propto \pi(\xi) \pi(\bar{y}_0 / \xi, v^2, y_1, \dots, y_n) \pi(v^2 / \xi, y_1, \dots, y_n)$$

$$\propto \pi(\xi) \pi(\bar{y}_0 / \xi, v^2, y_1, \dots, y_n)$$

pois $\pi(v^2 / \xi, y_1, \dots, y_n)$ independe de ξ e onde o símbolo \propto significa "proporcional a". Portanto, $\pi(\xi / \text{dados})$ é proporcional a

$$\pi(\xi) L(\xi) \tag{4.2.2}$$

sendo

$$L(\xi) = \pi(\bar{y}_0 / \xi, v^2, y_1, \dots, y_n)$$

uma espécie de função de verossimilhança representando as informações de ξ obtidas por todas as fontes, exceto a da distribuição a priori de ξ .

Hoadley (1970), supondo a priori que a distribuição de $(\alpha, \beta, \sigma^2)$ é proporcional a $1/\sigma^2$ (isto é, $(\alpha, \beta, \ln \sigma^2)$ tendo distribuição uniforme), demonstrou que:

$$L(\xi) = \frac{\frac{1}{\hat{\sigma}_c} \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{\xi^2}{n} \right)^{-1/2}}{\left\{ 1 + \frac{(\bar{y}_0 - a - b\xi)^2}{(n+k-3)\hat{\sigma}_c^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} + \frac{\xi^2}{n} \right)} \right\}^{\frac{n+k-2}{2}}} \quad (4.2.3)$$

sendo $(\hat{\sigma}_c^2, a, b)$ os estimadores de mínimos quadrados dos parâmetros $(\sigma^2, \alpha, \beta)$, respectivamente, dados em (2.B) e (2.1.7).

Salientamos que a função acima apresenta determinadas características. Para n e k fixos $L(\xi)$ torna-se mais concentrada quando F , a estatística para testar $\beta = 0$, aumenta e, no caso contrário, se F diminui, torna-se mais dispersa. Outro aspecto é se a distribuição a priori de ξ for considerada a priori não informativa (distribuição uniforme na reta), então o estimador bayesiano para a função de perda quadrática não é razoável, pois $\int_{-\infty}^{\infty} L(\xi) d\xi = +\infty$. Portanto, uma distribuição a priori adequada (informativa) para ξ é pré-requisito para obtemos uma solução bayesiana prática.

Hoadley, nas suas simulações, com $k=1$, utilizou a priori

$$\pi(\xi) \propto \begin{cases} \left[1 + \frac{1}{d} \frac{\xi-c}{s} \right]^{-\frac{(d+1)}{2}} & \text{para } \xi \in I \in \mathcal{X} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

sendo I o intervalo dos valores x_i observados, ou melhor, ξ tendo a mesma distribuição que a variável $c + t_d S$ onde t_d tem distribuição t-student com d graus de liberdade truncada no intervalo I .

Vejamos o caso particular, $k=1$ e a priori conjugada, distribuição t-student com $(n-3)$ graus de liberdade, centrada no zero e com fator de escala $\left(\frac{n+1}{n-3}\right)^{1/2}$, isto é, com a mesma distribuição que a variável $t_{(n-3)}\left(\frac{n+1}{n-3}\right)^{1/2}$. Então por (4.2.3) e (4.2.2) a sua distribuição a posteriori será a distribuição t-student com $(n-2)$ graus de liberdade, centrada em x_I , estimador inverso definido em (3.1.1) e fator de escala $\left(\frac{n+1}{F+n-2} + \frac{x_I^2}{F}\right)^{1/2}$. Considerando a função de perda quadrática, o estimador de Bayes é a média x_I , caracterizando deste modo, para o ponto de vista bayesiano, teoricamente o estimador inverso de ξ . Este resultado não é justificável sem que a distribuição a priori acima seja razoável para a incerteza a priori sobre ξ , restringindo, assim, a validade do estimador inverso como um estimador de Bayes.

Quando a suposição desta distribuição a priori é aceitável, então o menor intervalo a posteriori (shortest posterior interval) com $(1-\alpha)100\%$ de confiança é dado por:

$$x_I \pm \left\{ F_\alpha \left(\frac{n+1}{F+n-2} + \frac{x_I^2}{F} \right) \right\}^{1/2}, \quad (4.2.4)$$

sendo F_α o α -ésimo percentil da distribuição de Fisher-Snedecor com $(1, n-2)$ graus de liberdade. Salientamos que se F , o quadrado da estatística definida em (2.2.10), for muito grande, o intervalo clássico (2.2.8) e o bayesiano (4.2.4) são aproxima-

damente iguais. Por outro lado, se F tender a zero, então (4.2.4) aproxima-se do intervalo $(1-\alpha)$ da distribuição a priori que, no caso, é

$$\pm \left\{ F_{\alpha} \left(\frac{n+1}{n-2} \right) \right\}^{1/2},$$

onde F_{α} é o α -ésimo percentil da distribuição Fisher-Snedecor com $(1, n-3)$ graus de liberdade, não aparecendo então o efeito de Fuller-Creasy. Também o comprimento do intervalo da posteriori não é afetado pelo valor y_0 , ao contrário do que ocorre no intervalo clássico que se torna maior com o aumento da diferença $|\bar{Y}_0 - \bar{Y}|$. Outra característica dos menores intervalos a posteriori é que $(1-\alpha)$ mede efetivamente a confiança com que o intervalo contém ξ para a amostra efetivamente observada, o que não acontece com o intervalo clássico pois, neste caso, $(1-\alpha)$ está associado com a proporção de intervalos que contém ξ para um grande número de intervalos construídos a partir de várias repetições do experimento.

Com as condições acima, isto é os x_i , $i = 1, \dots, n$ padronizados e $k = 1$, podemos escrever

$$x_I = \frac{F}{F + (n-2)} x_c$$

implicando que $|x_I - x_c| \rightarrow 0$ quando $F \rightarrow \infty$. Assim, do ponto de vista bayesiano e supondo a distribuição a priori para ξ , a distribuição t-student com $(n-3)$ graus de liberdade, centrada em zero e com fator de escala $\left(\frac{n+1}{n-3} \right)^{1/2}$, temos que quanto mais infor-

mativos forem os dados (isto é, quanto maior for F) maior a adaptação de x_c como estimador de ξ .

Dunsmore (1968), em seu trabalho pioneiro, desenvolveu as

idéias de estimação bayesianas aplicadas na calibração em dois modelos: considerando x_i , $i=1, \dots, n$ prefixados e Y_i , $i=1, \dots, n$, com distribuição de Poisson e supondo (x_i, Y_i) , $i=1, \dots, n$, independentes com distribuição normal bivariada. Neste segundo caso, obteve x_I , estimador inverso, como estimador de ξ . Mas, como afirma Hoadley (1970), este resultado não é nenhuma surpresa pois, para um modelo bivariado, a estimação de ξ é realmente um problema de previsão (o contrário do problema de previsão reversa) e os princípios clássicos podem ser usados para obter x_I como previsor de ξ .

EXEMPLO 4.2 (continuação do Exemplo 1.1)

No exemplo do termopar, consideramos que o experimentador tem motivos para admitir que a distribuição a priori do parâmetro ξ seja

$$\pi(\xi) = 0,39135 \left(\frac{1}{1 + \xi^2/17} \right)^7$$

isto é, uma distribuição t-student com 13 graus de liberdade, centrada em zero e com fator de escala $(17/13)^{1/2}$ (Figura 4.2.1).

Suponhamos que o experimentador observe no termopar a leitura de 200°C e queira estimar o valor da temperatura real correspondente. Por (4.2.3) e (4.2.2), a distribuição a posteriori é uma distribuição t-student com 14 graus de liberdade, centrada em $x_I = 216,877^\circ\text{C}$ - estimador inverso determinado no Exemplo 3.1 - e fator de escala 1,4970, ou seja

$$\pi(\xi) = 0,39189 \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{14} \left(\frac{\xi - 216,877}{1,4970} \right)^2} \right)^{7,5},$$

$\pi(\xi/\text{dados})$

conforme representado na Figura 4.2.2. Tendo o ponto de máximo, evidentemente, em $x_I = 216,877^\circ\text{C}$.

O intervalo a posteriori, com 95% de confiança da temperatura real, correspondente à leitura de 200°C , por (4.2.4) é

$$x_{\text{sup}} = 216,877 + 3,211 = 220,088^\circ\text{C}$$

e

$$x_{\text{inf}} = 216,877 - 3,211 = 213,666^\circ\text{C}$$

com comprimento de $6,422^\circ\text{C}$.

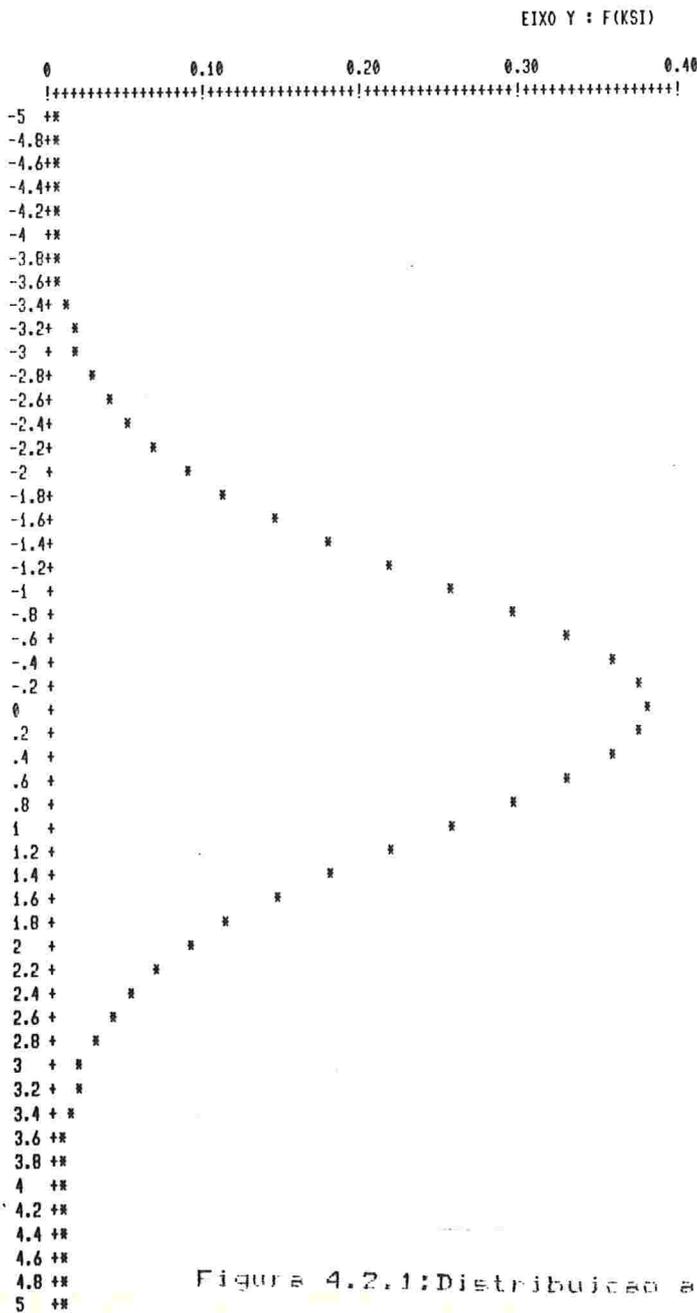


Figura 4.2.1: Distribuição a priori de ξ

EIXO Y : F(KSI)

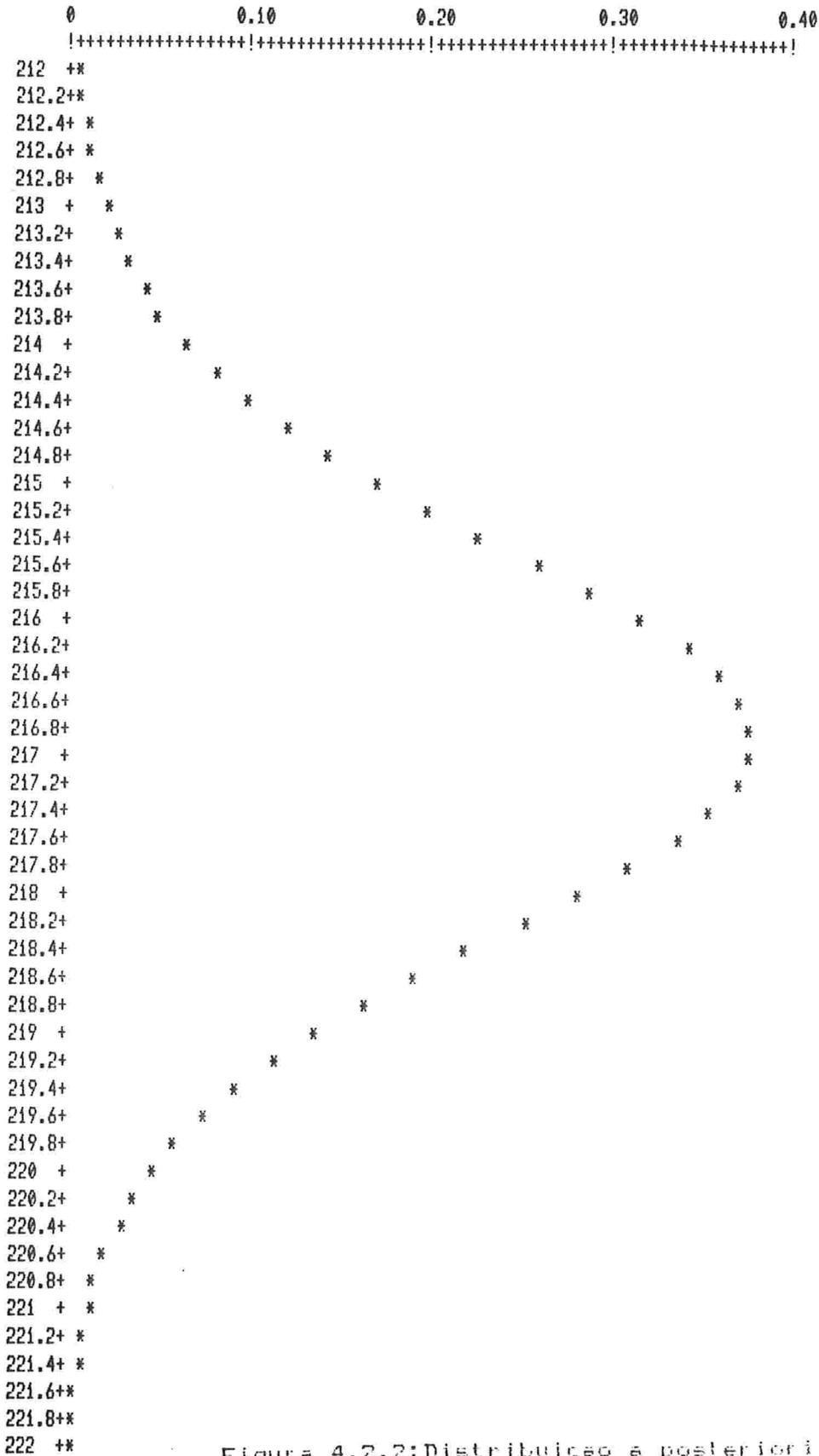


Figura 4.2.2: Distribuição a posteriori de ξ

EIXO X : KSI

4.2.2. DISTRIBUIÇÃO A PRIORI PARA OS PARÂMETROS η , α , β

O método bayesiano de Hunter e Lamboy (1981) para estimação de ξ parte da idéia de que ξ é uma função dos parâmetros (α, β, η) onde η é o valor esperado de Y_0 , isto é:

$$\xi = \frac{\eta - \alpha}{\beta}$$

e que a distribuição a posteriori destes parâmetros é proporcional ao produto de sua densidade a priori pela função de verossimilhança, isto é, $\pi(\eta, \alpha, \beta / \text{dados})$ é proporcional a

$$\pi(\alpha, \beta, \sigma^2, \eta) L(\alpha, \beta, \eta, \sigma^2 / \text{dados}) \quad (4.2.5)$$

Então, por transformação de variáveis, podemos obter a distribuição a posteriori de ξ , $\pi(\xi / \text{dados})$. Deste modo, encontramos a distribuição a posteriori de ξ baseada nas informações a priori dos parâmetros α , β , η e σ^2 relacionadas com o "futuro" experimento.

A função de verossimilhança acima $L(\alpha, \beta, \eta, \sigma^2 / \text{dados})$ é proporcional a

$$L(\alpha, \beta, \sigma^2 / \text{dados 1}) L(\eta, \sigma^2 / \text{dados 2})$$

que é proporcional a

$$L(\alpha, \beta, \sigma^2 / \text{dados 1}) \frac{1}{\sigma^k} \exp \left\{ - \frac{(k-1)v^2 + k(\bar{y}_0 - \eta)^2}{2\sigma^2} \right\},$$

onde $v^2 = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k (y_{0i} - \bar{y}_0)^2$ e

$$\bar{y}_0 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_{0i}$$

de modo que a estatística $(y_1, y_2, \dots, y_n, v^2, \bar{y}_0)$ é suficien-

te para $(\alpha, \beta, \sigma^2, \eta)$.

Portanto,

$$\pi(\alpha, \beta, \eta / \text{dados}) = \pi(\alpha, \beta, \eta / y_1, \dots, y_n, v^2, \bar{y}_0)$$

e pelo Teorema de Bayes, $\pi(\alpha, \beta, \eta / y_1, \dots, y_n, v^2, \bar{y}_0)$ é proporcional a

$$\pi(\alpha, \beta, \eta / y_1, \dots, y_n) \pi(\bar{y}_0, v^2 / \alpha, \beta, \eta, y_1, \dots, y_n).$$

Assumindo independência a priori entre (α, β) e η e como \bar{y}_0 e v^2 não dependem de α, β temos que

$$\pi(\alpha, \beta, \eta / \text{dados}) \propto \pi(\alpha, \beta / y_1, \dots, y_n) \pi(\eta) \pi(\bar{y}_0, v^2 / \eta, y_1, \dots, y_n)$$

$$\propto \pi(\alpha, \beta / \text{dados } 1) \pi(\eta) \pi(\bar{y}_0 / \eta, v^2, y_1, \dots, y_n) \pi(v^2 / \eta, y_1, \dots, y_n)$$

e como $\pi(v^2 / \eta, y_1, \dots, y_n)$ independe de η , obtemos

$$\pi(\alpha, \beta, \eta / \text{dados}) \propto \pi(\eta) \pi(\bar{y}_0 / \eta, v^2, y_1, \dots, y_n) \pi(\alpha, \beta / \text{dados } 1) \quad (4.2.6)$$

onde o símbolo \propto entre as densidades significa "proporcional a".

No modelo de calibração com as suposições usuais, Hunter e Lamboy assumem, além da independência a priori entre (α, β) e η , distribuição a priori conjunta imprópria para $(\alpha, \beta, \eta, \sigma^2)$ proporcional a $1/\sigma^2$. Isto implica em que a distribuição a posteriori $\pi(\alpha, \beta, \eta / \text{dados})$ seja a distribuição t-multivariada com $(n+k-3)$ graus de liberdade:

$$\pi(\alpha, \beta, \eta / \text{dados}) = \frac{\Gamma\left(\frac{n+k}{2}\right)}{(n+k-3)^{3/2} \Gamma\left(\frac{n+k-3}{2}\right) |S|^{1/2}} \left[1 + \frac{S^{-1} \begin{bmatrix} \alpha-a \\ \beta-b \\ \eta-\bar{y}_0 \end{bmatrix}}{(n+k-3) \begin{bmatrix} \alpha-a \\ \beta-b \\ \eta-\bar{y}_0 \end{bmatrix}} \right]^{-\left(\frac{n+k}{2}\right)},$$

(4.2.7)

onde

$$\tilde{S} = \hat{\sigma}_c^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{S_{XX}} & -\frac{\bar{x}}{S_{XX}} & 0 \\ -\frac{\bar{x}}{S_{XX}} & \frac{1}{S_{XX}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{k} \end{bmatrix},$$

sendo a , b os estimadores de mínimos quadrados de α , β (2.B) e $\hat{\sigma}_c^2$ o estimador corrigido com $n+k-3$ graus de liberdade do parâmetro σ^2 (ver Teorema 2.1).

A construção e uma análise mais profunda da distribuição a posteriori de ξ são feitas em Hunter e Lamboy (1981a). Os dois casos: $n+k-3$ sendo par e sendo ímpar são tratados separadamente.

Se $n+k-3$ é par, a função distribuição a posteriori de ξ é:

$$\begin{aligned} \pi(\xi/\text{dados}) &= \frac{W_1}{(n-1)W_2W_4^{n-1}} + \\ &+ \frac{W_1W_3^2}{(2n-1)W_2W_4^{n-1}} \sum_{\omega=0}^{n-2} \frac{(2W_2W_4)^\omega (2n-1)\dots(2n-2\omega-1)}{(n-1)\dots(n-\omega-1)\Delta^{\omega+1}} + \\ &+ 2^{n+1} \frac{(2n-3)!! W_1W_3W_2^{n-2}}{(n-1)!\Delta^{n-1/2}} \arctg\left(\frac{W_3}{\Delta^{1/2}}\right) \end{aligned}$$

(4.2.8a)

e se $n+k-3$ é ímpar,

$$\pi(\xi/\text{dados}) = \frac{2W_1}{(2n-1)W_2W_4^{(n-1)/2}} +$$

$$+ \frac{2W_1W_3^2}{(2n-1)\Delta W_2W_4^{(2n-1)/2}} \left\{ 1 + \sum_{\omega=1}^{n-1} \frac{(8W_4W_2)^\omega (n-1)\dots(n-\omega)}{\Delta^\omega (2n-3)\dots(2n-2k-1)} \right\}$$

(4.2.8b)

onde $W_1 = \Gamma\left(\frac{n+k-1}{2}\right) |\underline{v}^*|^{-1/2} / \pi \Gamma\left(\frac{n+k-3}{2}\right)$,

$$W_2 = v^{11}\xi^2 + 2v^{12}\xi + v^{22},$$

$$W_3 = -2v^{11}a\xi - 2v^{12}b\xi - 2v^{12}a - 2v^{22}b,$$

$$W_4 = 1 + v^{11}a^2 + 2v^{12}ab + v^{22}b^2,$$

$$\Delta = 4W_1W_4 - W_3^2 \quad e$$

$$(2n-3)!! = (2n-3)(2n-5)\dots 1$$

sendo $\{v^{ij}\} = (\underline{v}^*)^{-1}$

com

$$\underline{v}^* = \hat{\sigma}_c^2 (n+k-3) \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{S_{XX}} + \frac{1}{k} & \frac{\bar{x}}{S_{XX}} \\ \frac{\bar{x}}{S_{XX}} & \frac{1}{S_{XX}} \end{bmatrix}$$

$$e \quad s_{XX} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2.$$

A densidade acima é a densidade a posteriori da razão de duas variáveis aleatórias com distribuição t-bivariada. Uma boa aproximação para esta função é a distribuição t-student com $n+k-3$ graus de liberdade, centrada em $(\bar{Y}_0 - a)/b$, o estimador clássico e com fator de escala $(v_{11}v_{22} - v_{12}^2)^{1/2} / ((v_{22})^{1/2} b)$, sendo $\{v_{ij}\} = \tilde{v}^*$ definida em (4.2.8).

A densidade a posteriori exata de ξ (4.2.8) tem variância infinita, mas este fato não incomoda aos Bayesianos para construir suas inferências, pois podemos sempre fazer o seu gráfico e, a partir dele, tirar todas as conclusões de interesse. Como, por exemplo, encontrar a sua moda que é o estimador pontual para ξ se a função for simétrica; selecionar intervalos de densidade a posteriori de maior área (highest posterior density (HPD) intervals). O coeficiente de confiança $(1-\alpha)$ destes intervalos tem a característica de medir a confiança do intervalo conter ξ para a amostra efetivamente observada. Do ponto de vista bayesiano, teoricamente, se um modelo é adequado, todas as informações relevantes estão contidas na sua distribuição a posteriori apropriada, quer sua variância seja ou não finita.

O trabalho de Hunter e Lamboy (19⁸¹~~74~~a) também analisa o caso, menos prático, supondo σ^2 conhecido e os parâmetros (α, β, η) com distribuição a priori uniforme. A densidade a posteriori para ξ , neste caso, é a razão de variáveis normais bivariadas, que pode ser aproximada pela distribuição normal com média $(\bar{Y} - a)/b$, estimador clássico de ξ , e variância $(v_{11}v_{22} - v_{12}^2) / v_{22} b^2$, sendo $\{v_{ij}\} = \tilde{v}^*$ definido em (4.2.8).

EXEMPLO 4.3 (continuação do Exemplo 1.1)

Supondo, no problema da calibração do termopar, que o experimntador assumiu a distribuição a priori conjunta para os parâmetros $(\alpha, \beta, \eta, \sigma^2)$ proporcional a $1/\sigma^2$, pelo apresentado nesta seção temos que a distribuição a posteriori do parâmetro ξ será a razão de duas variáveis aleatórias com distribuição t-student que pode ser aproximada por uma distribuição t-student.

Se o experimntador quer estimar a temperatura real correspondente à leitura de 200°C no termopar, temos que a distribuição a posteriori será aproximadamente a t-student com 14 graus de liberdade centrada em $x_c = 216,857^\circ\text{C}$ - estimador clássico determinado no Exemplo 2.1 - e com fator de escala 0,6208, ou seja,

$$\pi(\xi) = 0,39189 \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{14} \left(\frac{\xi - 216,857}{0,6208} \right)^2} \right)^{7,5}$$

representada na Figura 4.2.3, tendo como ponto de máximo $x_c = 216,857^\circ\text{C}$.

O intervalo a posteriori, com 95% de confiança para a temperatura real correspondente à observação de 200°C no termopar é

$$x_{\text{sup}} = 216,857 + 1,331 = 218,188^\circ\text{C}$$

e

$$x_{\text{inf}} = 216,857 - 1,331 = 215,525^\circ\text{C}$$

com comprimento de $2,662^\circ\text{C}$.

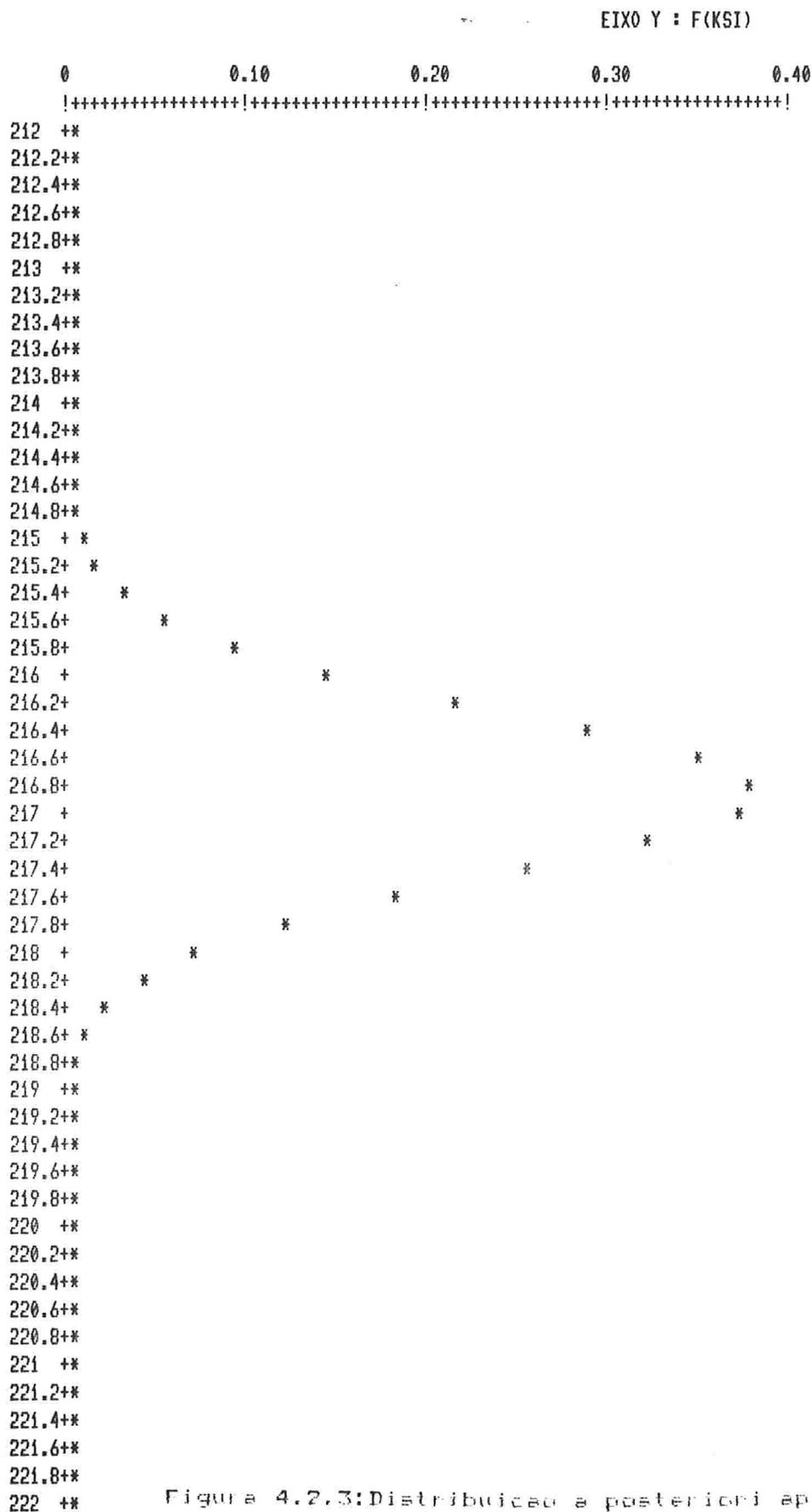


Figura 4.2.3: Distribuição a posteriori aproximada de ξ

4.2.3. COMENTÁRIOS E COMPARAÇÕES ENTRE AS DISTRIBUIÇÕES A POSTERIORI DE ξ

Nesta seção mostraremos os aspectos mais relevantes da discussão da polêmica sobre qual das duas correntes apresentadas nas seções anteriores - considerando a distribuição a priori de ξ ou a priori de $(\alpha, \beta, \eta, \sigma^2)$ - deve ser utilizada para construir a distribuição a posteriori de ξ .

Primeiramente, como mostra Hill (1981), temos que o estimador proposto por Hunter e Lamboy (1981) é um caso particular do encontrado por Hoadley (1970). A forma geral da densidade a priori de Hoadley é $\pi(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi)$ proporcional a

$$\pi(\alpha, \beta, \sigma^2) \pi(\xi) ,$$

obtendo seus resultados para a distribuição imprópria de $(\alpha, \beta, \sigma^2)$, isto é, $\pi(\alpha, \beta, \sigma^2)$ proporcional a $\frac{1}{\sigma^2}$.

Por outro lado, Hunter e Lamboy, depois de observar os dados da primeira etapa consideram

$$\pi(\alpha, \beta, \sigma^2, \eta/\text{dados } 1) \text{ proporcional a } \pi(\alpha, \beta, \sigma^2/\text{dados } 1),$$

sendo esta a distribuição a posteriori dos parâmetros da regressão proveniente da distribuição a priori imprópria proporcional a $1/\sigma^2$.

Como $\eta = \alpha + \beta\xi$, por transformação de variáveis, temos

$$\pi(\alpha, \beta, \sigma^2, \eta/\text{dados } 1) \text{ proporcional a } |\beta| \pi(\alpha, \beta, \sigma^2/\text{dados } 1)$$

que é idêntica à distribuição a posteriori de Hoadley dado as

observações da primeira etapa e baseada na densidade a priori

$$\pi(\alpha, \beta, \sigma^2, \xi) \text{ proporcional a } \frac{|\beta|}{\sigma^2} \quad (4.2.9)$$

Como a função de verossimilhança para obtermos a distribuição a posteriori em ambos os casos é idêntica, a distribuição a posteriori resultante, nos dois procedimentos, será também idêntica.

Salientamos que a distribuição a posteriori de ξ encontrada considerando a distribuição a priori de (η, α, β) é matematicamente idêntica à distribuição estrutural marginal (4.1.4). Esta conclusão é esperada pois enquanto um modelo considera a distribuição a priori imprópria dos parâmetros proporcional a $1/\sigma^2$ o outro define esta mesma medida como sendo a medida invariante conveniente. Como a função de verossimilhança nos dois casos é a mesma, no caso especial suposto por Kallotay (isto é, $\sum_{i=1}^n x_i = 0$ e $\varepsilon_i^* \sim N(0, 1)$) a equação (4.2.8) se reduz ao resultado (4.1.4) apesar de diferirem em fundamentos.

A preferência de Hunter e Lamboy por uma priori imprópria para os parâmetros $(\alpha, \beta, \sigma^2, \eta)$ é criticada por vários estatísticos. Estas críticas são baseadas principalmente na idéia de que o poder dos métodos bayesianos está ligado com nossa capacidade de incorporar conhecimentos a priori no modelo paramétrico. Sendo, portanto, necessário famílias de densidades a priori flexíveis o suficiente para poder representar esta nossa subjetividade, o que não ocorre nas densidades impróprias. Lawless (1981) chega a afirmar que o uso exclusivo de distribuições a priori impróprias é "somente vestir procedimentos frequentistas clássicos com roupas bayesianas". Surge, também, a dúvida de co-

mo incorporar neste modelo informações a priori sobre o parâmetro ξ . Enquanto que, no trabalho de Hoadley, o uso da distribuição a priori não informativa é restrito aos parâmetros da regressão e a priori para ξ , ao menos para o caso da função de perda quadrática, é obrigatoriamente uma distribuição própria.

Outro ponto de controvérsia no método de Hunter e Lamboy é a suposição de independência a priori de (α, β) e η . Parecendo mais natural e realista na prática, para a maioria dos casos, principalmente, quando temos informações não desprezíveis sobre ξ (como, por exemplo, assumir valores somente em um determinado intervalo), que seja admitido (α, β) e ξ não relacionados, como ocorre no modelo proposto por Hoadley, em vez de (α, β) e $\eta = \alpha + \beta\xi$ não relacionados.

Um comentário interessante foi feito por Hill (1981) sobre a distribuição a priori de ξ definida por Hoadley para justificar teoricamente o estimador inverso. Suponhamos que os valores x_i , $i = 1, \dots, n$, usados para estimar a linha de calibração, sejam vistos como uma amostra de uma população normal. Neste caso, a distribuição a posteriori de ξ , dado as observações da primeira fase, é uma distribuição t-student com $(n-1)$ graus de liberdade, centrada em \bar{x} e com fator de escala $\left[\frac{1}{n-1} S_{XX} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \right]^{1/2}$.

Considerando, como Hoadley, os dados padronizados obtemos a distribuição t-student com $(n-1)$ graus de liberdade, centrada em zero e com fator de escala $\left(\frac{n+1}{n-1} \right)^{1/2}$. Apesar de uma pequena diferença nos graus de liberdade e no fator de escala, que não tem consequências quando n é suficientemente grande, esta distribuição a posteriori de ξ é equivalente a priori $\pi(\xi)$ consi-

derada por Hoadley para obter o estimador inverso quando $k = 1$. Esta $\pi(\xi/\text{dados } 1)$ pode ser vista como uma distribuição a priori para a segunda etapa de observações (dados 2). Notemos que esta análise é válida quando os x_i usados na primeira fase de observações (dados 1) formam uma amostra aleatória de alguma distribuição, implicando que (x_i, Y_i) , $i = 1, \dots, n$ tenha uma distribuição conjunta, contrariando a nossa suposição básica que os valores x_i são planejados e prefixados, mostrando, deste modo, que esta é uma situação em que a distribuição a priori proposta por Hoadley é apropriada.

A definição da família gama como densidade a priori para β , isto é, $\pi(\beta)$ proporcional a

$$\beta^{\lambda_1 - 1} e^{-\lambda_2 \beta} \quad \text{com } \beta > 0,$$

é sugerida pelo fato que a magnitude do parâmetro β depende da unidade de medida utilizada e, portanto, em experimentos de calibração elaborados séria e cuidadosamente, este valor não deve estar próximo de zero, sendo deste modo indesejáveis valores muito pequenos de β , o que é exatamente uma característica da distribuição gama. Esta densidade, para $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 0$, corresponde à densidade implícita proposta por Hunter e Lamboy (usando $|\beta|$ no lugar da condição $\beta > 0$) em (4.2.9). A respeito desta distribuição a priori Hill (1981) comenta: "Eu acredito que o uso da distribuição gama a priori para β , com λ_1 e λ_2 positivos é uma cuidadosa escolha para refletir o seu conhecimento a priori, produzindo uma análise mais satisfatória, incluindo um estimador consistente para ξ com erro quadrático médio finito".

4.3. ANÁLISE DE VEROSSIMILHANÇA

Baseados na idéia de que a função de verossimilhança resume toda a informação numérica que os dados contêm sobre o parâmetro, muitos estatísticos como Fisher, enfatizam, em seus trabalhos, a necessidade de examinar não só o estimador pontual (estimador de máxima verossimilhança) e o seu desvio padrão, como também toda a forma da sua curva. Com este pensamento Minder e Whitney (1975) obtêm, em seu trabalho, a função de verossimilhança marginal de ξ a partir da função de verossimilhança (2.1.4):

$$VM(\xi/x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n, y_{01}, y_{02}, \dots, y_{0k}) = c \hat{\sigma}^{*(n+k-3)} \quad (4.3.1)$$

sendo c a constante de proporcionalidade e $\hat{\sigma}^*$ uma função de ξ , que pode ser obtida, por exemplo, através do método da função de verossimilhança maximizada (Kalbfleisch e Sprott (1970)).

A análise de verossimilhança é feita geralmente sobre a função de verossimilhança relativa, que é a razão entre a função de verossimilhança e seu ponto de máximo, assumindo, portanto, o valor 1 no ponto x_c (ponto de máximo) e sendo limitada inferiormente por zero. Os valores de ξ com função de verossimilhança relativa pequena, como, por exemplo, 0,05 ou menor, podem ser considerados como pouco cotados como candidatos a estimadores pontuais de ξ . Os aspectos mais relevantes para análise desta função são: (i) uma coleção de $(1-\alpha)100\%$ de pontos (conjunto de verossimilhança, ou seja, o conjunto dos pontos onde a função de verossimilhança relativa assume valores maiores que $(1-\alpha)$), usualmente de 100% (o estimador de máxima veros-

similhança), de 50%, 10% e 5%; (ii) seu ponto de mínimo; (iii) sua forma. O resultado será uma impressão realista, possivelmente um gráfico, da forma de sua curva. Se a função de verossimilhança relativa se aproxima de uma distribuição normal apenas dois conjuntos de pontos são suficientes para caracterizá-la: 100% ou o ponto de máximo e 60,6%, isto é, duas vezes o desvio padrão.

Supondo que $\bar{x} = 0$, o que não implica em nenhuma perda de generalidade, temos que a função de verossimilhança marginal relativa para ξ é dada por

$$\begin{aligned} \text{VMR}(\xi/x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n, y_{01}, y_{02}, \dots, y_{0k}) = \\ = \left\{ \frac{q^2 \left[\xi^2 + \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \right) \sum_{i=1}^n x_i^2 \right]}{\xi^2 - 2r(1-q^2)\xi + r^2(1-q^2) + \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \right) q^2 \sum_{i=1}^n x_i} \right\}^{\frac{n+k-3}{2}} \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

sendo caracterizada por duas estatísticas

$$q^2 = 1 - \frac{\left(\sum_{i=1}^n x_i (Y_i - \bar{Y}) \right)^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2 \left(\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 + \sum_{i=1}^k (Y_{0i} - \bar{Y}_0)^2 \right)}$$

e

$$r = (\bar{Y}_0 - \bar{Y}) \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{\sum_{i=1}^n x_i (Y_i - \bar{Y})} = \frac{\bar{Y}_0 - \bar{Y}}{b} = x_c \quad \text{por (2.1.8),}$$

pois, por hipótese, $\bar{x} = 0$, onde x_c e b são os estimadores de má-

xima verossimilhança dados em (2.1.6) dos parâmetros ξ e β respectivamente.

Observamos que (4.3.2) é uma potência da razão de duas funções quadráticas em ξ , tendo, portanto, dois pontos críticos, o de máximo, evidentemente, o ponto x_c e o de mínimo em:

$$- \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \right) \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{x_c},$$

que não tem interpretação estatística. A existência de um ponto de mínimo mostra que a $VMR(\xi)$ pode ser pouco simétrica. Como $q < 1$, com probabilidade 1, se $\beta \neq 0$, a função de VMR tende a zero quando n aumenta qualquer que seja q , entretanto, q controla a velocidade desta convergência. O fato da estatística r ser o ponto de máximo implica que ela está relacionada com a localização da função de verossimilhança marginal relativa, enquanto que a estatística q está relacionada com a informação contida na $VMR(\xi)$ pois de (4.3.2) temos que,

$$\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} VMR(\xi) = q^{n+k-3}, \quad (4.3.3)$$

que é menor que 1 com probabilidade 1, se $\beta \neq 0$. Assim, se ξ tende ao infinito a sua função de verossimilhança marginal relativa não é necessariamente pequena. Portanto, se q não é pequeno (próximo de 1) e $(n+k)$ não é grande, o valor da $VMR(+\infty)$ não será muito pequeno, de modo que a função terá uma "cauda longa" e não será informativa sobre o verdadeiro valor de ξ .

Na prática, sua aproximação mais interessante é obtida através da expansão de Taylor de segunda ordem do logaritmo de (4.3.2) em torno do ponto x_c que resulta em

$$\exp \left\{ - \frac{(\xi - x_c)^2}{2\omega(x_c)} \right\}, \quad (4.3.4)$$

com

$$\begin{aligned} \omega(x_c) &= \frac{(n+k)^2}{(n+k-3)n} \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{kb^2} \left[1 + r^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \right) \right] = \\ &= \frac{(n+k)}{(n+k-3)} \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 q^2}{nk(1-q^2)} \left[1 + r^2 \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{n} \right) \right], \end{aligned}$$

sendo b estimador de máxima verossimilhança de β e q definido em (4.3.2), ou seja, a distribuição normal com média x_c e variância $\omega(x_c)$, com toda a informação contida nos dados resumida apenas no ponto x_c (relativo à locação) e na medida de dispersão $\omega(x_c)^{1/2}$ (informando sua extensão).

Afim de determinar quão pequeno deve ser q^2 para que a verossimilhança seja informativa, de encontrar o quanto uma aproximação do tipo (4.3.4) é razoável e para investigar o comportamento geral da função (4.3.2), Minder e Whitney (1975) fizeram algumas simulações com diferentes valores para os parâmetros α , β e σ^2 . Concluíram que o plano experimental e os parâmetros devem ser tais que $1-\rho$ (sendo ρ o coeficiente de correlação entre x e Y) tenha pequeno valor, ou seja, que as variáveis Y e x sejam altamente correlacionadas e que a estatística q^2 também seja pequena. Nos casos por eles estudados, temos que, para amostras de tamanho entre 5 e 10, com $k=1$, a estatística q^2 deve ser menor que 10^{-6} , mas para amostras de tamanho maior, valores um tanto maiores de q^2 são tolerados.

De qualquer modo, a análise da função de verossimilhança indica qual estimador pontual não é razoável, sendo este "indicador fácil" que a torna um instrumento útil.

O artigo de El-Shaarawi (1977) apresenta a função de verossimilhança marginal para o caso em que a relação entre as variáveis Y e x é expressa por uma função polinomial do p -ésimo grau.

EXEMPLO 4.4 (continuação do Exemplo 1.1)

OBSERVAÇÃO: nesta seção consideramos $\sum_{i=1}^n x_i = 0$, e, portanto, os abaixo são tais que satisfazem esta condição, mas, entre parênteses, mostrar-los-emos novamente, porém, na escala utilizada no restante do trabalho.

Tomemos, como exemplo, os dados da calibração do termopar, observando, na segunda etapa do procedimento, o valor 200°C . Como vimos, no Exemplo 2.1, a estimativa do verdadeiro valor da temperatura correspondente a esta temperatura observada, pelo método de máxima verossimilhança, é $x_c = -33,144$ ($216,856^{\circ}\text{C}$). A sua função de verossimilhança marginal relativa, por (4.3.2), é dada por:

$$\text{VMR}(\xi) = \left(\frac{6,664 \times 10^{-4} \xi^2 + 96,292}{\xi^2 + 66,244\xi + 1194,105} \right)^7$$

As principais características desta função de verossimilhança marginal relativa são: (i) o ponto de máximo em $-33,144$ ($216,856^{\circ}\text{C}$), quando a função atinge o valor 1,0; (ii) o ponto de mínimo em $4.359,723$ ($4.609,723^{\circ}\text{C}$), quando a função assume o valor $5,53 \times 10^{-23}$; (iii) a função assintoticamente tende a $5,84 \times 10^{-23}$, ou seja, $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \text{VMR}(\xi) = 5,84 \times 10^{-23}$; (iv) o con-

junto de verossimilhança da função de 5% que é, aproximadamente, o intervalo entre os pontos $(-40,3; -26,0)$ ($(209,7^{\circ}\text{C}; 224,0^{\circ}\text{C})$), que pode ser interpretado como 95% da informação da função contida entre estes limites, o de 10% é, aproximadamente, o intervalo $(-39,3; -27,1)$ ($(210,7^{\circ}\text{C}; 222,9^{\circ}\text{C})$) e o de 50%, aproximadamente, $(-36,3; -30,0)$ ($(213,7^{\circ}\text{C}; 220,0^{\circ}\text{C})$), e (v) a forma da função representada na Figura 4.3.1.

Analisando estes resultados, notamos que os intervalos de verossimilhança de 5% e 10% são pequenos, 4,7% e 2,0%, respectivamente, em relação ao comprimento do intervalo de calibração $(-150; 150)$ ($(100^{\circ}\text{C}; 400^{\circ}\text{C})$), mostrando uma concentração da função e, portanto, das informações contidas na função sobre o verdadeiro valor de ξ , em torno do ponto x_c . Temos, também, que $\text{VMR}(+\infty)$ é muito pequeno, de modo que a função tem "cauda" extremamente "estreita", implicando numa "perda" muito pequena de informação nas "caudas" da função. Além disto, verificamos, pelo seu gráfico, que a função tem um comportamento extremamente regular.

Podemos concluir, através da função de verossimilhança marginal relativa, que não existe nenhum empecilho para o uso do estimador de máxima verossimilhança, $x_c = -33,144$ ($216,856^{\circ}\text{C}$), como estimador do parâmetro ξ correspondente à temperatura de 200°C observada no termopar.

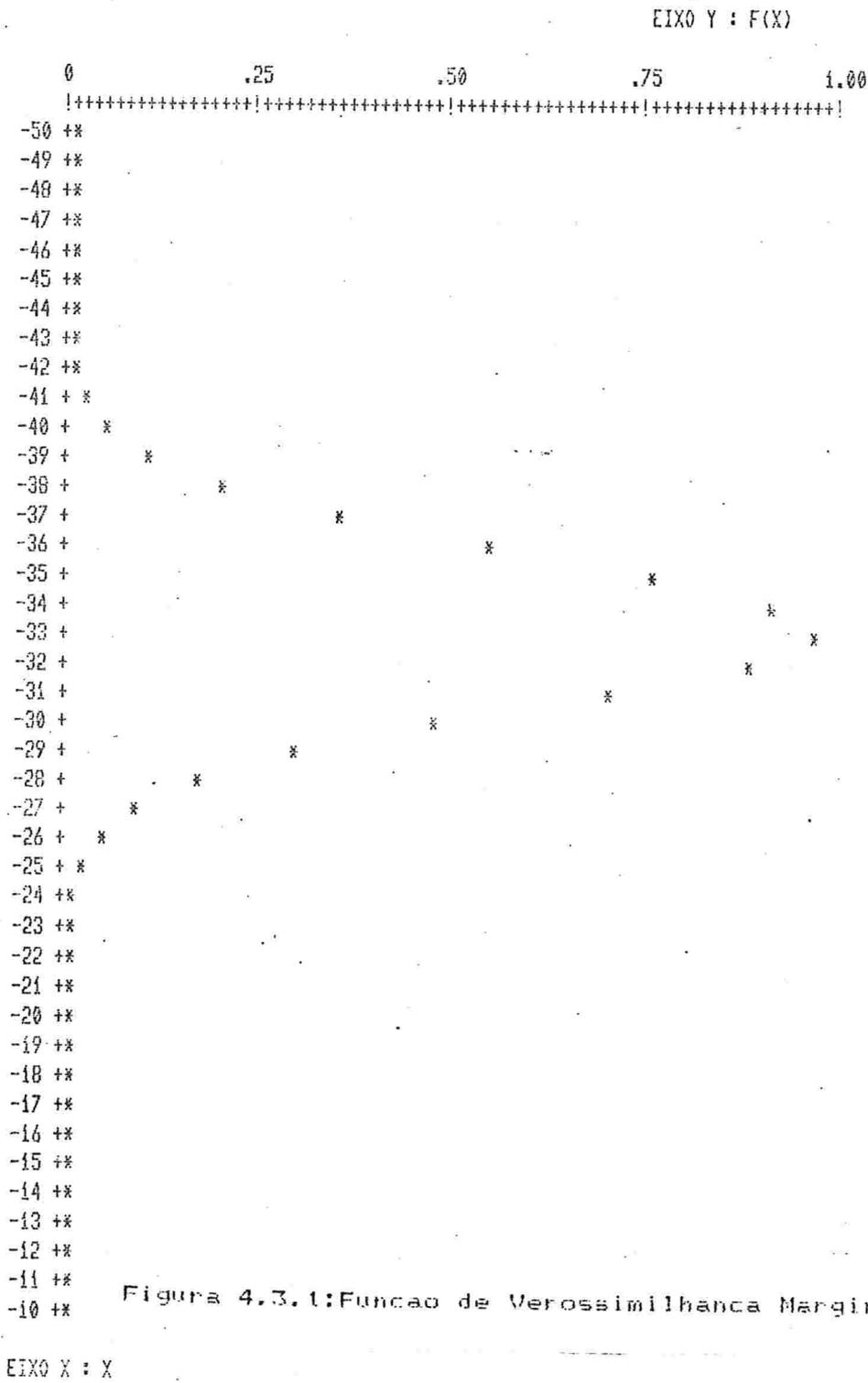


Figura 4.3.1: Funcao de Verossimilhanca Marginal Relativa de ξ

4.4. ESTIMADOR SEQUENCIAL

Um método de estimação sequencial de ξ foi proposto por Perng e Tong (1974) baseado nas regras de amostragem sequencial desenvolvidas por Chow e Robbins (1965) e por Gleser (1965) para regressão linear simples. Consiste, em linhas gerais, de um processo de amostragem sequencial em duas etapas. A primeira, com uma regra de parada para a amostragem da sequência $\{Y_i\}$, $i = 1, 2, \dots, n, \dots$, com o objetivo de estimar os parâmetros α e β da linha de calibração, e uma segunda etapa, se β é significativamente diferente de zero, com uma regra de parada para as sequências $\{Y_{0i}\}$, $i = 1, 2, \dots, k, \dots$, correspondentes ao parâmetro ξ . No final do processo, obtemos um intervalo para ξ com amplitude, $2d_2$, prefixada e com o limite da probabilidade de "decisão correta" igual a $(1-\alpha)$ fixado. Salientamos que, nos outros métodos de estimação, consideramos n o tamanho da amostra do par (x_i, Y_i) e k o tamanho da amostra de Y_{0i} como sendo fixos e então o comprimento do intervalo e a precisão dos estimadores como sendo uma consequência dos erros aleatórios. Neste caso, o que ocorre é justamente o oposto, ou seja, fixamos a amplitude do intervalo em $2d_2$ e a "precisão" do estimador de β em d_1 e amostramos a sequência $\{Y_i\}$ e $\{Y_{0i}\}$ até que as duas condições estejam satisfeitas. Portanto os tamanhos n e k das amostras tornam-se variáveis aleatórias (denotadas por N e K respectivamente).

Tomemos o modelo (2.1.3) e fixemos as constantes $d_1 > 0$, $d_2 > 0$ e $(1-\alpha) \in (0, 1)$. O procedimento da amostragem sequencial consiste de duas fases.

Na primeira etapa, observamos a sequência $\{Y_i\}$ para os

$\{x_i\}$ fixados correspondentes. Começamos observando Y_1, \dots, Y_{n_0} com $n_0 \geq 2$ fixo, e então amostramos sequencialmente, isto é, um a um os Y_i , $i = n_0 + 1, \dots, n, \dots$ parando em N , o primeiro inteiro $n \geq n_0$ tal que:

$$\left(\hat{\sigma}_1^2(n) + \frac{1}{n} \right) \leq \frac{d_1^2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}(n))^2}{Z_{\alpha/2}^2} \quad (4.4.1)$$

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

e $\hat{\sigma}_1^2(n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - a(n) - b(n)x_i)^2$,

sendo $a(n)$ e $b(n)$ Os estimadores de mínimos quadrados de α e β (2.B) baseados nas n observações (x_i, Y_i) , d_1 uma constante fixa e $Z_{\alpha/2}$ o $(1-\alpha/2)$ -ésimo quartil da distribuição normal padronizada.

Se $|b(N)| < d_1$, concluímos que o parâmetro β não é significativamente diferente de zero e que o modelo não é conveniente para estimar ξ .

Caso contrário, se $|b(N)| > d_1$, prosseguimos para a segunda etapa. Observamos inicialmente $Y_{01}, Y_{02}, \dots, Y_{0k_0}$, com $k_0 \geq 2$ fixado, e, em seguida, os Y_{0i} , $i = k_0 + 1, \dots, k, \dots$, sequencialmente até K , o primeiro inteiro $k \geq k_0$ tal que:

$$\left(\hat{\sigma}_2^2(k) + \frac{1}{k} \right) \leq \frac{d_2^2 b(N)^2 k}{Z_{\alpha/2}^2} \quad (4.4.2)$$

onde $b(N)$ é o estimador de mínimos quadrados baseados nas N observações (x_i, Y_i) iniciais, $Z_{\alpha/2}$ como foi definido em (4.4.1), d_2 uma constante prefixada correspondente à metade da amplitude do intervalo de ξ e

$$\hat{\sigma}_2^2(k) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (Y_{0i} - \bar{Y}_0(k))^2$$

$$\text{sendo } \bar{Y}_0(k) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_{0i}$$

Obtemos, desta forma, para $K=k$ um intervalo para ξ ,

$$(\xi_s - d_2 ; \xi_s + d_2) \quad (4.4.3)$$

de amplitude $2d_2$ onde

$$\xi_s = \frac{\bar{Y}_0(K) - a(N)}{b(N)}$$

e com probabilidade de decisão correta aproximadamente $(1-\alpha)$, pois Perng e Tong (1974) demonstram que se $\beta = 0$, então

$$\lim_{d_1 \rightarrow 0} P(\text{decisão correta}) = (1-\alpha)$$

e se $\beta \neq 0$ e $\{Y_{0i}\}$ é uma sequência de variáveis aleatórias contínuas, então

$$\lim_{d_2 \rightarrow 0} \lim_{d_1 \rightarrow 0} P(\text{decisão correta}) = (1-\alpha)$$

Por decisão correta, entendemos não seguir para o segundo estágio se $\beta = 0$ e prosseguir para o segundo estágio se $\beta \neq 0$ e ξ pertencer ao intervalo (4.4.3).

Temos, também, que os estimadores $a(N)$ e $b(N)$, com a regra de parada (4.4.1), são estimadores assintoticamente não viesados de α e β para $d_1 \rightarrow 0$. Outro resultado é, se a variância dos erros for finita ($\sigma^2 < \infty$), que

$$P(N < \infty) = P(K < \infty) = 1 ,$$

garantindo deste modo o fim do processo de amostragem e a existência, se $\beta \neq 0$ (estatisticamente), de um intervalo para ξ .

Observamos que, do modo que o método sequencial é construído, ou seja, estimando σ^2 para cada uma das fases independentemente, a variância dos erros ϵ_i não precisa necessariamente ser a mesma nas duas fases do processo. Desta forma, podemos obter intervalos para ξ em problemas práticos onde a suposição de σ^2 constante nas duas etapas é violada, como ocorre especialmente quando um instrumento é calibrado em condições padronizadas de laboratório e posteriormente é utilizado em um ambiente não controlado.

EXEMPLO 4.5 (continuação do Exemplo 1.1)

Baseado no Exemplo 1.1, podemos simular uma amostragem sequencial para obter um intervalo do valor correspondente às "leituras" de Y_0 . Fixemos a "precisão" de β , d_1 , em 0,01, a amplitude do intervalo, $2d_2$, em 8°C e a probabilidade de "decisão correta" em 0,95.

Para a estimação da linha de calibração, primeira etapa do processo, tomemos inicialmente $n_0 = 4$ observações, conforme Tabela 4.1-A. Obtemos $\hat{\sigma}_1^2(4) + 0,25 = 1,298$ que é maior que $(0,01)^2(46.800)/(1,96)^2 = 1,218$, de modo que, pelo critério de

TABELA 4.1: AMOSTRAGEM SEQUÊNCIA - 1.^a ETAPAA. $n_0 = 4$

OBS.	TEMPERATURA REAL	TEMPERATURA OBSERVADA	TEMPERATURA ESTIMADA	ERRO
i	x_i	y_i	\hat{y}_i	e_i
1	100	88,8	88,68	0,12
2	160	146,2	145,58	0,62
3	280	257,7	259,40	-1,70
4	380	355,2	354,24	0,96

$$a(4) = -6,166$$

$$b(4) = 0,948$$

$$\hat{\sigma}_1^2(4) = 1,048$$

B. $n = 5$

OBS.	TEMPERATURA REAL	TEMPERATURA OBSERVADA	TEMPERATURA ESTIMADA	ERRO
i	x_i	y_i	\hat{y}_i	e_i
1	100	88,8	88,68	0,12
2	160	146,2	145,65	0,55
3	280	257,7	259,58	-1,88
4	320	298,1	297,56	0,54
5	380	355,2	357,53	0,67

$$a(5) = -6,270$$

$$b(5) = 0,949$$

$$\hat{\sigma}_1^2(5) = 0,921$$

parada (4.4.1) da amostragem sequencial, temos que adicionar mais uma observação de Y_i na amostra. Na Tabela 4.1.B encontramos os resultados, para a amostra de tamanho 5, a condição de parada (4.4.1) de amostragem está satisfeita pois $\hat{\sigma}_1^2(5) + 0,20 = 1,121$ que é menor que $(0,01)^2(53.280)/(1,96)^2 = 1,387$. Temos, também, que $|b(5)| = 0,949$ é maior que $d_1 = 0,01$, ou seja, β é significativamente diferente de zero implicando que o modelo ajustado:

$$Y_i = a(5) + b(5)x_i \quad i = 1, 2, \dots, 5$$

é conveniente para estimar ξ . Portanto podemos seguir para a segunda fase do processo.

Iniciamos, a fase de estimação de ξ , fixando $k_0 = 3$ observações (para simularmos a amostragem desta segunda etapa sorteamos aleatoriamente amostras da distribuição normal com média 200 e desvio padrão 2,4): 203,00°C, 198,17°C e 201,51°C. Obtemos, então, $\hat{\sigma}_2^2(3) + 0,333 = 12,568$ que é maior que $(4)^2 3(b(5))^2 / (1,96)^2 = 11,264$ e concluímos, pelo critério de parada (4.4.2), que devemos incorporar mais uma "observação" de Y_{0i} na amostra. Observamos o valor 200,53°C resultando $\hat{\sigma}_2^2(4) + 0,25 = 12,584$ que é menor que $(4)^2 4(b(5))^2 / (1,96)^2 = 15,019$ que satisfaz a condição de parada (4.4.2). De maneira que podemos finalizar a amostragem sequencial dos Y_{0i} .

O intervalo estimado, com probabilidade de "decisão correta" 0,95, para o valor real da temperatura correspondente às "leituras" Y_0 do termopar é:

$$x_{\text{sup}} = 218,09 + 4 = 222,09^\circ\text{C}$$

e

$$x_{\text{inf}} = 218,09 - 4 = 214,09^\circ\text{C}$$

COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES

Através do exposto, no que se refere aos estimadores pontuais mais utilizados na prática - estimador clássico e inverso -, parece-nos, de modo geral, que o método clássico oferece uma estimativa melhor para o parâmetro ξ pois, por diversos critérios de comparação, obtemos que, apenas em um "pequeno" intervalo em torno da média dos pontos do intervalo de calibração, o método inverso apresenta um melhor desempenho, mas a técnica clássica deve ser sempre acompanhada de uma análise de verossimilhança para podermos, ao menos, avaliar quando o seu uso não é indicado.

Outro aspecto é a importância dos intervalos de confiança a fim de termos uma noção mais ampla da exatidão da estimativa do parâmetro ξ , contudo, na realidade, o experimentador ou usuário está interessado em obter somente um valor pontual, mas as informações referentes aos intervalos de confiança podem ser utilizadas para chegar à estimativa final do parâmetro. Se a diferença entre diversos estimadores pontuais é desprezível em relação ao comprimento dos intervalos de confiança, digamos de coeficiente de 90% ou 95%, questões sobre viés e variância infinita tornam-se secundárias. Vejamos o exemplo analisado neste trabalho para determinar o valor da temperatura real ξ correspondente à leitura de 200°C , observada no termopar: pelo método clássico obtivemos $216,856^{\circ}\text{C}$ e pelo inverso $216,877^{\circ}\text{C}$, portanto, podemos considerar $\hat{\xi} = 216,9^{\circ}\text{C}$, o que nos parece um arredondamento razoável comparando com a magnitude do comprimento de seu intervalo de 95% de confiança clássico ($11,3^{\circ}\text{C}$), mas se-

ria extremamente enganoso se seu comprimento fosse de, por exemplo, 1°C . No caso em que as diferenças são desprezíveis, é mais relevante saber se temos um experimento de calibração "bem" ajustado do que qual o estimador a ser usado. Deste modo, torna-se evidente a necessidade de um aprofundamento dos estudos do planejamento de experimentos (design of experiments). O artigo recente de Bronaccorsi J.P. (1986), "Design considerations for calibration" (Technometrics 28(2), 149-155), mostra nitidamente esta preocupação.

Por outro lado, quando o processo de obtenção dos dados de calibração é muito trabalhoso e difícil, podemos utilizar, aliada a uma técnica de planejamento de experimento, a estimação sequencial que, apesar de ser um método mais trabalhoso, tem a vantagem de, a partir do momento em que estabelecemos a precisão da estimativa do parâmetro β e o comprimento do intervalo desejado, necessitar de uma amostra de tamanho menor possível para que estas condições estejam satisfeitas.

Salientamos, também, a importância dos métodos bayesianos principalmente por apresentarem a possibilidade de incorporarmos à estimação do parâmetro ξ as nossas impressões subjetivas quando estas não podem ser desprezíveis. Entretanto, para estes métodos, é imprescindível um estudo mais profundo do ponto de vista de sua aplicabilidade em problemas concretos.

Finalmente, concordamos com Williams (1969a) quando afirma que: "Os métodos de regressão são muitas vezes necessários na análise dos dados de calibração, mas está provado que a aplicação sem espírito de crítica das técnicas pode levar a interpretações errôneas. A simplicidade e validade dos métodos de regressão, em particular agora que os programas de regressão,

para computadores, são produzidos como "pacotes", tornam-nos particularmente sujeitos a usos incorretos. Os problemas de calibração geralmente não podem, no nível em que se encontram, ser considerados totalmente "empacotados". A experiência física deve ser entendida antes de determinar qual o modelo matemático e o método de análise estatística apropriado. Métodos incorretos e interpretações erradas podem provir de uma má interpretação do processo de aquisição dos dados ou de um conhecimento inadequado da teoria estatística".

ANEXO

TABELA 1 - Percentagem de pontos da estatística de t-Bonferro-ni (fonte: Dunn, 1961)

Tabela dos valores $t_{\alpha/2m}$ onde $P(T \geq t_{\alpha/2m}) = \frac{\alpha}{2m}$ e T tem distribuição t-student com ν graus de liberdade.

TABELA 2 - Distribuição do maior valor absoluto de m variáveis t-student (fonte: Hahn e Hendrickson, 1971)

Tabela dos valores q_{α} onde $P(Q \geq q_{\alpha}) = \alpha$ e Q é o maior valor absoluto de m variáveis com distribuição t-student, tendo cada variável ν graus de liberdade.

TABELA 3 - Percentagem de pontos do argumento F (fonte: Lieberman e Miller, 1963)

Tabela dos valores c^* onde $P\left(\frac{Z_1 + Z_2 + 1}{\chi^2/\nu} \geq c^*\right) = \alpha$, Z_1 e Z_2 são variáveis independentes com distribuição normal padronizada e χ^2 tem distribuição qui-quadrado com ν graus de liberdade.

TABELA 4 - Constantes λ para intervalo simultâneo ilimitado modificado por Oden (fonte: Oden, 1973)

Tabela dos valores da constante λ tal que a condição (2.3.20) esteja satisfeita para $f = \lambda f_B$ quando $t^* \leq 2n^{1/2}$.

TABELA 5 - Constantes c para intervalo simultâneo ilimitado proposto por Scheffé (fonte: Scheffé, 1973)

Tabela dos valores c' tal que $c = 1 + (0,01)c'$, onde a barra sobre o inteiro significa valor negativo e $v = n-2$ graus de liberdade.

T A B E L A 1

PORCENTAGEM DE PONTOS DA ESTATÍSTICA DE t - BONFERRONI

$\alpha = 0,05$												
m \ v	5	7	10	12	15	20	24	30	40	60	120	∞
2	3,17	2,84	2,64	2,56	2,49	2,42	2,39	2,36	2,33	2,30	2,27	2,24
3	3,54	3,13	2,87	2,78	2,69	2,61	2,55	2,54	2,50	2,47	2,43	2,39
4	3,81	3,34	3,04	2,94	2,84	2,75	2,70	2,66	2,62	2,58	2,54	2,50
5	4,04	3,50	3,17	3,06	2,95	2,85	2,80	2,75	2,71	2,66	2,62	2,58
6	4,22	3,64	3,28	3,15	3,04	2,93	2,88	2,83	2,78	2,73	2,68	2,64
7	4,38	3,76	3,37	3,24	3,11	3,00	2,94	2,89	2,84	2,79	2,74	2,69
8	4,53	3,86	3,45	3,31	3,18	3,06	3,00	2,94	2,89	2,84	2,79	2,74
9	4,66	3,95	3,52	3,37	3,24	3,11	3,05	2,99	2,93	2,88	2,83	2,77
10	4,78	4,03	3,58	3,43	3,29	3,16	3,09	3,03	2,97	2,92	2,86	2,81
15	5,25	4,36	3,83	3,65	3,48	3,33	3,26	3,19	3,12	3,06	2,99	2,94
20	5,60	4,59	4,01	3,80	3,62	3,46	3,38	3,30	3,23	3,16	3,09	3,02
25	5,89	4,78	4,15	3,93	3,74	3,55	3,47	3,39	3,31	3,24	3,16	3,09
30	6,15	4,95	4,27	4,04	3,82	3,63	3,54	3,46	3,38	3,30	3,22	3,15
35	6,36	5,09	4,37	4,13	3,90	3,70	3,61	3,52	3,43	3,34	3,27	3,19
40	6,56	5,21	4,45	4,20	3,97	3,76	3,66	3,57	3,48	3,39	3,31	3,23
45	6,70	5,31	4,53	4,26	4,02	3,80	3,70	3,61	3,51	3,42	3,34	3,26
50	6,86	5,40	4,59	4,32	4,07	3,85	3,74	3,65	3,55	3,46	3,37	3,29
100	8,00	6,08	5,06	4,73	4,42	4,15	4,04	3,90	3,79	3,69	3,58	3,48
250	9,68	7,06	5,70	5,27	4,90	4,56	4,4*	4,2*	4,1*	3,97	3,83	3,72

$\alpha = 0,01$												
m \ v	5	7	10	12	15	20	24	30	40	60	120	∞
2	4,78	4,03	3,58	3,43	3,29	3,16	3,09	3,03	2,97	2,92	2,86	2,81
3	5,25	4,36	3,83	3,65	3,48	3,33	3,26	3,19	3,12	3,06	2,99	2,94
4	5,60	4,59	4,01	3,80	3,62	3,46	3,38	3,30	3,23	3,16	3,09	3,02
5	5,89	4,78	4,15	3,93	3,74	3,55	3,47	3,39	3,31	3,24	3,16	3,09
6	6,15	4,95	4,27	4,04	3,82	3,63	3,54	3,46	3,38	3,30	3,22	3,15
7	6,36	5,09	4,37	4,13	3,90	3,70	3,61	3,52	3,43	3,34	3,27	3,19
8	6,56	5,21	4,45	4,20	3,97	3,76	3,66	3,57	3,48	3,39	3,31	3,23
9	6,70	5,31	4,53	4,26	4,02	3,80	3,70	3,61	3,51	3,42	3,34	3,26
10	6,86	5,40	4,59	4,32	4,07	3,85	3,74	3,65	3,55	3,46	3,37	3,29
15	7,51	5,79	4,86	4,56	4,29	4,03	3,91	3,80	3,70	3,59	3,50	3,40
20	8,00	6,08	5,06	4,73	4,42	4,15	4,04	3,90	3,79	3,69	3,58	3,48
25	8,37	6,30	5,20	4,86	4,53	4,25	4,1*	3,98	3,88	3,76	3,64	3,54
30	8,68	6,49	5,33	4,95	4,61	4,33	4,2*	4,13	3,93	3,81	3,69	3,59
35	8,95	6,67	5,44	5,04	4,71	4,39	4,3*	4,26	3,97	3,84	3,73	3,63
40	9,19	6,83	5,52	5,12	4,78	4,46	4,3*	4,1*	4,01	3,89	3,77	3,66
45	9,41	6,93	5,60	5,20	4,84	4,52	4,3*	4,2*	4,1*	3,93	3,80	3,69
50	9,68	7,06	5,70	5,27	4,90	4,56	4,4*	4,2*	4,1*	3,97	3,83	3,72
100	11,04	7,80	6,20	5,70	5,20	4,80	4,7*	4,4*	4,5*		4,00	3,89
250	13,26	8,83	6,9*	6,3*	5,8*	5,2*	5,0*	4,9*	4,8*			4,11

* OBTIDAS POR INTERPOLAÇÃO GRÁFICA

T A B E L A 2

DISTRIBUIÇÃO DO MAIOR VALOR ABSOLUTO DE m VARIÁVEIS

t - STUDENT

$\alpha = 0,10$											
$v \backslash m$	1	2	3	4	5	6	8	10	12	15	20
3	2,353	2,989	3,369	3,637	3,844	4,011	4,272	4,471	4,631	4,823	5,066
4	2,132	2,662	2,976	3,197	3,368	3,506	3,722	3,887	4,020	4,180	4,383
5	2,015	2,491	2,769	2,965	3,116	3,239	3,430	3,576	3,694	3,837	4,018
6	1,943	2,385	2,642	2,822	2,961	3,074	3,249	3,384	3,493	3,624	3,790
7	1,895	2,314	2,556	2,725	2,856	2,962	3,127	3,253	3,355	3,478	3,635
8	1,860	2,262	2,494	2,656	2,780	2,881	3,038	3,158	3,255	3,373	3,522
9	1,833	2,224	2,447	2,603	2,723	2,819	2,970	3,086	3,179	3,292	3,436
10	1,813	2,193	2,410	2,562	2,678	2,771	2,918	3,029	3,120	3,229	3,368
11	1,796	2,169	2,381	2,529	2,642	2,733	2,875	2,984	3,072	3,178	3,313
12	1,782	2,149	2,357	2,501	2,612	2,701	2,840	2,946	3,032	3,136	3,268
15	1,753	2,107	2,305	2,443	2,548	2,633	2,765	2,865	2,947	3,045	3,170
20	1,825	2,065	2,255	2,386	2,486	2,567	2,691	2,786	2,863	2,956	3,073
25	1,708	2,041	2,226	2,353	2,450	2,528	2,648	2,740	2,814	2,903	3,016
30	1,697	2,025	2,207	2,331	2,426	2,502	2,620	2,709	2,781	2,868	2,978
40	1,684	2,006	2,183	2,305	2,397	2,470	2,585	2,671	2,741	2,835	2,931
60	1,671	1,986	2,160	2,278	2,368	2,439	2,550	2,634	2,701	2,782	2,884

$\alpha = 0,05$											
$v \backslash m$	1	2	3	4	5	6	8	10	12	15	20
3	3,183	3,960	4,430	4,764	5,023	5,233	5,562	5,812	6,015	6,259	6,567
4	2,777	3,382	3,745	4,003	4,203	4,366	4,621	4,817	4,975	5,166	5,409
5	2,571	3,091	3,399	3,619	3,789	3,928	4,145	4,312	4,447	4,611	4,819
6	2,447	2,916	3,193	3,389	3,541	3,664	3,858	4,008	4,129	4,275	4,462
7	2,365	2,800	3,056	3,236	3,376	3,489	3,668	3,805	3,916	4,051	4,223
8	2,306	2,718	2,958	3,128	3,258	3,365	3,532	3,669	3,764	3,891	4,052
9	2,262	2,657	2,885	3,046	3,171	3,272	3,430	3,552	3,651	3,770	3,923
10	2,228	2,609	2,829	2,984	3,103	3,199	3,351	3,468	3,562	3,677	3,823
11	2,201	2,571	2,784	2,933	3,048	3,142	3,288	3,400	3,491	3,602	3,743
12	2,179	2,540	2,747	2,892	3,004	3,095	3,236	3,345	3,433	3,541	3,677
15	2,132	2,474	2,669	2,805	2,910	2,994	3,126	3,227	3,309	3,409	3,535
20	2,086	2,411	2,594	2,722	2,819	2,898	3,020	3,114	3,190	3,282	3,399
25	2,060	2,374	2,551	2,673	2,766	2,842	2,959	3,048	3,121	3,208	3,320
30	2,042	2,350	2,522	2,641	2,732	2,805	2,918	3,005	3,075	3,160	3,267
40	2,021	2,321	2,488	2,603	2,690	2,760	2,869	2,952	3,019	3,100	3,203
60	2,000	2,292	2,454	2,564	2,649	2,716	2,821	2,900	2,964	3,041	3,139

$\alpha = 0,01$											
$v \backslash m$	1	2	3	4	5	6	8	10	12	15	20
3	5,814	7,127	7,914	8,479	8,919	9,277	9,838	10,262	10,616	11,034	11,559
4	4,604	5,462	5,985	6,362	6,656	6,997	7,274	7,565	7,801	8,087	8,451
5	4,032	4,700	5,106	5,398	5,625	5,812	6,106	6,333	6,519	6,744	7,050
6	3,707	4,271	4,611	4,855	5,046	5,202	5,449	5,640	5,798	5,985	6,250
7	3,500	3,998	4,296	4,510	4,677	4,814	5,031	5,198	5,335	5,502	5,716
8	3,355	3,809	4,080	4,273	4,424	4,547	4,742	4,894	5,017	5,168	5,361
9	3,250	3,672	3,922	4,100	4,239	4,353	4,532	4,672	4,785	4,924	5,103
10	3,169	3,567	3,801	3,969	4,098	4,205	4,373	4,503	4,609	4,739	4,905
11	3,106	3,485	3,707	3,865	3,988	4,087	4,247	4,370	4,470	4,593	4,750
12	3,055	3,418	3,631	3,782	3,899	3,995	4,146	4,263	4,359	4,475	4,625
15	2,947	3,279	3,472	3,608	3,714	3,800	3,935	4,040	4,125	4,229	4,363
20	2,845	3,149	3,323	3,446	3,541	3,617	3,738	3,831	3,907	3,999	4,117
25	2,788	3,075	3,239	3,354	3,442	3,514	3,626	3,713	3,783	3,869	3,978
30	2,750	3,027	3,185	3,295	3,379	3,448	3,555	3,637	3,704	3,785	3,889
40	2,705	2,969	3,119	3,223	3,303	3,367	3,468	3,545	3,607	3,683	3,780
60	2,660	2,913	3,055	3,154	3,229	3,290	3,384	3,456	3,515	3,586	3,676

TABELA 3

PORCENTAGEM DOS PONTOS DO ARGUMENTO F

v \ α	0,5	0,3	0,1	0,05	0,01	0,001
1	2,399	4,264	13,16	26,40	132,1	1321,0
2	1,938	2,792	5,275	7,604	17,26	54,75
3	1,810	2,439	3,978	5,192	9,210	20,13
4	1,748	2,280	3,471	4,329	6,851	12,54
5	1,711	2,189	3,204	3,894	5,781	9,569
6	1,686	2,130	3,039	3,635	5,183	8,051
7	1,668	2,088	2,928	3,463	4,805	7,148
8	1,654	2,056	2,848	3,341	4,546	6,555
9	1,643	2,032	2,788	3,251	4,357	6,139
10	1,634	2,013	2,741	3,181	4,214	5,831
11	1,627	1,997	2,704	3,126	4,102	5,594
12	1,620	1,984	2,673	3,080	4,012	5,408
13	1,615	1,973	2,647	3,043	3,939	5,257
14	1,610	1,964	2,626	3,011	3,877	5,132
15	1,606	1,956	2,607	2,984	3,825	5,027
16	1,602	1,949	2,591	2,961	3,780	4,938
17	1,599	1,942	2,577	2,941	3,741	4,862
18	1,596	1,937	2,564	2,923	3,707	4,795
19	1,594	1,932	2,553	2,907	3,677	4,737
20	1,591	1,928	2,544	2,893	3,650	4,685
21	1,589	1,924	2,535	2,880	3,626	4,639
22	1,587	1,920	2,527	2,869	3,605	4,598
23	1,585	1,917	2,519	2,858	3,585	4,561
24	1,584	1,913	2,513	2,849	3,567	4,527
25	1,582	1,911	2,507	2,840	3,551	4,496
26	1,581	1,908	2,501	2,832	3,536	4,468
27	1,579	1,906	2,496	2,825	3,523	4,443
28	1,578	1,904	2,491	2,818	3,510	4,419
29	1,577	1,902	2,487	2,812	3,498	4,397
30	1,576	1,900	2,482	2,806	3,488	4,377
35	1,571	1,892	2,466	2,782	3,443	4,295
40	1,568	1,886	2,453	2,764	3,411	4,235
45	1,566	1,882	2,443	2,750	3,386	4,189
50	1,563	1,878	2,436	2,739	3,366	4,153
60	1,560	1,873	2,424	2,723	3,336	4,099
70	1,558	1,869	2,416	2,712	3,316	4,062
80	1,556	1,866	2,410	2,703	3,300	4,034
90	1,555	1,864	2,405	2,696	3,288	4,013
100	1,554	1,862	2,401	2,691	3,279	3,996

TABELA 4

CONSTANTES PARA INTERVALO SIMULTÂNEO MODIFICADO
POR ODEN

n \ α	p = 0,90		p = 0,95		p = 0,99	
	0,10	0,05	0,10	0,05	0,10	0,05
10	0,75	0,76	0,78	0,78	0,81	0,81
20	0,79	0,79	0,81	0,81	0,84	0,84
100	0,87	0,86	0,88	0,88	0,91	0,90

T A B E L A 5

CONSTANTES c PARA INTERVALO SIMULTÂNEO PROPOSTO POR SCHEFFE

		$\alpha = 0,01$														
v_1		0	,05	,10	,15	,20	,30	,40	,60	,80	1,0	1,5	2,0	3,0	4,0	∞
v_2	v															
0	4	0														
	8	0														
	15	0														
	30	0														
	60	0														
	120	0														
	∞	0														
0,05	4	1	$\bar{1}$													
	8	1	$\bar{2}$													
	15	1	$\bar{3}$													
	30	1	$\bar{4}$													
	60	1	$\bar{4}$													
	120	1	$\bar{4}$													
	∞	0	0													
0,10	4	2	$\bar{1}$	$\bar{2}$												
	8	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$												
	15	1	$\bar{3}$	$\bar{5}$												
	30	1	$\bar{3}$	$\bar{6}$												
	60	1	$\bar{4}$	$\bar{6}$												
	120	1	$\bar{4}$	$\bar{6}$												
	∞	0	0	0												
0,15	4	2	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$											
	8	1	$\bar{1}$	$\bar{4}$	$\bar{5}$											
	15	1	$\bar{2}$	$\bar{5}$	$\bar{6}$											
	30	1	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{7}$											
	60	1	$\bar{3}$	$\bar{6}$	$\bar{7}$											
	120	1	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{6}$											
	∞	0	0	0	0											
0,20	4	3	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$										
	8	2	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{6}$										
	15	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$	$\bar{7}$										
	30	1	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{7}$	$\bar{7}$										
	60	1	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{6}$	$\bar{7}$										
	120	1	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{5}$	$\bar{6}$										
	∞	0	0	0	0	0										

T A B E L A 5

CONSTANTES c PARA INTERVALO SIMULTÂNEO PROPOSTO POR
SCHEFFE

		$\alpha = 0,05$														
v_1		0	,05	,10	,15	,20	,30	,40	,60	,80	1,0	1,5	2,0	3,0	4,0	∞
v_2	v															
0	4	0														
	8	0														
	15	0														
	30	0														
	60	0														
	120	0														
	∞	0														
0,05	4	1	$\bar{1}$													
	8	1	$\bar{2}$													
	15	1	$\bar{2}$													
	30	1	$\bar{3}$													
	60	1	$\bar{3}$													
	120	1	$\bar{3}$													
	∞	0	0													
0,10	4	2	0	$\bar{2}$												
	8	1	1	$\bar{3}$												
	15	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$												
	30	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$												
	60	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$												
	120	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$												
	∞	0	0	0												
0,15	4	2	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$											
	8	2	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{4}$											
	15	2	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$											
	30	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$	$\bar{5}$											
	60	1	$\bar{2}$	$\bar{4}$	$\bar{5}$											
	120	1	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$											
	∞	0	0	0	0											
0,20	4	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$										
	8	2	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$										
	15	2	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{5}$										
	30	2	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$	$\bar{6}$										
	60	2	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{5}$										
	120	2	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{4}$										
	∞	0	0	0	0	0										

TABELA 5

CONSTANTES c PARA INTERVALO SIMULTÂNEO PROPOSTO POR
SCHEFFE

		$\alpha = 0,10$														
v_1		0	,05	,10	,15	,20	,30	,40	,60	,80	1,0	1,5	2,0	3,0	4,0	∞
v_2	v															
0	4	0														
	8	0														
	15	0														
	30	0														
	60	0														
	120	0														
	∞	0														
0,05	4	1	$\bar{1}$													
	8	1	$\bar{1}$													
	15	1	$\bar{2}$													
	30	1	$\bar{2}$													
	60	1	$\bar{2}$													
	120	1	$\bar{2}$													
	∞	0	0													
0,10	4	2	0	$\bar{1}$												
	8	2	$\bar{1}$	$\bar{2}$												
	15	1	$\bar{1}$	$\bar{3}$												
	30	1	$\bar{1}$	$\bar{3}$												
	60	1	$\bar{1}$	$\bar{3}$												
	120	1	$\bar{1}$	$\bar{3}$												
	∞	0	0	0												
0,15	4	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$											
	8	2	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$											
	15	2	0	$\bar{2}$	$\bar{4}$											
	30	2	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$											
	60	2	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$											
	120	2	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$											
	∞	0	0	0	0											
0,20	4	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$										
	8	3	1	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$										
	15	2	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$										
	30	2	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$										
	60	2	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$										
	120	2	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$										
	∞	c	0	0	0	0										

TABELA 5

CONSTANTES c PARA INTERVALO SIMULTÂNEO PROPOSTO POR
SCHEFFE

		$\alpha = 0,10$														
v_1		0	,05	,10	,15	,20	,30	,40	,60	,80	1,0	1,5	2,0	3,0	4,0	∞
v_2	v															
0,30	4	4	2	1	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$									
	8	4	1	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$									
	15	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$									
	30	3	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$									
	60	3	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$									
	120	2	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$									
	∞	0	0	0	0	0	0									
0,40	4	5	3	2	1	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$								
	8	4	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$								
	15	4	2	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{4}$	$\bar{5}$								
	30	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{4}$								
	60	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$								
	120	3	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$								
	∞	0	0	0	0	0	0	0								
0,60	4	7	5	3	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{4}$							
	8	6	4	2	1	0	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$							
	15	5	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{5}$							
	30	4	2	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$							
	60	4	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$							
	120	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$							
	∞	0	0	0	0	0	0	0	0							
0,80	4	8	6	4	3	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$						
	8	6	4	3	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$						
	15	6	3	2	1	0	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{4}$	$\bar{4}$						
	30	5	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$						
	60	4	2	0	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$						
	120	4	1	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$						
	∞	0	0	0	0	0	0	0	0	0						
1,0	4	8	7	5	4	3	2	0	$\bar{1}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$					
	8	7	5	4	2	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$					
	15	6	4	2	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$					
	30	5	3	1	0	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$					
	60	5	2	1	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$					
	120	4	2	0	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$					
	∞	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					

T A B E L A 5

CONSTANTES c PARA INTERVALO SIMULTÂNEO PROPOSTO POR SCHEFFE

		$\alpha = 0,25$															
v_1		0	,05	,10	,15	,20	,30	,40	,60	,80	1,0	1,5	2,0	3,0	4,0	∞	
v_2	v																
0	4	0															
	8	0															
	15	0															
	30	0															
	60	0															
	120	0															
	∞	0															
0,05	4	1	0														
	8	1	0														
	15	1	$\bar{1}$														
	30	1	$\bar{1}$														
	60	1	$\bar{1}$														
	120	1	$\bar{1}$														
	∞	0	0														
0,10	4	2	1	$\bar{1}$													
	8	2	1	$\bar{1}$													
	15	2	0	$\bar{1}$													
	30	2	0	$\bar{1}$													
	60	2	0	$\bar{1}$													
	120	2	0	$\bar{1}$													
	∞	0	0	0													
0,15	4	3	2	0	$\bar{1}$												
	8	3	1	0	$\bar{1}$												
	15	3	1	0	$\bar{2}$												
	30	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$												
	60	3	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$												
	120	2	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$												
	∞	0	0	0	0												
0,20	4	4	2	1	0	$\bar{1}$											
	8	4	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$											
	15	3	2	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$											
	30	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$											
	60	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$											
	120	3	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$											
	∞	0	0	0	0	0											

B I B L I O G R A F I A

- BERKSON, J. (1969) Estimation of a linear function for a calibration line: consideration of a recent proposal. *Technometrics*, 11(4):649-660.
- BICKEL, P.J. & DOKSUN, K.A. (1977) *Mathematical statistics: basic ideas and selected topics*. San Francisco, Holden-Day. 492p.
- BROWNLIE, K.A. (1965) *Statistical theory and methodology in science and engineering*. 2.ed. New York, John Wiley. 590p.
- CHOW, Y.S. & ROBBINS, H. (1965) On the asymptotic theory of fixed-width sequential confidence intervals for the mean. *Ann. Math. Statist.*, 36(2):457-462.
- COX, C.P. (1971) Interval estimation for X -predictions from linear Y -on- X regression lines through the origin. *J. Amer. Assoc.*, 66(336):749-751.
- DIETRICH, F.H. & MARKS, R.G. (1979) Analysis of a factorial quantal response assay using inverse regression. *Commun. Statist. Theor. Meth.*, A8(1):85-98.
- DRAPER, N. & SMITH, H. (1981) *Applied regression analysis*. 2.ed. New York, John Wiley. 709p.
- DUNN, O.J. (1961) Multiple comparisons among means. *J. Amer. Statist. Assoc.*, 56(293):52-64.
- DUNSMORE, I.R. (1968) A bayesian approach to calibration. *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B*, 30(2):396-405.
- EASTERLING, R.G. (1981) Discussion: a bayesian analysis of the linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):343-344.
- EISENHART, C. (1939) The interpretation of certain regression methods and their use in biological and industrial research. *Ann. Math. Statist.*, 10(2):162-186.
- EL-SHAARAWI, A. (1977) Marginal likelihood solutions to some problems connected with regression analysis. *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B*, 39(3):343-348.

- FIELLER, E.C. (1940) The biological standardization of insulin. *J. Roy. Statist. Soc. Suppl.*, 7(1):1-54.
- FINNEY, D.J. (1978) *Statistical method in biological assay*. 3.ed. London, Charles Griffin. 508p.
- FRASER, D.A.S. (1968) *The structure of inference*. New York, John Wiley. 344p.
- GLESER, L.J. (1965) On the asymptotic theory of fixed-size sequential confidence bounds for linear regression parameters. *Ann. Math. Statist.*, 36(2):463-467.
- GRAYBILL, F.A. (1961) *An introduction to linear statistical models*. New York, McGraw-Hill. 463p.
- GRAYBILL, F.A. (1976) *Theory and application of linear model*. North Situate, Duxbury Press. 704p.
- GUNTER, B.H. (1982) Letter to the editor. *Technometrics*, 24(3): 259-260.
- HAHN, G.J. & HENDRICKSON, R.W. (1971) A table of percentage points of the distribution of the largest absolute value of K student t variates and its applications. *Biometrika*, 58(2): 323-332.
- HALPERIN, M. (1970) On inverse estimation in linear regression. *Technometrics*, 12(4):727-736.
- HILL, B.M. (1981) Discussion: a bayesian analysis of the linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):335-338.
- HINKLEY, D.V. (1969) On the ratio of two correlated normal random variables. *Biometrika*, 56(3):635-639.
- HOADLEY, B. (1970) A bayesian look at inverse linear regression. *J. Amer. Statist. Assoc.*, 65(329):356-369.
- HOFFMANN, R. & VIEIRA, S. (1977) *Análise de regressão: uma introdução à econometria*. São Paulo, Hucitec-EDUSP. 339p.
- HUNTER, W.G. & LAMBOY, W.F. (1981) A bayesian analysis of the linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):323-328.
- HUNTER, W.G. & LAMBOY, W.F. (1981a) Response: a bayesian analysis of the linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4): 344-350.

- KALBFLEISCH, J.D. & SPROTT, D.A. (1970) Application of likelihood methods to models involving large numbers of parameters. *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B*, 32(2):175-208.
- KALOTAY, A.J. (1971) Structural solution to the linear calibration problem. *Technometrics*, 13(4):761-769.
- KNAFL, G. et al. (1984) Nonparametric calibration. *Technometrics*, 26(3):233-241.
- KRUTCHKOFF, R.G. (1967) Classical and inverse regression methods of calibration. *Technometrics*, 9(3):425-439.
- KRUTCHKOFF, R.G. (1968) Letters to the editor. *Technometrics*, 10(2):430-431.
- KRUTCHKOFF, R.G. (1969) Classical and inverse regression methods of calibration in extrapolation. *Technometrics*, 11(3):605-609.
- KRUTCHKOFF, R.G. (1970) Letter to the editor. *Technometrics*, 12(2):433-434.
- KRUTCHKOFF, R.G. (1972) Letter to the editor. *Technometrics*, 14(1):241-242.
- LAWLESS, J.F. (1981) Discussion: a bayesian analysis of linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):334-335.
- LECHNER, J.A.; REEVE, C.P.; SPIEGELEMAN, C. (1982) An implementation of the Scheffé approach to calibration using spline functions, illustrated by a pressure-volume calibration. *Technometrics*, 24(3):229-234.
- LEHMANN, E.L. (1983) *Theory of point estimation*. New York, John Wiley. 506p.
- LIEBERMAN, G.J. & MILLER JR., R.G. (1963) Simultaneous tolerance intervals in regression. *Biometrika*, 50(1/2):155-168.
- LIEBERMAN, G.J.; MILLER JR., R.G.; HAMILTON, M.A. (1967) Unlimited simultaneous discrimination intervals in regression. *Biometrika*, 54(1/2):133-145.
- LINNING, F.J. & MANDEL, J. (1964) Which measure of precision. *Anal. Chem.*, 36(13):25A-32A.
- LWIN, T. & MARITZ, J.S. (1980) A note on the problem of statistical calibration. *Appl. Statist.*, 29(2):135-141.

- LWIN, T. (1981) Discussion: a bayesian analysis of linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):339-341.
- LWIN, T. & MARITZ, J.S. (1982) An analysis of the linear-calibration controversy from the perspective of compound estimation. *Technometrics*, 24(3):235-242.
- MANDEL, J. (1958) A note on confidence intervals in regression problems. *Ann. Math. Statist.*, 29(2):903-907.
- MARTINELLE, S. (1970) On the choice of regression in linear calibration; comments on a paper by R.G. Krutchkoff. *Technometrics*, 12(1):157-161.
- MILLER JR., R.G. (1981) *Simultaneous statistical inference*. 2.ed. New York, Springer. 229p. (Springer Series in Statistics)
- MINDER, C.E. & WHITNEY, J.B. (1975) A likelihood analysis of the linear calibration problem. *Technometrics*, 17(4):463-471.
- MONTGOMERY, D.C. & PECK, E.A. (1982) *Introduction to linear regression analysis*. New York, John Wiley. 504p. (Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics - Applied Probability and Statistics Section)
- NASZODI, L.J. (1978) Elimination of the bias in the course of calibration. *Technometrics*, 20(2):201-205.
- ODEN, A. (1973) Simultaneous confidence intervals in inverse linear regression. *Biometrika*, 60(2):339-343.
- ORBAN, J.E. (1981) Discussion: a bayesian analysis of linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):342-343.
- ORBAN, J.E. (1982) Letter to the editor. *Technometrics*, 24(3): 260-261.
- OTT, L. (1966) *Optimal designs for inverse estimation in regression analysis*. Tese (Doutoramento) - VPI
- PEPPER, M.P.G. (1973) A calibration of instruments with non-random errors. *Technometrics*, 15(3):587-599.
- PERNG, S.K. & TONG, Y.L. (1974) A sequential solution to the inverse linear regression problem. *Ann. Statist.*, 2(1): 535-539.

- PITMAN, E.J.G. (1937) The closest estimates of statistical parameters. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 33:212-222.
- ROBBINS, H. (1950) Asymptotically subminimax solutions of compound statistical decision problems. In: BERKELEY SYMPOSIUM ON MATHEMATICAL STATISTICS AND PROBABILITY, 2, Berkeley. *Proceedings*. Berkeley, University California Press, 1951. p.131-148.
- ROSENBLATT, J.R. & SPIELGELMAN, C.H. (1981). Discussion: a bayesian analysis of the linear calibration problem. *Technometrics*, 23(4):329-333.
- ROTHMAN, D. (1968) Letter to the editor. *Technometrics*, 10(2):429.
- RUBIN, I.I. (1973) *Injection molding: theory and practice*. New York, John Wiley. 657p. (Society of Plastics Engineers Monograph Series 1)
- SALDIVA, C.D. *Ensaíos biolōgicos com resposta quantal*. São Paulo, 1980. 224p. Dissertação (Mestrado) - IME-USP.
- SAW, J.G. (1970) Letter to the editor. *Technometrics*, 12(4): 937.
- SCHEFEE, H. (1973) A statistical theory of calibration. *Ann. Statist.*, 1(1):1-37.
- SCHWARTZ, L.M. (1977) Nonlinear calibration. *Anal. Chem.*, 49(13):2062-2068.
- SEBER, G.A.F. (1977) *Linear regression analysis*. New York, John Wiley. 465p. (Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics)
- SHEPPARD, W.F. (1939) *The probability integral*. Cambridge, University Press. 34p. (Mathematical Tables, 7)
- SHUKLA, G.K. (1972) On the problem of calibration. *Technometrics*, 14(3):547.
- SHUSTER, J.J. & DIETRICH, F.H. (1976) Quantal response assays by inverse regression. *Commun. Statist. Theor. Meth.*, A5(4): 293-305.
- SPROTT, D.A. (1982) Letter to the editor. *Technometrics*, 24(3):259.

- TIEDE, J.J. & PAGANO, M. (1979) The application of robust calibration to radioimmunoassay. *Biometrics*, 35(3): 567-574.
- TUCKER, W.T. (1980) *The linear calibration problem revisited*. Trab. apres. a ASQC Fall Technical Conference, Cincinnati, Ohio. s.n.t. 22p.
- WILLIAMS, E.J. (1959) *Regression analysis*. New York, John Wiley. 214p.
- WILLIAMS, E.J. (1969) A note on regression methods in calibration. *Technometrics*, 11(1):189-196.
- WILLIAMS, E.J. (1969a) Regression methods in calibration problem. *Bull. Inst. Internat. Statist.*, 43(1):17-28.