

Métodos Computacionais para Inferência Estatística

Capítulo 1 e 2 - Verossimilhança

Paulo Justiniano Ribeiro Jr.
Wagner Hugo Bonat
Elias Teixeira Krainski
Walmes Marques Zeviani

LEG: Laboratório de Estatística e Geoinformação
Universidade Federal do Paraná

20º SINAPE, 30-31/07/2012

Comentários

- Agradecimentos
- Recursos
 - Página: <http://www.leg.ufpr.br/mcie>
 - códigos e versões atualizadas !!!
- *Principal público alvo: graduação a início de PG*
- Motivações e Propósitos
- Experiências/exposição das gerações
- Facilidade de recursos computacionais e linguagens
- Uso de rotinas *versus* implementação/teste/ilustração/aprendizado
- Uso crítico e avaliação e apreciação das limitações de rotinas

Conteúdos

- **texto** x **apresentação**

- 1 Verossimilhança - idéias e conceitos básicos e exemplos
 - 2 Modelos de regressão (GLM, Simplex, Subdisperso, Não Linear, Proc. Poisson não Hom.)
 - 3 Modelos de efeitos aleatórios (Espaciais, GLMM, Beta Longitudinal, TRI, Linear Dinâmico)
 - 4 Modelos dinâmicos
 - 5 (Inferência Bayesiana)
 - 6 Clonagem de dados
 - 7 INLA - *Integrated Nested Laplace Approximation* - fundamentos
 - 8 INLA - exemplos (regressão dinâmica e modelos espaço-temporais)
- Omissões do material / Omissões no material
 - **Foco:** inferência por verossimilhança e alguns métodos numéricos
 - incursões eventuais em inferência Bayesiana

Paradigmas para inferência

- Paradigmas
 - Frequentista (espaço amostral / Newman-Pearson)
 - Verossimilhança
 - Bayesiano

Paradigmas para inferência

- Paradigmas
 - Frequentista (espaço amostral / Newman-Pearson)
 - Verossimilhança
 - Bayesiano
- Diferentes perguntas:

Paradigmas para inferência

- Paradigmas
 - Frequentista (espaço amostral / Newman-Pearson)
 - Verossimilhança
 - Bayesiano
- Diferentes perguntas:
 - O que devo fazer?

Paradigmas para inferência

- Paradigmas
 - Frequentista (espaço amostral / Newman-Pearson)
 - Verossimilhança
 - Bayesiano
- Diferentes perguntas:
 - O que devo fazer?
 - O que os dados dizem?

Paradigmas para inferência

- Paradigmas
 - Frequentista (espaço amostral / Newman-Pearson)
 - Verossimilhança
 - Bayesiano
- Diferentes perguntas:
 - O que devo fazer?
 - O que os dados dizem?
 - Em que devo acreditar?

Paradigmas para inferência

- Paradigmas

- Frequentista (espaço amostral / Newman-Pearson)
- Verossimilhança
- Bayesiano

- Diferentes perguntas:

- O que devo fazer?
- O que os dados dizem?
- Em que devo acreditar?

- Uma provocação à reflexão (**Royall, 1997:**)

“Fortunately we are not forced to choose either of these two evils, the sample-space dependence of the frequentists or the prior distribution of the Bayesians.

Likelihood methods avoid both sources of subjectivity. ”



Exemplo introdutório

Visitando um exemplo simples:

- População: $X \sim B(\theta)$

Exemplo introdutório

Visitando um exemplo simples:

- População: $X \sim B(\theta)$
- Amostra: x_1, \dots, x_n

Exemplo introdutório

Visitando um exemplo simples:

- População: $X \sim B(\theta)$
- Amostra: x_1, \dots, x_n
- O que podemos falar sobre θ ?
 - Qual a informação contida na amostra?
 - Consideram-se outras fontes de informação?

Exemplo introdutório

Visitando um exemplo simples:

- População: $X \sim B(\theta)$
- Amostra: x_1, \dots, x_n
- O que podemos falar sobre θ ?
 - Qual a informação contida na amostra?
 - Consideram-se outras fontes de informação?
- informação na amostra resumida por $\left(n, y = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}\right)$?

Espaço do Modelo

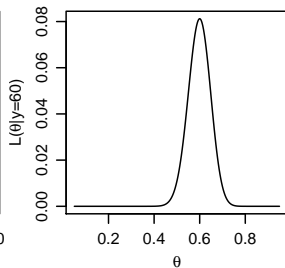
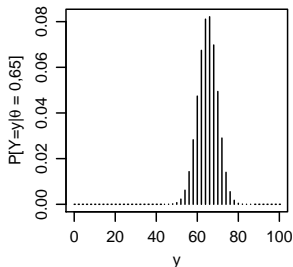
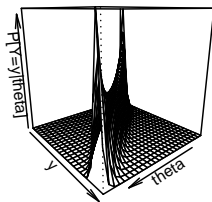
- O espaço definido pelo modelo (3-D)

$$\binom{n}{y} \theta^y (1 - \theta)^{n-y}$$

Espaço do Modelo

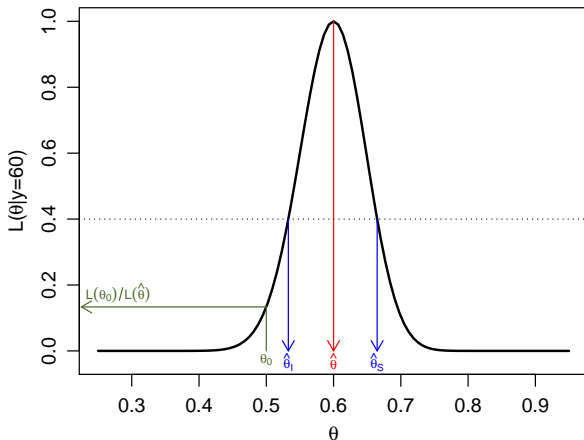
- O espaço definido pelo modelo (3-D)

$$\binom{n}{y} \theta^y (1 - \theta)^{n-y}$$



Objetivos de Inferência

Objetivos de inferência e a função de verossimilhança



Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ

Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ
- **melhor** estimador

Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ
- **melhor** estimador
- conjunto de valores **razoavelmente compatíveis** com a amostra

Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ
- **melhor** estimador
- conjunto de valores **razoavelmente compatíveis** com a amostra
- **decidir** entre dois valores o mais compatível com a amostra

Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ
- **melhor** estimador
- conjunto de valores **razoavelmente compatíveis** com a amostra
- **decidir** entre dois valores o mais compatível com a amostra
- **decidir** se a amostra é compatível com certo valor θ_0 de interesse?

Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ
- **melhor** estimador
- conjunto de valores **razoavelmente compatíveis** com a amostra
- **decidir** entre dois valores o mais compatível com a amostra
- **decidir** se a amostra é compatível com certo valor θ_0 de interesse?
- **suposições/pressupostos**

Elementos

- função de verossimilhança
probabilidade da amostra obtida para diferentes valores de θ
- **melhor** estimador
- conjunto de valores **razoavelmente compatíveis** com a amostra
- **decidir** entre dois valores o mais compatível com a amostra
- **decidir** se a amostra é compatível com certo valor θ_0 de interesse?
- **suposições/pressupostos**
- **relações** e **contrastes** com outros métodos

Inferência Bayesiana

- Extensão da definição do modelo

$$[Y|\theta] \sim B(n, \theta)$$

$$[\theta] \sim Pr(a, b) \text{ (priori)}$$

- permite obter (via teorema de Bayes)

$$[\theta|y] \sim \pi(a^*, b^*) \text{ (posteriori)}$$

- Analogias diretas para estimação (pontual e intervalar),
- ... mas não para testes de hipótese (valores na *posteriori* sem analogias diretas com razão de verossimilhanças).

Função de Verossimilhança

Definição informal:

Dada pela expressão da distribuição conjunta de todas as v.a.'s observáveis (Y) o modelo. ou Distribuição conjunta de todas as v.a.'s especificadas no modelo, integrada sobre as não observáveis.

Notação: $[\cdot]$ (função de) distribuição de \cdot

Casos de particular interesse:

- Distribuições e modelos de regressão

$$[Y|\theta]$$

Função de Verossimilhança

Definição informal:

Dada pela expressão da distribuição conjunta de todas as v.a.'s observáveis (Y) o modelo. ou Distribuição conjunta de todas as v.a.'s especificadas no modelo, integrada sobre as não observáveis.

Notação: $[\cdot]$ (função de) distribuição de \cdot

Casos de particular interesse:

- Distribuições e modelos de regressão

$$[Y|\theta]$$

- Modelos hierárquicos (mistos, efeitos aleatórios, longitudinais, espaciais, etc)

$$[Y|\theta] = \int [Y, b|\theta] d b = \int [Y|b, \theta][b|\theta] d b$$

Função de Verossimilhança

Definição informal:

Dada pela expressão da distribuição conjunta de todas as v.a.'s observáveis (Y) o modelo. ou Distribuição conjunta de todas as v.a.'s especificadas no modelo, integrada sobre as não observáveis.

Notação: $[\cdot]$ (função de) distribuição de \cdot

Casos de particular interesse:

- Distribuições e modelos de regressão

$$[Y|\theta]$$

- Modelos hierárquicos (mistos, efeitos aleatórios, longitudinais, espaciais, etc)

$$[Y|\theta] = \int [Y, b|\theta] d b = \int [Y|b, \theta][b|\theta] d b$$

- inclui Inf. Bayesiana com especificação de $[\theta]$

Expressão da Verossimilhança I

V.A. observável discreta (não há ambiguidade)

$$L(\theta) \equiv P_{\theta}[Y = y]$$

Exemplo: $Y \sim P(\theta)$

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n \frac{\exp\{-\theta\} \theta^{Y_i}}{Y_i!} = \frac{\exp\{-n\theta\} \theta^{\sum_{i=1}^n Y_i}}{\prod_{i=1}^n Y_i!}$$

$$\propto \exp\{-n\theta\} \theta^{\sum_{i=1}^n Y_i}$$

Expressão da Verossimilhança II

V.A. contínua: medição à certa precisão ($y_{i1} \leq y_i \leq y_{iS}$)

- Forma mais geral

$$L(\theta) = P_{\theta}[y_{11} \leq y_1 \leq y_{1S}, \dots, y_{n1} \leq y_n \leq y_{nS}]$$

Expressão da Verossimilhança II

V.A. contínua: medição à certa precisão ($y_{il} \leq y_i \leq y_{is}$)

- Forma mais geral

$$L(\theta) = P_{\theta}[y_{1l} \leq y_1 \leq y_{1s}, \dots, y_{nl} \leq y_n \leq y_{ns}]$$

- Sob independência

$$\begin{aligned} L(\theta) &= P_{\theta}[y_{1l} \leq y_1 \leq y_{1s}] \cdot P_{\theta}[y_{2l} \leq y_2 \leq y_{2s}] \cdots P_{\theta}[y_{nl} \leq y_n \leq y_{ns}] \\ &= \prod_{i=1}^n P_{\theta}[y_{il} \leq y_i \leq y_{is}] \end{aligned}$$

Expressão da Verossimilhança II

V.A. contínua: medição à certa precisão ($y_{i1} \leq y_i \leq y_{iS}$)

- Forma mais geral

$$L(\theta) = P_{\theta}[y_{11} \leq y_1 \leq y_{1S}, \dots, y_{n1} \leq y_n \leq y_{nS}]$$

- Sob independência

$$\begin{aligned} L(\theta) &= P_{\theta}[y_{11} \leq y_1 \leq y_{1S}] \cdot P_{\theta}[y_{21} \leq y_2 \leq y_{2S}] \dots P_{\theta}[y_{n1} \leq y_n \leq y_{nS}] \\ &= \prod_{i=1}^n P_{\theta}[y_{i1} \leq y_i \leq y_{iS}] \end{aligned}$$

- Se grau de precisão comum, ($y_i - \delta/2 \leq Y_i \leq y_i + \delta/2$);

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n P_{\theta}[y_i - \delta/2 \leq Y_i \leq y_i + \delta/2] = \prod_{i=1}^n \int_{y_i - \delta/2}^{y_i + \delta/2} f(y_i, \theta) d(y_i).$$

Expressão da Verossimilhança II (cont)

- alto grau de precisão (δ é pequeno em relação a variabilidade dos dados)

$$L(\theta) \approx \left(\prod_{i=1}^n f(y_i, \underline{\theta}) \right) \delta^n,$$

Expressão da Verossimilhança II (cont)

- alto grau de precisão (δ é pequeno em relação a variabilidade dos dados)

$$L(\theta) \approx \left(\prod_{i=1}^n f(y_i, \underline{\theta}) \right) \delta^n,$$

- e se δ não depende dos valores dos parâmetros

$$L(\theta) \approx \prod_{i=1}^n f(y_i, \underline{\theta})$$

Expressão da Verossimilhança II (cont)

- alto grau de precisão (δ é pequeno em relação a variabilidade dos dados)

$$L(\theta) \approx \left(\prod_{i=1}^n f(y_i, \underline{\theta}) \right) \delta^n,$$

- e se δ não depende dos valores dos parâmetros

$$L(\theta) \approx \prod_{i=1}^n f(y_i, \underline{\theta})$$

- observações não independentes - densidade multivariada:

$$L(\theta) \approx f(\underline{y}, \underline{\theta})$$

Verossimilhança e Informação

Considere $Y \sim N(\theta, 1)$ e as as seguintes observações.

- 1 $x = 2.45$
- 2 $0.9 < x < 4$
- 3 somente o máximo de uma amostra de tamanho cinco é fornecido
 $x_{(5)} = 3.5$

Verossimilhança e Informação

Considere $Y \sim N(\theta, 1)$ e as seguintes observações.

- 1 $x = 2.45$
- 2 $0.9 < x < 4$
- 3 somente o máximo de uma amostra de tamanho cinco é fornecido
 $x_{(5)} = 3.5$

Verossimilhança:

$$L(\theta; x) = \phi(x - \theta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(x - \theta)^2\right\};$$

$$L_1 = L(\theta; x = 2.45) = \phi(x - \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(2.45 - \theta)^2\right\};$$

$$L_2 = L(\theta; 0.9 < x < 4) = \Phi(4 - \theta) - \Phi(0.9 - \theta);$$

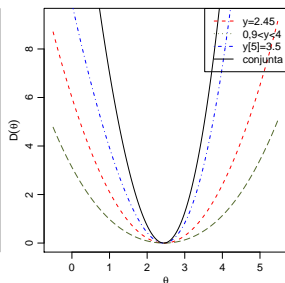
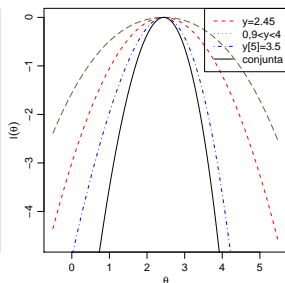
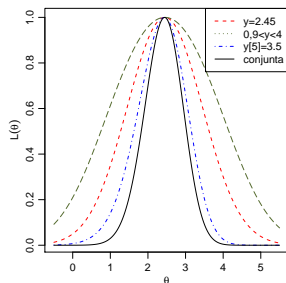
$$L_3 = L(\theta; x_{(5)} = 3.5) = n\{\Phi(x_{(n)} - \theta)\}^{n-1}\phi(x_{(n)} - \theta).$$

Para última - argumento multinomial e com

$$F(y) = P(X_{\{n\}} \leq y) = P[X_{\{i\}} < y \forall i \neq n \text{ e } X_{\{n\}} = y]$$

Verossimilhança e Informação (cont)

```
L1 <- function(theta) dnorm(2.45, m=theta, sd=1)
L2 <- function(theta)
  pnorm(4,mean=theta,sd=1)-pnorm(0.9,mean=theta,sd=1)
L3 <- function(theta)
  5*pnorm(3.5,m=theta,s=1)^4 * dnorm(3.5,m=theta,s=1)
```



Formas alternativas

- Verossimilhança:

$$L(\theta)$$

- Verossimilhança Relativa:

$$LR(\theta) = \frac{L(\theta)}{L(\hat{\theta})}$$

- log-Verossimilhança:

$$l(\theta) = \log\{L(\theta)\}$$

- Deviance*:

$$D(\theta) = -2 \log\{LR[\theta]\} = -2\{l[\theta] - l[\hat{\theta}]\}$$

$$\text{EMV: } \hat{\theta} = \sup_{\Theta} L[\theta]$$

$$\text{Quando possível obtido por: } \hat{\theta} = \max_{\Theta} l[\theta]$$

Exemplo: distribuição Poisson

$$L[\theta] = \frac{\exp\{-n\theta\}\theta^{n\bar{Y}}}{\prod_{i=1}^n Y_i!}$$

$$LR[\theta] = \exp\{-n(\theta - \hat{\theta})\}(\theta/\hat{\theta})^{n\bar{Y}}$$

$$l[\theta] = -n(\theta + \bar{Y} \log(\theta) - \overline{\log(Y_i!)})$$

$$D(\theta) = -2n\{(\theta - \hat{\theta}) - \bar{Y} \log(\theta/\hat{\theta})\}$$

Para uma a.a. de observações pontuais:

$$\hat{\theta} = \bar{Y}$$

Exemplo: Distribuição Poisson

1 Código 1

```

veroPois <- function(par, dados, tipo, maxlogL){
  tipo = match.arg(tipo, choices=c("L","LR","logL","dev"))
  ll <- sapply(par, function(p) sum(dpois(dados, lambda=p,
                                         log=TRUE)))

  return(switch(tipo, "L" = exp(ll),
                  "LR" = exp(ll-maxlogL),
                  "logL" = ll,
                  "dev" = 2*(maxlogL-ll)))}

```

2 Código 2

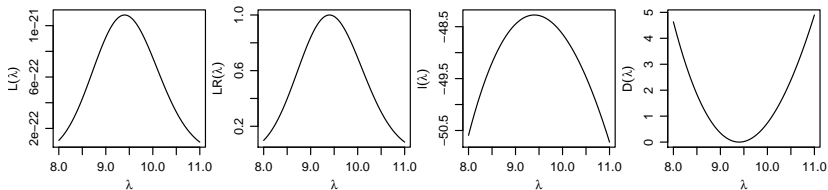
```

veroPois <- function(par, amostra, tipo="logL", maxlogL){
  tipo = match.arg(tipo, choices=c("L","LR","logL","dev"))
  ll <- with(amostra, -n*par + soma * log(par))
  return(switch(tipo, "L" = exp(ll),
                  "LR" = exp(ll-maxlogL),
                  "logL" = ll,
                  "dev" = 2*(maxlogL-ll)))}

```


Exemplo: Distribuição Poisson (cont)

```
mll <- veroPois(emv, amostra=am, tipo="logL")
...
curve(veroPois(x, amostra=am, tipo="dev", maxlogL=mll), 8, 11,
      ylab=expression(D(lambda)), xlab=expression(lambda))
```



Funções de Interesse

- Função escore: $U(\theta) = l'(\theta)$
- Hessiano e Informação observada: $I_O(\theta) = -H(\theta) = -l''(\theta)$
- Informação Esperada: $I_E(\theta) = E_Y[I_O(\theta)]$
- Estimadas: $I_O(\hat{\theta})$ e $I_E(\hat{\theta})$

Funções de Interesse

- Função escore: $U(\theta) = l'(\theta)$
- Hessiano e Informação observada: $l_O(\theta) = -H(\theta) = -l''(\theta)$
- Informação Esperada: $l_E(\theta) = E_Y[l_O(\theta)]$
- Estimadas: $l_O(\hat{\theta})$ e $l_E(\hat{\theta})$

Propriedades assintóticas:

- $\underline{\hat{\theta}} \sim NM_d(\underline{\theta}, l_E(\underline{\theta})^{-1})$
- Assintoticamente equivalentes:

$$\underline{\hat{\theta}} \sim NM_d(\underline{\theta}, l_E(\underline{\hat{\theta}})^{-1})$$

$$\underline{\hat{\theta}} \sim NM_d(\underline{\theta}, l_O(\underline{\theta})^{-1})$$

$$\underline{\hat{\theta}} \sim NM_d(\underline{\theta}, l_O(\underline{\hat{\theta}})^{-1}).$$

- $D(\underline{\theta}) = -2[l(\underline{\theta}) - l(\underline{\hat{\theta}})] \sim \chi_d^2$

Exemplo: Distribuição Poisson (cont)

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n \frac{\exp\{-\theta\} \theta^{Y_i}}{Y_i!} = \frac{\exp\{-n\theta\} \theta^{\sum_{i=1}^n Y_i}}{\prod_{i=1}^n Y_i!} = \frac{\exp\{-n\theta\} \theta^{n\bar{Y}}}{\prod_{i=1}^n Y_i!}$$

$$l(\theta) = -n\theta + \left(\sum_{i=1}^n Y_i\right) \log(\theta) - \sum_{i=1}^n \log Y_i! = -n(\theta - \bar{Y} \log(\theta) - \overline{\log Y_i!})$$

$$U(\theta) = -n + \frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{\theta} = -n\left(1 - \frac{\bar{Y}}{\theta}\right)$$

$$U(\hat{\theta}) = 0 \rightarrow \hat{\theta} = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{n} = \bar{Y}$$

$$I_O(\theta) = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{\theta^2} = \frac{n\bar{Y}}{\theta^2}; \quad I_E(\theta) = \frac{n}{\theta}; \quad I_O(\hat{\theta}) = I_E(\hat{\theta}) = \frac{n^2}{\sum_{i=1}^n Y_i} = \frac{n}{\bar{Y}}$$

$$V(\hat{\theta}) = I_E^{-1}(\theta) \approx I_O^{-1}(\theta) \approx I_O^{-1}(\hat{\theta}) = I_E^{-1}(\hat{\theta})$$

Exemplo: Distribuição Poisson (cont)

Função escore:

```
UPois <- function(lambda, amostra){
  return(with(amostra, n - soma/lambda))
}
```

Hessiano (negativo da Informação observada):

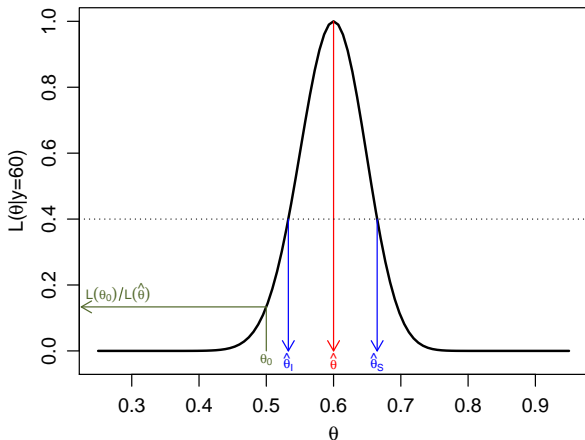
```
HPois <- function(lambda, amostra){
  return(with(amostra, -soma/lambda^2))
}
```

Informação esperada:

```
IePois <- function(lambda, amostra){
  return(with(amostra, n/lambda))
}
```

Estimação

Objetivos de inferência e a função de verossimilhança



Obtendo o EMV

- analiticamente:
estudando comportamento de $l(\theta)$ ou resolvendo $U(\theta) = 0$
- numericamente (otimização/aproximações numéricas)
 - Solução da(s) equação(ões) de estimação (função escore)
 - com uso de derivadas (ex: Newton-Raphson)
 - sem uso de derivadas (ex: Brent)
 - Maximização da função de (log)-verossimilhança
- Outros (ex: EM)
- Simulação (ex: verossimilhança Monte Carlo, *data-cloning*, ...)
- Aproximações da verossimilhança (pseudo-verossimilhanças)

Estimadores e Inferência

- Análogos para distribuições *posteriori* em Inferência Bayesiana
- maximização numérica: mais comum em EMV
- simulação: mais usual em Inferência Bayesiana

EMV

Newton Raphson: expansão (Taylor) de 1ª ordem de $U(\theta)$:

$$\lambda^{r+1} = \lambda^r - \frac{U(\lambda)}{H(\lambda)}$$

```
maxit <- 100; lambdaNR <- 5; iter <- 0; d <- 1
while(d > 1e-12 & iter <= maxit){
  lambdaNR.new <-
    lambdaNR - UPois(lambdaNR, am)/HPois(lambdaNR, am)
  d <- abs(lambdaNR - lambdaNR.new)
  lambdaNR <- lambdaNR.new ; iter <- iter + 1
}
c(lambdaNR, iter)
```

Exemplo: Distribuição Poisson (cont)

- Solução de equação $U(\theta) = 0$:

```
uniroot(UPois, interval=range(y), amostra=am)$root
```

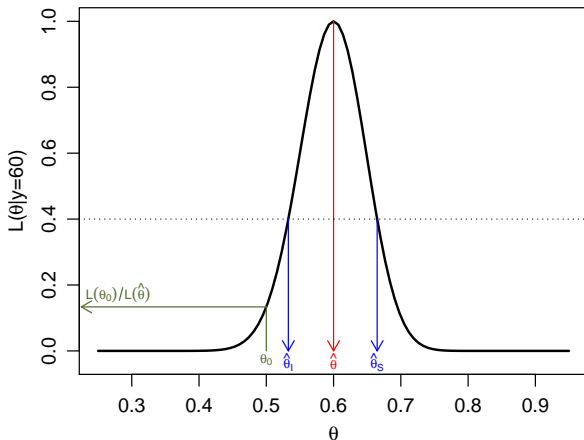
- Maximização da verossimilhança

```
optimize(veroPois, interval=range(y), maximum=TRUE, amostra=am)
optim(par = median(y), fn=veroPois, control=list(fnscale=-1),
      amostra=am, hessian = TRUE)
```

- uso do gradiente: argumento `gr = Upois`
- pode retornar hessiano estimado
($H(\hat{\theta}) = -I_O(\hat{\theta})$ obtido numericamente)

Intervalo de Confiança

Objetivos de inferência e a função de verossimilhança



Estimação por Intervalo

Definição informal:

*Região de valores do parâmetro com compatibilidade **aceitável** com os dados .*

Definição do "ponto de corte" que define a região por:

- evidência relativa em $LR(\theta)$:
- comportamento assintótico $D(\theta) \sim \chi_p^2$:
- interpretação probabilística direta em Inf. Bayesiana (quantis ou HPD)

Ou seja, evidência avaliada por:

- analogia sobre diferenças em $LR(\theta)$, $l(\theta)$ ou $D(\theta)$
- referência probabilística

OBS: $LR(\theta)$ e $D(\theta)$ são adimensionais.

Relações entre critérios de corte

- $LR(\theta) \geq r$ na função de verossimilhança relativa
- $l(\hat{\theta}) - l(\theta) \geq c$ na função de log-verossimilhança
- $D(\theta) \leq c^*$ na função deviance

Relações entre critérios de corte

- $LR(\theta) \geq r$ na função de verossimilhança relativa
- $l(\hat{\theta}) - l(\theta) \geq c$ na função de log-verossimilhança
- $D(\theta) \leq c^*$ na função deviance

$$LR(\theta) \geq r$$

$$l(\hat{\theta}) - l(\theta) \leq -\log(r) = c$$

$$D(\theta) = -2[l(\theta) - l(\hat{\theta})] \leq -2\log(r) = c^*$$

$$c^* = 2c = -2\log(r) \rightarrow r = e^{-c} = e^{-c/2}$$

Relações entre critérios de corte

- $LR(\theta) \geq r$ na função de verossimilhança relativa
- $l(\hat{\theta}) - l(\theta) \geq c$ na função de log-verossimilhança
- $D(\theta) \leq c^*$ na função deviance

$$LR(\theta) \geq r$$

$$l(\hat{\theta}) - l(\theta) \leq -\log(r) = c$$

$$D(\theta) = -2[l(\theta) - l(\hat{\theta})] \leq -2\log(r) = c^*$$

$$c^* = 2c = -2\log(r) \rightarrow r = e^{-c} = e^{-c/2}$$

$$D(\theta) \approx I_o(\hat{\theta})(\theta - \hat{\theta})^2 \sim \chi^2(1)$$

$$\sqrt{D[\theta]} \approx I_o^{1/2}(\hat{\theta})(\theta - \hat{\theta}) \sim N(0, 1)$$

c^* é um quantil da $\chi^2_{(1)}$ ou, equivalentemente,
 $\sqrt{c^*}$ é um quantil da $N(0,1)$.

Relações entre critérios de corte

$$c^* = 2c = -2 \log(r) \longrightarrow r = e^{-c} = e^{-c/2}$$

Relações entre intervalos baseados no corte na $LR[\theta]$ e por limites de probabilidade.

r	c	c^*	$z = \sqrt{c^*}$	$P[Z < \sqrt{c^*}]$
50%	0,693	1,386	1,177	0,761
26%	1.347	2.694	1,641	0,899
15%	1,897	3,794	1,948	0,949
3,6%	3,324	6,648	2,578	0,990

analogia...



Limites do Intervalo

1 Solução de equação (analítica ou numérica)

- $LR(\theta) = r$
- $l(\hat{\theta}) - l(\theta) = c$
- $D(\theta) = c^*$

Limites do Intervalo

1 Solução de equação (analítica ou numérica)

- $LR(\theta) = r$
- $I(\hat{\theta}) - I(\theta) = c$
- $D(\theta) = c^*$

2 Aproximação quadrática (Taylor)

$$D(\theta) = -2[I(\theta) - I(\hat{\theta})] =$$

$$= -2 \left\{ [I(\hat{\theta}) + (\theta - \hat{\theta})I'(\hat{\theta}) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^2 I''(\hat{\theta})] - I(\hat{\theta}) \right\}$$

$$D(\theta) = -(\theta - \hat{\theta})^2 I''(\hat{\theta}) \leq c^*$$

$$\tilde{\theta} = \hat{\theta} \pm \sqrt{\frac{c^*}{-I''(\hat{\theta})}}$$

Limites do Intervalo

1 Solução de equação (analítica ou numérica)

- $LR(\theta) = r$
- $l(\hat{\theta}) - l(\theta) = c$
- $D(\theta) = c^*$

2 Aproximação quadrática (Taylor)

$$D(\theta) = -2[l(\theta) - l(\hat{\theta})] =$$

$$= -2 \left\{ [l(\hat{\theta}) + (\theta - \hat{\theta})l'(\hat{\theta}) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^2 l''(\hat{\theta})] - l(\hat{\theta}) \right\}$$

$$D(\theta) = -(\theta - \hat{\theta})^2 l''(\hat{\theta}) \leq c^*$$

$$\tilde{\theta} = \hat{\theta} \pm \sqrt{\frac{c^*}{-l''(\hat{\theta})}}$$

3 equivalência com à Distribuição assintótica: $\hat{\theta} \sim NM_d(\underline{\theta}, I_E(\underline{\theta}))$

Exemplo: Exponencial (i.i.d.)

$$f(y_i, \theta) = \theta \exp\{-\theta y_i\} \quad y > 0; \theta > 0$$

$$F(y_i, \theta) = 1 - \exp\{-\theta y_i\} \quad y > 0; \theta > 0$$

$$L(\theta) = \theta^n \exp\{-\theta n\bar{y}\}$$

$$l(\theta) = n \log(\theta) - \theta n\bar{y}$$

$$U(\theta) = \frac{n}{\theta} - n\bar{y}$$

$$H(\theta) = -\frac{n}{\theta^2} \quad (\text{depende do valor de } \theta!!)$$

$$\hat{\theta} = 1/\bar{y}$$

Exemplo: Exponencial (cont)

Intervalos de confiança

- 1 Corte na deviance: (solução apenas numericamente)

$$D(\theta) = 2n[\log(\hat{\theta}/\theta) + \bar{y}(\theta - \hat{\theta})] \leq c^*$$

Exemplo: Exponencial (cont)

Intervalos de confiança

- ① Corte na deviance: (solução apenas numericamente)

$$D(\theta) = 2n[\log(\hat{\theta}/\theta) + \bar{y}(\theta - \hat{\theta})] \leq c^*$$

- ② Aproximação quadrática:

$$D(\theta) \approx n \left(\frac{\theta - \hat{\theta}}{\hat{\theta}} \right)^2$$

$$\left(\hat{\theta}_L \approx \hat{\theta}(1 - \sqrt{c^*/n}) , \hat{\theta}_U \approx \hat{\theta}(1 + \sqrt{c^*/n}) \right)$$

Exemplo: Exponencial (cont)

Intervalos de confiança

- 1 Corte na deviance: (solução apenas numericamente)

$$D(\theta) = 2n[\log(\hat{\theta}/\theta) + \bar{y}(\theta - \hat{\theta})] \leq c^*$$

- 2 Aproximação quadrática:

$$D(\theta) \approx n \left(\frac{\theta - \hat{\theta}}{\hat{\theta}} \right)^2$$

$$(\hat{\theta}_L \approx \hat{\theta}(1 - \sqrt{c^*/n}), \hat{\theta}_U \approx \hat{\theta}(1 + \sqrt{c^*/n}))$$

- 3 Distribuição assintótica: $I_E^{-1}(\theta) \approx I_O^{-1}(\hat{\theta}) = \hat{\theta}^2/n$

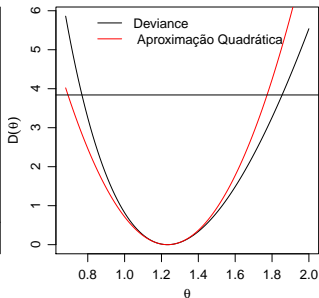
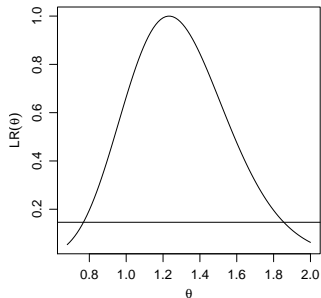
$$\hat{\theta} \pm z_{\alpha/2} \sqrt{V(\hat{\theta})}$$

$$\hat{\theta}_I = \hat{\theta} - z_{\alpha} \hat{\theta} / \sqrt{n} \quad \text{e} \quad \hat{\theta}_{II} = \hat{\theta} + z_{\alpha} \hat{\theta} / \sqrt{n}$$

Exemplo: Distribuição Exponencial (cont)

```
ICdevExp <- function(theta, theta.hat, y, nivel=0.95){
  n <- length(y)
  dv <- 2*n*( log( theta.hat/theta) + mean(y)*(theta- theta.hat))
  return(dv - qchisq(nivel,df=1))
}
```

```
require(rootSolve)
uniroot.all(ICdevExp, interval=c(0,10), theta.hat=1/mean(y), y=y)
```



Reparametrização

Caso univariado (ou reparametrização 1-1)

$$\phi = g(\theta)$$

Como fazer inferências sobre ϕ ?

- estimação pontual
- estimação por intervalo
- testes de hipótese

Um resultado fundamental: **invariância da verossimilhança**:

$$l(\phi_i) = l(g(\theta_i)) = l(\theta_i)$$

Reparametrização

Duas alternativas iniciais:

① Reescrever a função de verossimilhança e “recomeçar” do zero:

- Pontual: $\hat{\phi} = \operatorname{argmax}\{l(\phi)\}$
- Intervalar:

$$(\hat{\phi}_I, \hat{\phi}_S) \text{ baseado em } l(\phi) \quad (1)$$

$$(\tilde{\phi}_I, \tilde{\phi}_S) \text{ baseado em } \tilde{l}(\phi) \quad (2)$$

② “Aproveitar” resultados da inferência já obtida para θ :

- Pontual: $\hat{\phi} = g(\hat{\theta})$ (**invariância**)
- Intervalar:

$$(g(\hat{\theta}_I), g(\hat{\theta}_S)) \text{ transformação dos limites em } l(\theta) \text{ (**invariância**)} \quad (3)$$

$$(g(\tilde{\theta}_I), g(\tilde{\theta}_S)) \text{ transformação dos limites em } \tilde{l}(\theta) \quad (4)$$

Estimativas pontuais: iguais em ambos casos

Estimativas intervalares: (1) = (3) e tem-se então três possibilidades

Reparametrização

- Resultados exatos baseados na verossimilhança:

- $\hat{\phi} = g(\hat{\theta})$
- IC por corte: $(\hat{\phi}_I, \hat{\phi}_S) = (g(\hat{\theta}_I), g(\hat{\theta}_S))$

- Aproximações quadráticas da verossimilhança

- aproximação $\tilde{l}(\theta) : (g(\tilde{\theta}_I), g(\tilde{\theta}_S))$
- aproximação $\tilde{l}(\phi) : (\tilde{\phi}_I, \tilde{\phi}_S)$

- Distribuição assintótica do estimador pelo **Método delta**:

$$\text{Var}(\hat{\phi}) = [g'(\theta)]^2 [I_E(\theta)]^{-1} \longrightarrow \left[\text{se}(\hat{\phi}) = |g'(\theta)| [I_E(\theta)]^{-1/2} \right]$$

$$\text{Assintoticamente: } \hat{\phi} = g(\hat{\theta}) \sim N(\phi, [g'(\theta)]^2 [I_E(\theta)]^{-1})$$

Método delta

$$\phi = g(\theta)$$

Teorema

(Método delta). Seja $\hat{\theta}$ um estimador de θ para uma amostra de tamanho n tal que

$$\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta) \rightarrow N(0, \sigma_{\theta}^2).$$

Então, para qualquer função $g(\cdot)$ que é diferenciável ao redor de θ e $h'(\theta) \neq 0$, tem-se que

$$\sqrt{n}(g(\hat{\theta}) - g(\theta)) \rightarrow N(0, \sigma_{\theta}^2 |h'(\theta)|^2).$$

Em termos do TCL, aplica-se a funções da média amostral.

Produz uma aproximação quadrática da verossimilhança de ϕ .

Reparametrização

- **ideal**: Resultados exatos baseados na verossimilhança:
- **muito utilizado**: Resultados baseados no método delta
- **conveniente**: aproximações baseadas nas aproximações quadráticas das verossimilhanças $\tilde{l}(\theta)$ ou $\tilde{l}(\phi)$
- Se transformação $g(\cdot)$ é não linear, a invariância **não é válida** para a aproximação quadrática, ou seja:

$$\{g(\tilde{\theta}_I), g(\tilde{\theta}_S)\} = \{g(\hat{\theta} - z_{\alpha/2}[I_E(\hat{\theta})]^{-1/2}), g(\hat{\theta} + z_{\alpha/2}[I_E(\hat{\theta})]^{-1/2})\} \neq \{g(\hat{\theta}) - z_{\alpha/2}|g'(\theta)|[I_E(\hat{\theta})]^{-1/2}, g(\hat{\theta}) + z_{\alpha/2}|g'(\theta)|[I_E(\hat{\theta})]^{-1/2}\} = (\tilde{\phi}_I, \tilde{\phi}_S)$$

- se $l(\theta)$ é menos assimétrica: usar $(g(\tilde{\theta}_I), g(\tilde{\theta}_S))$
se $l(\phi)$ é menos assimétrica: usar $(\tilde{\phi}_I, \tilde{\phi}_S)$

Recomendações

- **Melhor abordagem:** (mais geral e acurácia)
IC's baseados verossimilhança/deviance (muitas vezes só obtidos numericamente)
- **Intervalos assintóticos** (utilizam $se(\hat{\theta})$, obtenção a partir da aproximação quadrática, formas fechadas)
- Escolher parametrização da função que forneça uma boa aproximação quadrática
- IC's para funções dos parâmetros: obtenção pelo método delta ou direta se aproximadamente quadrática

Reparametrização

Por que reparametrizar (ou considerar resultados ra reparametrização)?

- Interpretabilidade de ϕ
- "Melhor" formato da função de verossimilhança com melhor comportamento de métodos numéricos.
- **Predição!!**
uma predição de um modelo pode ser vista como uma reparametrização!

Condições de regularidade

- Θ é finito dimensional e θ é interior a Θ
- primeiras três derivadas de $l(\theta)$ na vizinhança de θ
- amplitude não depende de θ
- $l(\theta) \approx$ quadrática para $n \rightarrow \infty$, passando a depender apenas da posição e curvatura no EMV
- ... $I_E(\theta)$ precisa ser inversível

Exemplo: Exponencial (cont)

Reparametrização

$$\phi = P[Y \leq u] = 1 - \exp\{-\theta u\}$$

- Obter $se(\hat{\phi})$
- Três intervalos possíveis:

$$(\hat{\phi}_I, \hat{\phi}_S) : (g(\hat{\theta}_I), g(\hat{\theta}_S))$$

$$(\tilde{\phi}_I, \tilde{\phi}_S) : \hat{\phi} \pm z_{\alpha/2} se(\hat{\phi})$$

$$(1 - \exp\{-\tilde{\theta}_S u\}, 1 - \exp\{-\tilde{\theta}_I u\}) : (g(\tilde{\theta}_I), g(\tilde{\theta}_S))$$

- Comparação gráfica das funções e das taxas de cobertura (simulação)



Exemplo: Distribuição Exponencial (cont)

Redefinindo

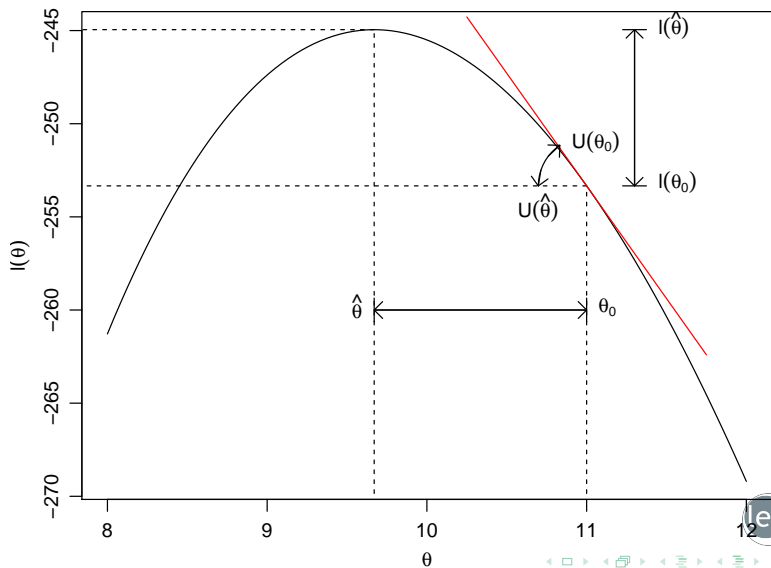
```
ICdevExp <- function(theta, theta.hat, y, nivel=0.95){
  n <- length(y)
  dv <- 2*n*( log( theta.hat/theta) + mean(y)*(theta- theta.hat))
  return(dv - qchisq(nivel,df=1))
}
```

```
require(rootSolve)
uniroot.all(ICdevExp, interval=c(0,10), theta.hat=1/mean(y), y=y)
```

```
ICdevExp <- function(theta, amostra, nivel=0.95){
  ## amostra é um vetor com elementos n e mean(y), nesta ordem
  n <- amostra[1]
  med <- amostra[2]
  dv <- 2*n*(-log(med*theta) + med*theta - 1)
  return(dv - qchisq(nivel, df=1))
}
```

```
am <- c(length(y), mean(y))
uniroot.all(ICdevExp, interval=c(0,10), amostra=am)
```

Teste de Hipótese



Teste de Hipótese

- Teste razão de verossimilhança

```
trv <- function(Est, H0, alpha, ...){
  critico <- qchisq(1-alpha, df=1)
  est.calc <- Est(H0, ...)
  print(iffelse(est.calc < critico, "Aceita H0", "Rejeita H0"))
  return(c(est.calc,critico))}
```

- Teste Wald

```
wald <- function(H0, EMV, V.EMV, alpha){
  critico <- qnorm(1-alpha/2)
  Tw <- (EMV - H0)/sqrt(V.EMV)
  print(iffelse(Tw < critico, "Aceita H0", "Rejeita H0"))
  return(c(Tw,critico))
}
```

- Teste Escore

```
escore <- function(H0, U, Ie, alpha, ...){
  critico <- qnorm(1-alpha/2)
  Te <- U(H0,...)/sqrt(Ie(H0,...))
  print(iffelse(Te < critico, "Aceita H0", "Rejeita H0"))
  return(c(Te,critico))}
```

Exemplo: Poisson

TRV

```
Est <- function(H0, x){
  n <- length(x)
  EMV <- mean(x)
  lv <- 2*n*(( H0 - EMV) + EMV*log(EMV/H0))
  return(lv)
}
trv(Est = Est, H0=8, alpha = 0.05, x=x)
```

Wald

```
wald(H0=8, EMV = mean(x), V.EMV = mean(x)/length(x), alpha=0.05)
```

Escore

```
fc.escore <- function(lambda,x){
  n <- length(x)
  esco <- -n + sum(x)/lambda
  return(esco)}
Ie <- function(lambda,x){
  n <- length(x)
  I <- n/lambda
  return(I)}
escore(H0 = 8, U = fc.escore, Ie = Ie, alpha=0.05, x=x)
```

Exemplo: Distribuição Normal

log-Verossimilhança

$$l(\mu, \sigma) = -\frac{n}{2} \log 2\pi - n \log \sigma - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2.$$

Score

$$U(\mu) = \frac{\partial l(\mu, \sigma)}{\partial \mu} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{\sigma^2} - \frac{n\mu}{\sigma^2}$$

$$U(\sigma) = -\frac{n}{\sigma} + \frac{1}{\sigma^3} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2.$$

EMV

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \quad \text{e} \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2}{n}.$$

Informação

$$I_O(\hat{\mu}, \hat{\sigma}) = \begin{bmatrix} \frac{n}{\hat{\sigma}^2} & 0 \\ 0 & \frac{2n}{\hat{\sigma}^2} \end{bmatrix}.$$

Intervalos de confiança

Conjuntos

- corte

$$D(\mu, \sigma) = 2\left[n \log\left(\frac{\sigma}{\hat{\sigma}}\right) + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2 - \frac{1}{2\hat{\sigma}^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu})\right]$$

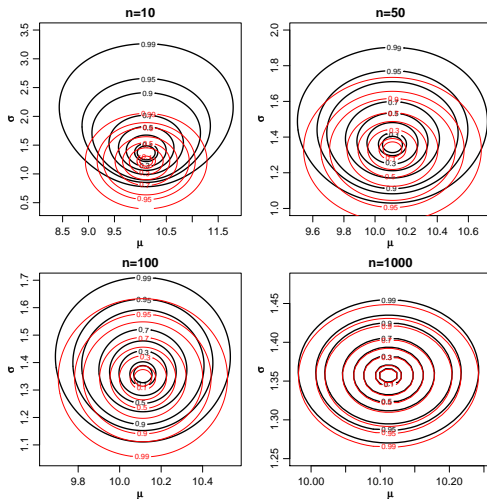
- elipse (aproximação quadrática)

$$D(\mu, \sigma) \approx (\underline{\theta} - \hat{\theta})^\top I_o(\hat{\theta})(\underline{\theta} - \hat{\theta}).$$

- assintótico

$$\begin{bmatrix} \hat{\mu} \\ \hat{\sigma} \end{bmatrix} \sim NM_2 \left(\begin{bmatrix} \mu \\ \sigma \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \hat{\sigma}^2/n & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}^2/2n \end{bmatrix} \right)$$

Exemplo: Distribuição Normal (cont)



Intervalos de confiança

Parâmetros de interesse e de inconveniência (*nuisance*): (θ, ψ)

Soluções usuais:

- Condicionando no EMV : $L(\theta) = L(\theta, \hat{\psi}) \equiv [Y|\theta, \hat{\psi}]$
- Verossimilhança Perfilhada : $L(\theta) \equiv L[\theta, \hat{\psi}_\theta]$
- Verossimilhanças marginais integradas Bayesianas :

$$L(\theta) = \int [Y|\theta, \psi][\psi]d\psi$$

Intervalos de confiança

Parâmetros de interesse e de inconveniência (*nuisance*): (θ, ψ)

Soluções usuais:

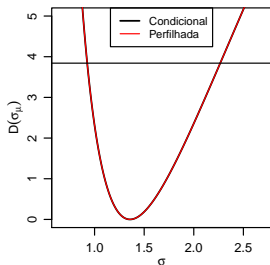
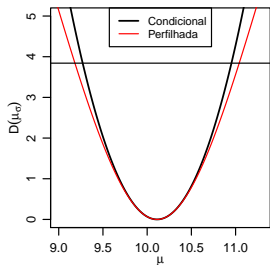
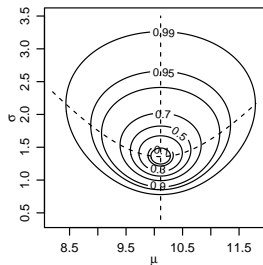
- Condicionando no EMV : $L(\theta) = L(\theta, \hat{\psi}) \equiv [Y|\theta, \hat{\psi}]$
- Verossimilhança Perfilhada : $L(\theta) \equiv L[\theta, \hat{\psi}_\theta]$
- Verossimilhanças marginais integradas Bayesianas :
 $L(\theta) = \int [Y|\theta, \psi][\psi]d\psi$

Exemplo Normal: $1/\sigma^2 \sim G(a, b)$

$$f(y|\mu) = \frac{\Gamma(n/2 + 1)}{\pi^{n/2} \Gamma(a) (\sum_i (y_i - \mu)^2 + 2b)^{n/2+a}}$$

Integrações analíticas e por simulação

Exemplo: Distribuição Normal (cont)



Exemplo: Distribuição Normal (cont)

```
pl.mu <- function(sigma, mu, dados){
  pll <- sum(dnorm(dados, mean=mu, sd=sigma, log=TRUE))
  return(pll)}
##
pl.sigma <- function(mu, sigma, dados){
  pll <- sum(dnorm(dados, mean=mu, sd=sigma, log=TRUE))
  return(pll)}
```

```
grid.mu <- seq(9, 11.3, length=200)
grid.sigma <- seq(0.65, 2.7, length=200)
## Condicionais:
mu.cond <- sapply(grid.mu, pl.sigma, sigma=sqrt(var(y10)*9/10), dados=y10)
sigma.cond <- sapply(grid.sigma, pl.mu, mu=mean(y10), dados=y10)

mu.perf <- matrix(0, nrow=length(mu), ncol=2)
for(i in 1:length(mu)){
  mu.perf[i,] <- unlist(optimize(pl.mu,c(0,200),
                               mu=mu[i],dados=y10,maximum=TRUE))}
sigma.perf <- matrix(0, nrow=length(sigma), ncol=2)
for(i in 1:length(sigma)){
  sigma.perf[i,] <- unlist(optimize(pl.sigma,c(0,1000),
                                   sigma=sigma[i],dados=y10,maximum=TRUE))}
```

Exemplo: Distribuição Normal (Dados intervalares)

Dados intervalares e parâmetros $\theta = (\mu, \sigma)$

observações "pontuais":

72,6 81,3 72,4 86,4 79,2 76,7 81,3 ;

observações intervalares:

uma observação com valor acima de 85,
 uma observação com valor acima de 80,
 quatro observações com valores entre 75 e 80,
 seis observações com valores abaixo de 75.

Contribuições para verossimilhança

$$L(\theta) = f(y_i) \text{ para } y_i \text{ pontual,}$$

$$L(\theta) = 1 - F(85) \text{ para } y_i > 85,$$

$$L(\theta) = 1 - F(80) \text{ para } y_i > 80,$$

$$L(\theta) = F(80) - F(75) \text{ para } 75 < y_i < 80,$$

$$L(\theta) = F(75) \text{ para } y_i < 75.$$

Exemplo: Distribuição Normal (Dados intervalares)

Expressão da verossimilhança no exemplo:

$$L(\theta) = \left(\prod_{i=1}^7 f(y_i) \right) \cdot (1 - F(85)) \cdot (1 - F(80)) \cdot (F(80) - F(75))^4 \cdot (F(75))^6$$

De forma mais geral para n_p dados pontuais e n_I dados intervalares com valores entre a_i e b_i :

$$\begin{aligned} L(\theta) &= \prod_{i=1}^{n_p} f(y_i) \cdot \prod_{i=1}^{n_I} (F(b_i) - F(a_i)) \\ &= \prod_{i=1}^{n_p} \phi\left(\frac{y_i - \mu}{\sigma}\right) \cdot \prod_{i=1}^{n_I} \left(\Phi\left(\frac{a_i - \mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{b_i - \mu}{\sigma}\right)\right) \end{aligned}$$

No exemplo:

a	85	80	75	75	75	75	$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$
b	∞	∞	80	80	80	80	75	75	75	75	75	75

Dados intervalares (cont)

$$l(\theta) = \sum_{i=1}^{n_p} \log \left(\phi \left(\frac{y_i - \mu}{\sigma} \right) \right) + \sum_{i=1}^{n_I} \log \left(\left(\Phi \left(\frac{a_i - \mu}{\sigma} \right) - \Phi \left(\frac{b_i - \mu}{\sigma} \right) \right) \right)$$

```
nllnormI <- function(par, xp, XI) {
  ll1 <- sum(dnorm(xp, mean = par[1], sd = par[2], log = T))
  L2 <- pnorm(XI, mean = par[1], sd = par[2])
  ll2 <- sum(log(L2[, 2] - L2[, 1]))
  return(-(ll1 + ll2))
}
```

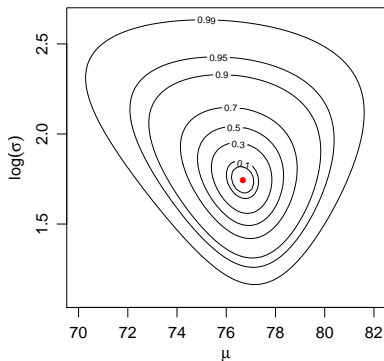
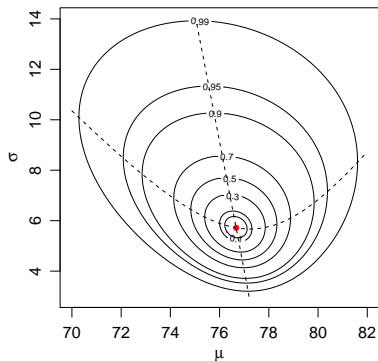
```
      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10] [,11] [,12]
[1,]   85   80   75   75   75   75 -Inf -Inf -Inf -Inf -Inf -Inf
[2,]  Inf  Inf   80   80   80   80  75  75  75  75  75  75
```

```
ini <- c(mean(y), sd(y))
ests <- optim(, nllnormI, x=y, XI=yI)$par
```


Dados intervalares (cont)

Função deviance genérica.

```
devFun <- function(theta, est, llFUN, ...){
  return(2 * (llFUN(theta, ...) - llFUN(est, ...)))
}
devSurf <- Vectorize(function(x,y, ...) devFun(c(x,y), ...))
```



Dados intervalares (cont)

Código mais geral e cuidadoso

```
nllnormI <- function(par, xp, XI, logsigma=FALSE){
  if(logsigma) par[2] <- exp(par[2])
  l11 <- ifelse(missing(xp), 0,
               sum(dnorm(xp, mean=par[1], sd=par[2], log=T)))
  if(missing(XI)) l12 <- 0
  else{
    if(ncol(XI) != 2 || any(XI[,2] <= XI[,1]))
      stop("XI deve ser matrix com 2 colunas com XI[,2] > XI[,1]")
    L2 <- pnorm(XI, mean=par[1], sd=par[2])
    l12 <- sum(log(L2[,2] - L2[,1]))
  }
  return(-(l11 + l12))
}
```

Outros exemplos (texto)

- 1 AR1
- 2 Outro exemplo de reparametrização
- 3 Gamma
- 4 Binomial Negativa
- 5 Processo de Poisson não-homogêneo
- 6 Modelo espacial Geoestatístico
- 7 Códigos Genéricos:
 - mle (**stat4**) e mle2 (**bbmle**)
 - profile e confint