Elementos de Computação em R para Inferência Estatística

PJ

5 de novembro de 2013

1 Inferência para parâmetros da distribuição Gama

1.1 Densidade

Parametrização 1:
Esta é a parametrização utilizada nas funções `{r,p,q,d}gamma()` do R com:
$\alpha = shape = a$ e $\beta = scale = s$ ($rate = 1/scale$).

Note que $a = 0$ define uma fdp trivial com toda massa de probabilidade em zero. Existe um alerta importante na documentação da função sobre a capacidade do computador em representar pequenos valores que ocorrem para certos valores dos parâmetros:
`Note that for smallish values of shape (and moderate scale) a large parts of the mass of the Gamma distribution is on values of` x `so near zero that they will be represented as zero in computer arithmetic. So rgamma can well return values which will be represented as zero. (This will also happen for very large values of scale since the actual generation is done for scale=1.)`

Funções e expressões: densidade, esperança, variância, (log)-verossimilhança, escore e hessiano:

$$\begin{aligned} Y &\sim \mathrm{G}(\alpha, \beta) \\ f(y|\alpha,\beta) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\,\beta^{\alpha}}\; y^{\alpha-1}\; \exp\{-y/\beta\} \quad y \geq 0 \;\; \alpha \geq 0 \;\; \beta > 0 \\ E[Y] &= \alpha\beta \quad Var[Y] = \alpha\beta^2 \\ L((\alpha,\beta)|y) &= \left(\frac{1}{\Gamma(\alpha)\,\beta^{\alpha}}\right)^{n} \prod_{i=1}^{n} y_i^{\alpha-1}\; \exp\{-y_i/\beta\} \\ l((\alpha,\beta)|y) &= n\left(-\log(\Gamma(\alpha)) - \alpha\log(\beta) + (\alpha-1)\overline{\log(y)} - \bar{y}/\beta\right) \end{aligned} \tag{1}$$

Função escore:

$$\begin{cases} \frac{dl}{d\beta} &= n\left(-\frac{\alpha}{\beta} + \frac{\bar{y}}{\beta^2}\right) \\ \frac{d}{d\alpha} &= n\left(-\psi(\alpha) - \log(\beta) + \overline{\log y}\right) \end{cases} \tag{2}$$

em que $\psi(\alpha) = \frac{d}{d\alpha}\log(\Gamma(\alpha)) = \frac{\Gamma'(\alpha)}{\Gamma(\alpha)}$ é a *função digama* (calculada no R com função `digamma()`).

Hessiano:

$$H(\alpha,\beta) = \begin{bmatrix} \frac{d^2l}{d\beta^2} & \frac{d^2l}{d\alpha d\beta} \\ \frac{d^2l}{d\alpha d\beta} & \frac{d^2l}{d\alpha^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n\left(\frac{\alpha}{\beta^2} - 2\frac{\bar{y}}{\beta^3}\right) & -\frac{n}{\beta} \\ -\frac{n}{\beta} = -n\psi(\alpha) & \end{bmatrix} \tag{3}$$

em que $\psi_1(\alpha) = \frac{d^2}{dt^2}\log(\Gamma(\alpha))$ é a *função trigama* (calculada no R com função `trigamma()`).

Funções concentradas (perfilhadas):
Para este caso não existem expressões fechadas para o estimador de máxima verossimilhança. As funções dadas anteriormente são funções de dois parâmetros (α e β) mas, neste caso, é possível *reduzir a dimensionalidade* e escrevê-las como funções de apenas um parâmetro. Para isto considera-se o comportamento da função no estimador de máxima verossimilhança. Igualando a zero primeira função escore em **??** obtemos uma expressão fechada para um dos parâmetros dada por:

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \bar{y}. \tag{4}$$

Pode-se então isolar um dos parâmetros e reescrever as funções de verossimilhança, escore e hessiana como funções de apenas um parâmetro. Substituindo β por $\hat{\beta} = \bar{y}/\hat{\alpha}$ temos que a log-verossimilhança (1) pode ser escrita na forma concentrada (perfilhada) como função apenas do parâmetro α:

$$pl(\alpha|y) = l_{\hat{\beta}}(\alpha|y) = n\left(-\log(\Gamma(\alpha)) - \alpha(\log(\bar{y}) - \log(\alpha)) + (\alpha-1)\overline{\log(y)} - \alpha\right). \tag{5}$$

A função escore fica:

$$U_{\hat{\beta}}(\alpha) = n\left(-\psi(\alpha) - \log\bar{y} + \log(\alpha) + \overline{\log y}\right). \tag{6}$$

O hessiano para α é:

$$H_{\hat{\beta}}(\alpha) = n\left(-\psi_1(\alpha) + \frac{1}{\alpha}\right). \tag{7}$$

Alternativamente, substituindo $\alpha = \hat{\alpha} = \overline{y}/\hat{\beta}$ pode-se obter expressões para o parâmetro β

Obtenção das estimativas de máxima verossimilhança

O *EMV* é solução conjunta de

$$\begin{cases} \overline{\log y} - \log\beta + & = \psi(\bar{y}/\beta) \\ \hat{\alpha}\hat{\beta} & = \bar{y} \end{cases}$$

que neste caso devem ser obtidas por algorítimos numéricos. Diferentes algorítimos podem ser utilizados conforme será ilustrado mais adiante. Quatro opções serão consideradas:

1. algorítmos de maximização:
   (a) da log-verossimilhança de dois parâmetros,
   (b) da log-verossimilhança concentrada (de um parâmetro) com posterior substituição em (4) para obtenção da estimativa do outro parâmetro
2. algorítimos de solução de equações (obtidas igualando a zero as funções escore);
   (a) do sistema de equações de dois parâmetros,
   (b) do sistema concentrado (equação de um parâmetro) com posterior substituição em (4) para obtenção da estimativa do outro parâmetro.

Parametrização 2:

Rizzo (2008) e outros autores utilizam a parametrização com $r = \alpha, \lambda = 1/\beta$ em que λ é o parâmetro de taxa (*rate*). Esta é também a parametrização original do S e S-Plus.

Densidade, esperança, variância, (log)verossimilhança, escore e hessiano:

$$\begin{aligned} Y &\sim \mathrm{G}(r,\lambda) \\ f(y|r,\lambda) &= \frac{\lambda^r}{\Gamma(r)}\, y^{r-1}\, \exp\{-\lambda y\} \quad y \geq 0 \;\; r \geq 0 \;\; \lambda > 0 \\ E[Y] &= r/\lambda \quad Var[Y] = r/\lambda^2 \\ L((r,\lambda)|y) &= \left(\frac{\lambda^r}{\Gamma(r)}\right)^n \prod_{i=1}^n y_i^{r-1}\, \exp\{-\lambda y_i\} \\ l((r,\lambda)|y) &= n\left(r\log(\lambda) - \log(\Gamma(r)) + (r-1)\overline{\log(y)} - \lambda\bar{y}\right) \end{aligned} \tag{8}$$

Função escore:

$$\begin{cases} \frac{dl}{d\lambda} & = n\left(\frac{r}{\lambda} - \bar{y}\right) \\ \frac{d}{dr} & = n\left(\log(\lambda) - \frac{\Gamma'(r)}{\Gamma(r)} + \overline{\log y}\right) \end{cases}$$

Igualando as funções a zero, da primeira equação temos $\hat{\lambda} = \hat{r}/\bar{y}$. Substituindo λ por $\hat{\lambda}$ a segunda expressão é escrita como:

$$n\left(\log\frac{\hat{r}}{\bar{y}} + \overline{\log y} - \frac{\Gamma'(r)}{\Gamma(r)}\right) = 0$$

O *MLE* é solução conjunta de:

$$\begin{cases} \log\lambda + \overline{\log y} & = \psi(\lambda\bar{y}) \\ \bar{y} & = r/\lambda \end{cases} \tag{9}$$

em que $\psi(t) = \frac{d}{dt}\log(\Gamma(t)) = \frac{\Gamma'(t)}{\Gamma(t)}$ (função `digamma()`).

Parametrização 3:
Aitkin (2010) menciona duas parametrizações sendo a primeira, a mesma implementada no R, apontada como a mais usual, e uma segunda parametrizada por $r = \alpha$ e $\mu = \alpha\beta$.

Esta última parametrização tem propriedades interessantes para inferência. A primeira é a ortogonalidade entre r e μ na matriz de informação. Além disto em geral μ é o usualmente o parâmetro de interesse para inferências e r é um parâmetro *nuisance*. Finalmente a parametrização é adequada para modelagem estatística na qual usualmente se propõe um modelo de regressão para média μ, como por exemplo em modelos lineares generalizados (GLM).

Densidade, esperança, variância e verossimilhança:

$$\begin{aligned}
Y &\sim \mathrm{G}(r, \mu) \\
f(y|r,\mu) &= \frac{r^r}{\Gamma(r)\,\mu^r}\; y^{r-1}\; \exp\{-ry/\mu\} \quad y \geq 0 \;\; r \geq 0 \;\; \mu \geq 0 \\
E[Y] &= \mu \quad Var[Y] = \mu^2/r \\
L((r,\mu)|y) &= \left(\frac{r^r}{\Gamma(r)\mu^r}\right)^n \prod_{i=1}^{n} y_i^{r-1}\; \exp\{-ry_i/\mu\} \\
l((r,\mu)|y) &= n\left(r(\log(r) - \log(\mu)) - \log(\Gamma(r)) + (r-1)\overline{\log(y)} - \frac{r}{\mu}\bar{y}\right)
\end{aligned}$$

Função escore:

$$\begin{cases}
\frac{dl}{d\mu} & = n\left(-\frac{r}{\mu} + \frac{r\bar{y}}{\mu^2}\right) \\
\frac{d}{dr} & = n\left(\log(r) + 1 - \log(\mu) - \frac{\Gamma'(r)}{\Gamma(r)} + \overline{\log y} - \frac{\bar{y}}{\mu}\right)
\end{cases}$$

Igualando as funções a zero, da primeira equação temos $\hat{\mu} = \bar{y}$. Substituindo μ por $\hat{\mu}$ a segunda expressão é escrita como:

$$n\left(\log(\hat{r}) + 1 - \log(\bar{y}) - \frac{\Gamma'(\hat{r})}{\Gamma(\hat{r})} + \overline{\log y} - 1\right) = 0$$

O *MLE* é solução conjunta de:

$$\begin{cases}
\log\hat{r} - \psi(\hat{r}) & = \log\bar{y} - \overline{\log y} \\
\hat{\mu} & = \bar{y}
\end{cases}$$

em que $\psi(t) = \frac{d}{dt}\log(\Gamma(t)) = \frac{\Gamma'(t)}{\Gamma(t)}$ (calculado no R pela função `digamma()`).

1.2 Códigos R para obtenção das estimativas

Não é possível obter *MLE* em forma analítica fechada para ambos parâmetros da distribuição Gama sendo então necessário o uso de métodos numéricos para obter estimativas. Algumas abordagens numéricas possíveis são:

1. *via* solução de equações (função escore)
    a. conjunta para dois parâmetros: resolução numérica do sistema de duas equações
    b. por substituição: resolução numérica de uma equação para encontrar a estimativa de um parâmetro que é substituída na equação conhecida para obter a estimativa do outro parâmetro.
2. *via* maximização de função de log-verossimilhança
    a. maximização bidimensional (encontra numericamente estimativas dos 2 parâmetros)
    b. unidimensional (verossimilhança concentrada/perfilhada para 1 parâmetro, seguida de substituição para o outro parâmetro)

Gerando dados (simulados).
Estatísticas amostrais que são as quantidades calculadas com os dados utilizadas nas avaliações das funções.

```
> ## amostra = list(media, media.logs)
> am <- list(media=mean(dadosG),
+ media.logs = mean(log(dadosG)), n=length(dadosG))
```

Estimação utilizando métodos numéricos utilizando a **Parametrização 2**.

```
> set.seed(201107)
> dadosG <- rgamma(20, shape = 4.5, rate=2)
> hist(dadosG, prob=T, xlim=c(0,5), main="",
+      panel.first=lines(density(dadosG)));rug(dadosG)
> curve(dgamma(x, shape = 4.5, rate=2), 0, 5, add=T, lwd=2)
```

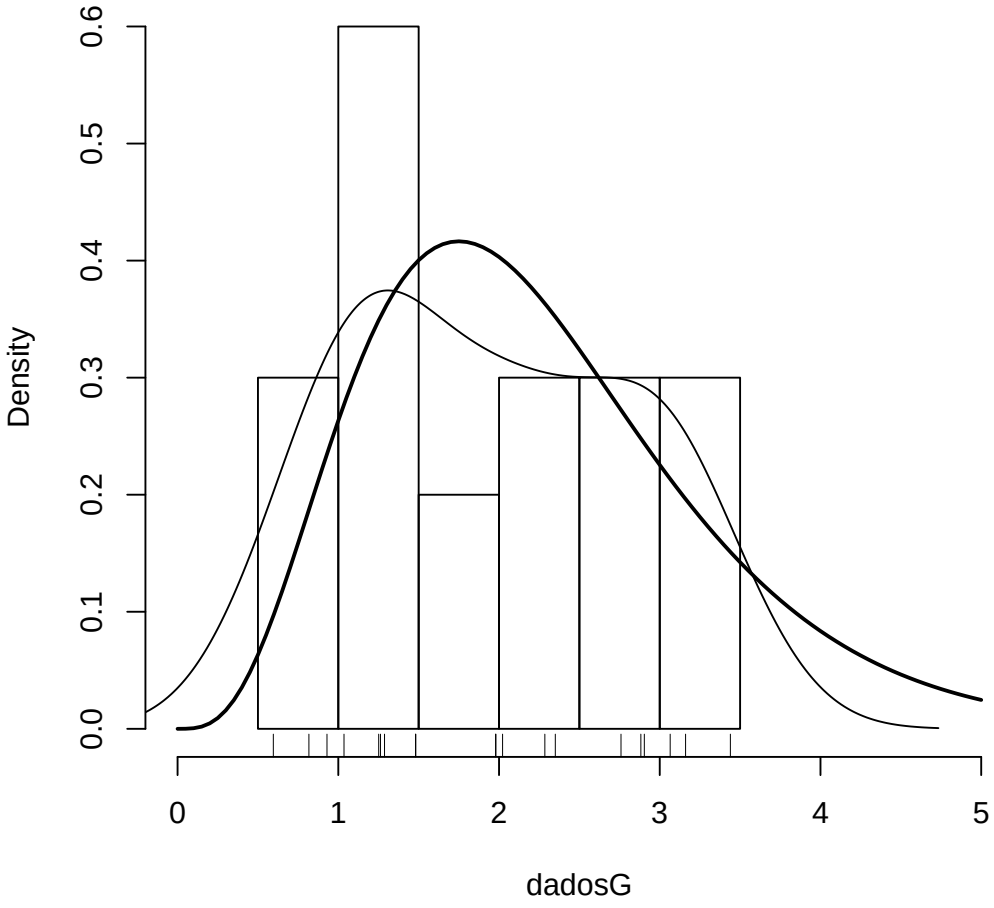


Figura 1: Histograma, densidade empírica e *rug* dos dados originais e densidade da distribuição simulada (linha grossa)

(1.a.) Equações de estimação Definimos uma função em R com sistema de equações definido em 9. As estimativas são dadas pela solução deste sistema que é obtida utilizando a função `multiroot()` do pacote **rootSolve**.

```
> Umat <- function(par, amostra){
+     lambda <- par[1] ; r = par[2]
+     UlamUr <- local({
+           c(n * ((r/lambda) - media),
+             n*(log(lambda) - digamma(lambda*media) + media.logs))
+     }, env=amostra)
+     return(UlamUr)
+ }
> #Umat(c(2,3), am)
> require(rootSolve)
> multiroot(f=Umat, start=c(1,1), amostra=am)

$root
[1] 2.408413 4.692590

$f.root
[1] -9.365272e-07  1.964257e-07

$iter
[1] 6

$estim.precis
[1] 5.664765e-07
```

(1.b.) Equações de estimação - substituição

$$\left(\log\frac{\hat{r}}{\bar{y}} + \overline{\log y} - \frac{\Gamma'(r)}{\Gamma(r)}\right) = 0 \quad \text{(numericamente)}$$

$$\hat{\lambda} = \hat{r}/\bar{y} \quad \text{(substituição)}$$

A função `uniroot()` pode ser usada para resolver numericamente uma equação.

```
> Ulam <- function(lambda, amostra){
+         with(amostra, digamma(lambda*media) - media.logs - log(lambda))
+ }
> (lambda.est <- uniroot(Ulam, lower=1e-3, upper=1e5, amostra=am)$root)

[1] 2.40842

> (r.est <- lambda.est * am$media)

[1] 4.692604
```

(2.a.) Maximização da função de log-verossimilhança (2 parâmetros) A função de (negativo) log-verossimilhança pode ser definida no R como uma função a 2 parâmetros da seguinte forma.

```
> neglLik <- function(par, amostra, modelo=2){
+   if(modelo == 1){
+     alpha <- par[1]; beta <- par[2]
+     ll <- with(amostra, n*(-alpha*log(beta) - log(gamma(alpha)) +
+           (alpha-1) * media.logs - media/beta))
+   }
+   if(modelo == 2){
+     r <- par[1]; lambda <- par[2]
+     ll <- with(amostra, n*(r*log(lambda) - log(gamma(r)) +
+           (r-1) * media.logs - lambda * media))
```

```
+   }
+   if(modelo == 3){
+     r <- par[1]; mu <- par[2]
+     ll <- with(amostra, n*(r*(log(r) - log(mu)) - log(gamma(r)) +
+           (r-1) * media.logs - (r/mu) * media))
+   }
+   return(-ll)
+ }
```

A seguir é mostrada a obtenção das estimativas em cada parametrização. Para impor limites no espaço paramétrico utiliza-se os argumentos `lower` e `upper` e `method="L-BFGS-B"`.

```
> (mod1 <- optim(c(1,1), neglLik, amostra=am, method="L-BFGS-B", modelo=1,
+           lower=c(0,0), upper=c(Inf, Inf))$par)

[1] 4.6924351 0.4152265

> (mod2 <- optim(c(1,1), neglLik, amostra=am, method="L-BFGS-B", modelo=2,
+           lower=c(0,0), upper=c(Inf, Inf))$par)

[1] 4.692593 2.408415

> (mod3 <- optim(c(1,1), neglLik, amostra=am, method="L-BFGS-B", modelo=3,
+           lower=c(0,0), upper=c(Inf, Inf))$par)

[1] 4.692591 1.948416
```

Obtenção de estimativas em uma parametrização a partir das estimativas de outra parametrização é obtida diretamente.

```
> 1/mod1[2]

[1] 2.408324

> prod(mod1)

[1] 1.948423
```

Comentários sobre reparametrização

- Reparametrização para garantir validade do espaço paramétrico

  No exemplo da Gama, ambos parâmetros devem ser não negativos em todas as parametrizações. Alternativamente a usar `lower` e `upper`, pode-se redefinir a função com a opção de que os parâmetros sejam fornecidos em escala logarítmica e desta forma possam assumir valores nos reais. Note que isto exclui o valor nulo do espaço paramétrico original. Aproveitamos e redefinição da função de (negativo) log-verossimilhança para ilustrar sintaxes em R escrevendo a função usando `switch()` para definir a opção de parametrização.

  ```
  > neglLik <- function(par, amostra, modelo=2, logpar=FALSE){
  +   if(logpar) par <- exp(par)
  +   ll <- switch(modelo,
  +     "1" = {alpha <- par[1]; beta <- par[2];
  +            with(amostra, n*(-alpha*log(beta)-log(gamma(alpha)) +
  +                 (alpha-1) * media.logs - media/beta))},
  +     "2" = {alpha <- par[1]; lambda <- par[2] ;
  +            with(amostra, n*(alpha*log(lambda)-log(gamma(alpha)) +
  +                 (alpha-1) * media.logs - lambda * media))},
  +     "3" = {alpha <- par[1]; mu <- par[2] ;
  +            with(amostra, n*(alpha*(log(alpha)-log(mu))-log(gamma(alpha)) +
  +                 (alpha-1) * media.logs - (alpha/mu) * media))})
  +   return(-ll)
  + }
  ```

Obtendo novamente as estimativas (nas escalas logarítmicas e original) agora com o método padrão da função `optim()`.

```
> (mod1r <- optim(log(c(1,1)), neglLik, amostra=am, modelo=1, log=T)$par)

[1]  1.5460915 -0.8791401

> rbind(mod1, exp(mod1r))

         [,1]      [,2]
mod1 4.692435 0.4152265
     4.693091 0.4151398

> (mod2r <- optim(log(c(1,1)), neglLik, amostra=am, modelo=2, log=T)$par)

[1] 1.5458999 0.8788993

> rbind(mod2, exp(mod2r))

         [,1]     [,2]
mod2 4.692593 2.408415
     4.692192 2.408247

> (mod3r <- optim(log(c(1,1)), neglLik, amostra=am, modelo=3, log=T)$par)

[1] 1.5458160 0.6670942

> rbind(mod3, exp(mod3r))

         [,1]     [,2]
mod3 4.692591 1.948416
     4.691798 1.948567
```

- Reparametrização para interpretabilidade dos parâmetros
  COMENTAR
- Reparametrização ortogonalização
  COMENTAR
- Melhor comportamento (quadrático) da função.
  COMENTAR. Invariância dos estimadores de M.V. e transformação direta de limites de intervalos de confiança baseados na verossimilhança ou *deviance*.

(2.b.) Maximização da função de log-verossimilhança concentrada (1 parâmetro)

Quando possível é conveniente (numericamente) reduzir a dimensionalidade da maximização numérica utilizando a verossimilhança concentrada/perfilhada. No exemplo substituímos a expressão do estimador que possui forma fechada $\hat{\lambda} = \hat{r}/\bar{y}$ na função verossimilhança (8) e obtemos a função de verossimilhança em função de apenas um parâmetro.

$$l(r|y) = n\left(r\log(\hat{\lambda}) - \log(\Gamma(r)) + (r-1)\overline{\log(y)} - \hat{\lambda}\bar{y}\right) \tag{10}$$

$$= n\left(r\log(r/\bar{y}) - \log(\Gamma(r)) + (r-1)\overline{\log(y)} - r\right) \tag{11}$$

Esta função é definida e usada para obter a estimativa de r que na sequência é substituída em $\hat{\lambda} = \hat{r}/\bar{y}$ para obter a estimativa de λ.

```
> neglLik1 <- function(par, amostra, modelo=2, logpar=FALSE){
+   if(logpar) par <- exp(par)
+   ll <- switch(modelo,
+     "1" = {alpha <- amostra$media/par; beta <- par;
+            with(amostra, n*(-log(gamma(alpha)) - alpha*log(beta) +
+                 (alpha-1) * media.logs - media/beta))},
```

```
+     "2" = {alpha <- par * amostra$media; lambda <- par;
+            with(amostra, n*(alpha*log(lambda) - log(gamma(alpha)) +
+                 (alpha-1) * media.logs - lambda * media))},
+     "3" = {with(amostra, n*(par*(log(par)-log(media)) -
+                 log(gamma(par)) + (par-1)*media.logs-par))})
+   return(-ll)
+ }
```

Como a otimização agora é em apenas uma dimensão utiliza-se a função `optimize()`. As estimativas em cada parametrização são obtidas com:

```
> (est1 <- optimize(neglLik1, lower=0.001, upper=100, amostra=am, modelo=1)$min)

[1] 0.4152092

> (est2 <- optimize(neglLik1, lower=0.001, upper=100, amostra=am, modelo=2)$min)

[1] 2.408401

> (est3 <- optimize(neglLik1, lower=0.001, upper=100, amostra=am, modelo=3)$min)

[1] 4.692589
```

mas, na prática, basta obter em uma dessas e as estimativas em outras parametrizações são obtidas de forma trivial.

```
> 1/est1

[1] 2.408424

> am$media/est1

[1] 4.692613

> am$media*est2

[1] 4.692568
```

1.3 Uso de algumas funções do R

O R e seus pacotes oferece funções que facilitam os procedimentos acima, bem como cálculos posteriores como intervalos, matriz de covariâncias, dentre outras. Dentre as funções "facilitadoras" já prontas e disponíveis estão a `mle()` do pacote **stats4** e `mle2()` do pacote **bbmle**. Nestas funções os parâmetros são passados na forma de listas.

Inicialmente define-se a função de (negativo)log-verossimilhança

```
> nlLik <- function(r, lambda){
+         lambda <- exp(lambda); r <- exp(r)
+   ll <- am$n*(r*log(lambda) - log(gamma(r)) +
+            (r-1)*am$media.logs - lambda*am$media)
+   return(-ll)
+ }
```

que é maximizada para obter as estimativas.

```
> require(stats4)
> args(mle)

function (minuslogl, start = formals(minuslogl), method = "BFGS",
    fixed = list(), nobs, ...)
NULL

> (est.mle1 <- mle(nlLik, start=list(r=log(2), lambda=log(2)),
+                  method="L-BFGS-B", lower=c(0,0)))
```

```
Call:
mle(minuslogl = nlLik, start = list(r = log(2), lambda = log(2)),
    method = "L-BFGS-B", lower = c(0, 0))

Coefficients:
       r   lambda
1.545982 0.878965
```

Vários resumos e funções extratoras estão imediatamente disponíveis para saídas da `mle()`.

```
> ## resumo
> summary(est.mle1)

Maximum likelihood estimation

Call:
mle(minuslogl = nlLik, start = list(r = log(2), lambda = log(2)),
    method = "L-BFGS-B", lower = c(0, 0))

Coefficients:
       Estimate Std. Error
r      1.545982  0.3056496
lambda 0.878965  0.3226093

-2 log L: 49.52223

> ## valor da verossimilhança maximizada
> logLik(est.mle1)

'log Lik.' -24.76112 (df=2)

> ## AIC
> AIC(est.mle1)

[1] 53.52223

> ## estimativas
> coef(est.mle1)

       r   lambda
1.545982 0.878965

> ## matriz de covariâncias
> vcov(est.mle1)

                r     lambda
r      0.09342171 0.09342167
lambda 0.09342167 0.10407675

> ## IC baseado na verossimilhança (deviance) perfilhada
> confint(est.mle1, level=0.95)

Profiling...
           2.5 %   97.5 %
r      0.8868132 2.093177
lambda 0.1675541 1.449452
```

Assim como funções gráficas também são definidas como por exemplo os perfis de verossimilhança (expressos como raízes da função deviance) mostrados na Figura **??**

```
> par(mfrow=c(1,2))
> plot(profile(est.mle1))
```

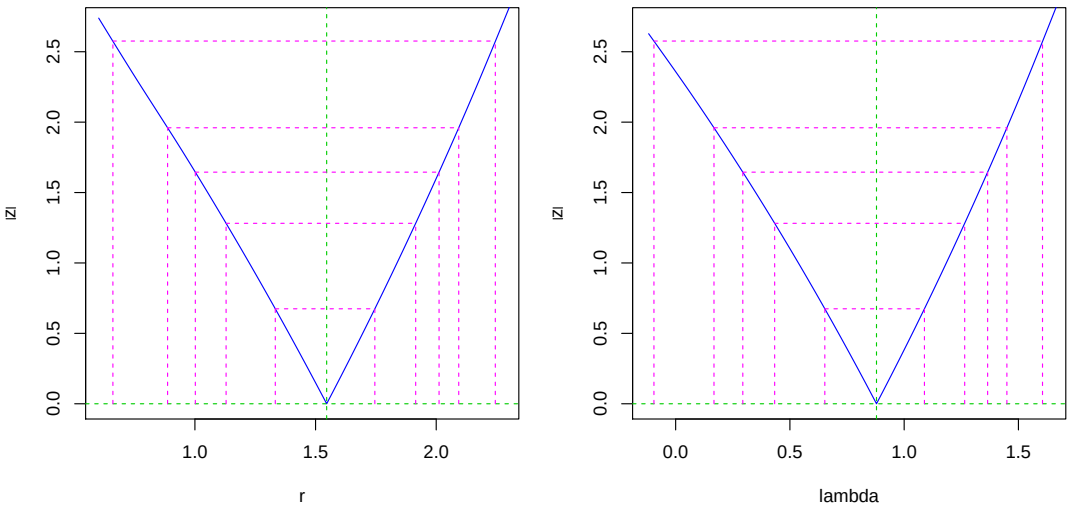


Figura 2: Perfis de verossimilhança (na escala de raiz da deviance) para parâmetros do modelo Gama sob a parametrização 2.

1.4 Visualizações da função de verossimilhança

A seguir vamos visualizar as superfícies de verossimilhança para cada uma das três parametrizações.

Uma função mais conveniente para visualização é a função **deviance** definida por:

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

que é definida como uma função no R:

```
> devFun <- function(theta, est, llFUN, ...){
+   return(2 * (llFUN(theta, ...) - llFUN(est, ...)))
+ }
```

A seguir tomamos as estimativas e verificamos que as funções estão retornando valores corretamente.

```
> (ests <- c(r.est, lambda.est))

[1] 4.692604 2.408420

> ## verossimilhancas originais (2 parâmetros)
> neglLik(ests, amostra=am, modelo=2)

[1] 24.76112

> neglLik(log(ests), amostra=am, modelo=2, logpar=T)

[1] 24.76112

> ## verossimilhanças concentradas
> neglLik1(ests[2], amostra=am, modelo=2)

[1] 24.76112

> neglLik1(log(ests[2]), amostra=am, modelo=2, logpar=T)

[1] 24.76112
```

```
> ## fc deviance (2 parâmetros)
> devFun(ests, est=mod2, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=2)

[1] 8.097345e-11

> devFun(log(ests), est=mod2r, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=2, logp=T)

[1] -1.014605e-07

> ## fc deviance concentrada (1 parâmetro)
> devFun(ests[2], est=mod2[2], llFUN=neglLik1, amostra=am, modelo=2)

[1] 8.054712e-11

> devFun(log(ests[2]), est=mod2r[2], llFUN=neglLik1, amostra=am, modelo=2, logp=T)

[1] -5.047535e-08

> ## agora para outros valores que não soas os EMV
> neglLik(c(4,2.5), amostra=am, modelo=2)

[1] 26.55084

> neglLik(log(c(4,2.5)), amostra=am, modelo=2, logpar=T)

[1] 26.55084

> neglLik1(2.5, amostra=am, modelo=2)

[1] 24.76866

> neglLik1(log(2.5), amostra=am, modelo=2, logpar=T)

[1] 24.76866

> devFun(c(4,2.5), est=mod2, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=2)

[1] 3.579439

> devFun(log(c(4,2.5)), est=mod2r, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=2, logp=T)

[1] 3.579439

> devFun(2.5, est=mod2[2], llFUN=neglLik1, amostra=am, modelo=2)

[1] 0.01508588

> devFun(log(2.5), est=mod2r[2], llFUN=neglLik1, amostra=am, modelo=2, logp=T)

[1] 0.01508583
```

Para obter os gráficos da função de verossimilhança uni e bidimensional é conveniente vetorizar a função para que possa receber uma sequencia de valores do(s) parametro(s) que serão usados na construção do gráfico (isto é equivalente a fazer um *for-loop*). A função deviance vetorizada é definida como se segue e conferimos com os valores obtidos anteriormente.

```
> Ofun <- Vectorize(function(x,y, ...) devFun(c(x,y), ...))
> Ofun(4, 2.5, est=ests, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=2)

[1] 3.579439

> Ofun(log(4), log(2.5), est=log(ests), llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=2, logpar=T)

[1] 3.579439
```

```
> par(mfrow=c(2,2))
> LEVELS <- c(0.99,0.95,0.9,0.7,0.5,0.3,0.1,0.05)
> contour(alphaGR,betaGR, GRdev, levels=qchisq(LEVELS,df=2),
+         labels=LEVELS, xlab=expression(alpha),ylab=expression(beta))
> points(t(mod1), pch=19, cex=0.6)
> persp(alphaGR, betaGR, GRdev)
> contour(alphaGRl,betaGRl, GRdevl, levels=qchisq(LEVELS,df=2),
+         labels=LEVELS, xlab=expression(log(alpha)),ylab=expression(log(beta)))
> points(t(log(mod1)), pch=19, cex=0.6)
> persp(alphaGRl, betaGRl, GRdevl)
```

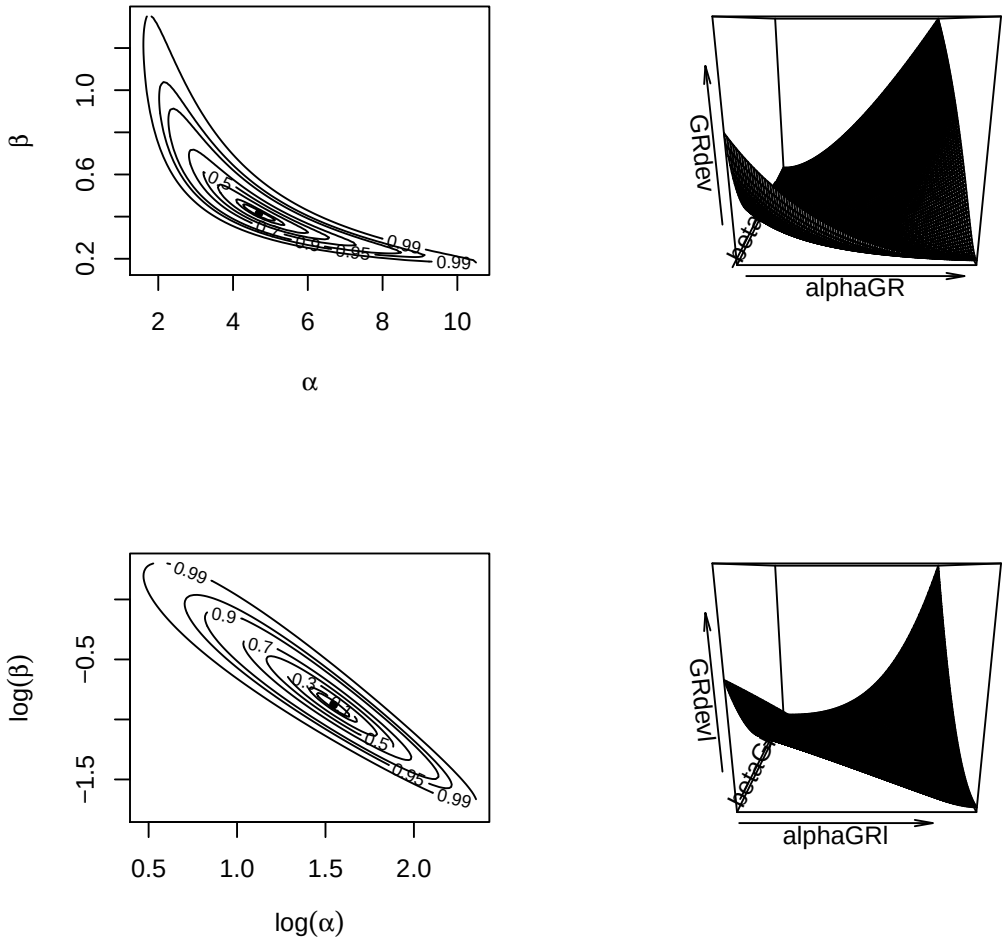


Figura 3: **Parametrização 1**: superfícies de verossimilhanças (expressa como deviance) a dois parâmetros. Gráficos superiores com parâmetros originais e inferiores na escala logarítmica.

Para obter o gráfico da função deviance a dois parâmetros, definimos uma malha de valores e avaliamos a função a cada ponto da malha. Note que vamos fazer na escala original e também logarítmica dos parâmetros. Começamos com a **parametrização 1** e as superfícies são mostradas na Figura 3.

```
> alphaGR <- seq(1.6,10.5, len=100)
> betaGR <- seq(0.17,1.35, len=100)
> GRdev <- outer(alphaGR, betaGR, FUN = Ofun, est=mod1, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=1)
> alphaGRl <- seq(log(1.6),log(10.5), len=100)
> betaGRl <- seq(log(0.17),log(1.35), len=100)
> GRdevl <- outer(alphaGRl, betaGRl, FUN = Ofun, est=log(mod1), llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=1, logpa
```

Passamos agora à **parametrização 2** e após a definição da malha e avaliaçõa da função, as superfícies são mostradas na Figura 4.

```
> rGR <- seq(1.6,10.7, len=100)
> lambdaGR <- seq(0.7,5.6, len=100)
> GRdev <- outer(rGR, lambdaGR, FUN=Ofun, est=mod2, llFUN=neglLik, amostra=am)
> rGRl <- seq(log(1.6),log(10.7), len=100)
> lambdaGRl <- seq(log(0.7),log(5.6), len=100)
> GRdevl <- outer(rGRl, lambdaGRl, FUN=Ofun, est=log(mod2), llFUN=neglLik, amostra=am, logpar=T)
```

O mesmo procedimento é repetido para **parametrização 3** com superfícies mostradas na Figura 5.

```
> rGR <- seq(1.5,11, len=100)
> muGR <- seq(1.4,2.83, len=100)
> GRdev <- outer(rGR, muGR, FUN = Ofun, est=mod3, llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=3)
> rGRl <- seq(log(1.5),log(11), len=100)
> muGRl <- seq(log(1.4),log(2.83), len=100)
> GRdevl <- outer(rGRl, muGRl, FUN = Ofun, est=log(mod3), llFUN=neglLik, amostra=am, modelo=3, logpar=T)
```

Gráficos feitos utilizando a reparametrização em escala logarítmica reduzem a assimetria na função. A última parametrização apresenta uma superfície mais próxima da ortogonalidade.

Unidimensional, verossimilhança perfilhada

```
> #devFun(lambdaGR, est=ests[2], llFUN=neglLik1, amostra=am)
> curve(devFun(x, est=ests[2], llFUN=neglLik1, amostra=am), from=0.9, to=5,
+         xlab=expression(lambda), ylab=expression(Pl(lambda)))
> ## cortes definidos por probabilidades
> (corteICs <- qchisq(c(0.90, 0.95, 0.99), df=1))

[1] 2.705543 3.841459 6.634897

> text(4.5, corteICs, c("90%", "95%", "99%"), pos=3)
> ## cortes definidos por percentuais da MV
> (corteICs <- -2*log(c(0.25, 0.15, 0.04)))

[1] 2.772589 3.794240 6.437752

> abline(h=corteICs, col=2)
> text(4.5, corteICs, c(0.25, 0.15, 0.04), pos=1, col=2)
> legend("topright", c(expression(D(lambda)~tilde(.)~chi^2),
+                      expression(D(lambda)~relativo)), lty=1, col=1:2)
```

```
> par(mfrow=c(2,2))
> contour(rGR,lambdaGR, GRdev, levels=qchisq(LEVELS,df=2),
+         labels=LEVELS, xlab=expression(r),ylab=expression(lambda))
> points(t(mod2), pch=19, cex=0.6)
> persp(rGR, lambdaGR, GRdev)
> contour(rGRl,lambdaGRl, GRdevl, levels=qchisq(LEVELS,df=2),
+         labels=LEVELS, xlab=expression(log(r)),ylab=expression(log(lambda)))
> points(t(log(mod2)), pch=19, cex=0.6)
> persp(rGRl, lambdaGRl, GRdevl)
```

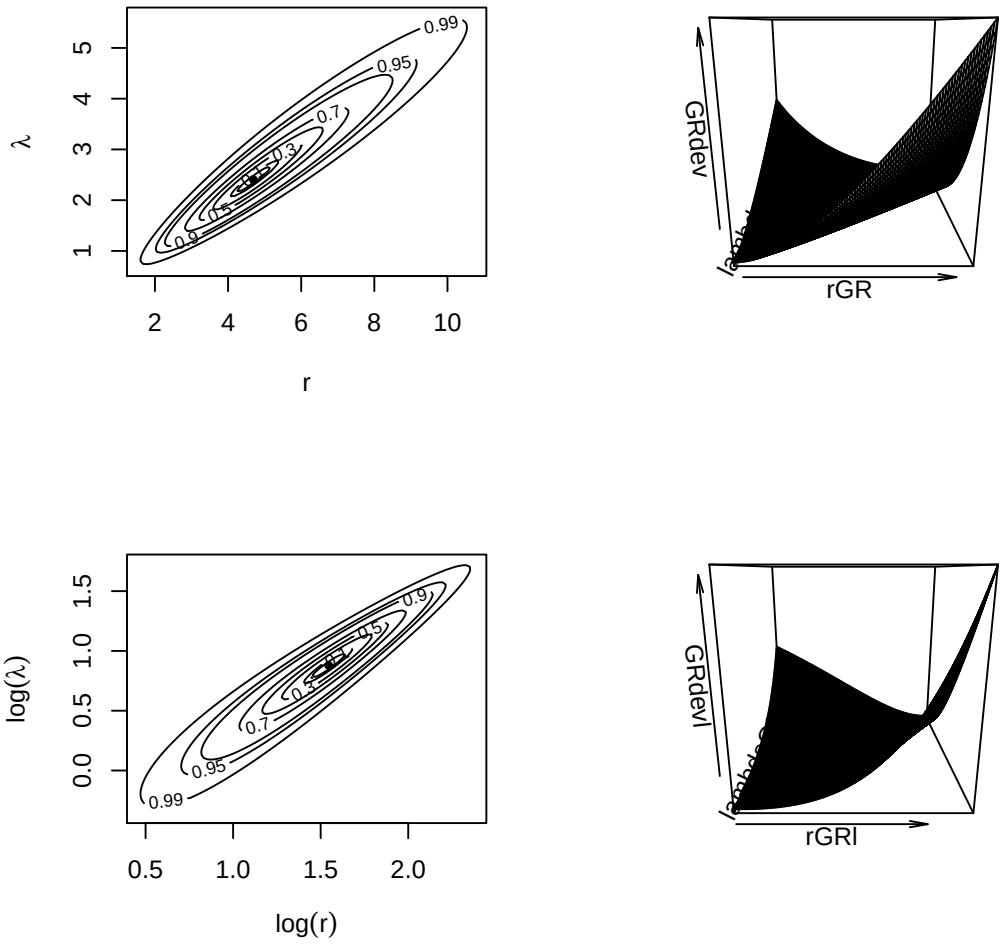


Figura 4: **Parametrização 2**: superfícies de verossimilhanças (expressa como deviance) a dois parâmetros. Gráficos superiores com parâmetros originais e inferiores na escala logarítmica.

```
> par(mfrow=c(2,2))
> contour(rGR,muGR, GRdev, levels=qchisq(LEVELS,df=2),
+         labels=LEVELS, xlab=expression(r),ylab=expression(lambda))
> points(t(mod3), pch=19, cex=0.6)
> persp(rGR, muGR, GRdev)
> contour(rGRl, muGRl, GRdevl, levels=qchisq(LEVELS,df=2),
+         labels=LEVELS, xlab=expression(log(r)),ylab=expression(log(lambda)))
> points(t(log(mod3)), pch=19, cex=0.6)
> persp(rGRl, muGRl, GRdevl)
```

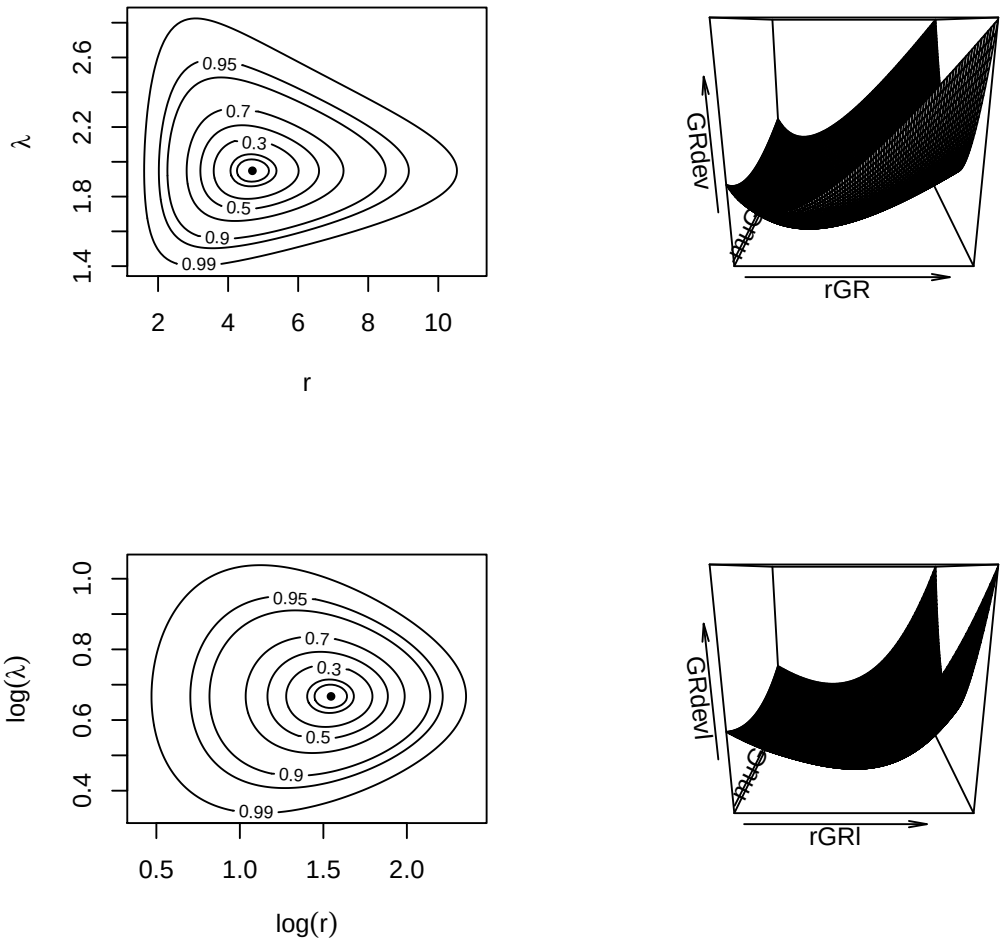
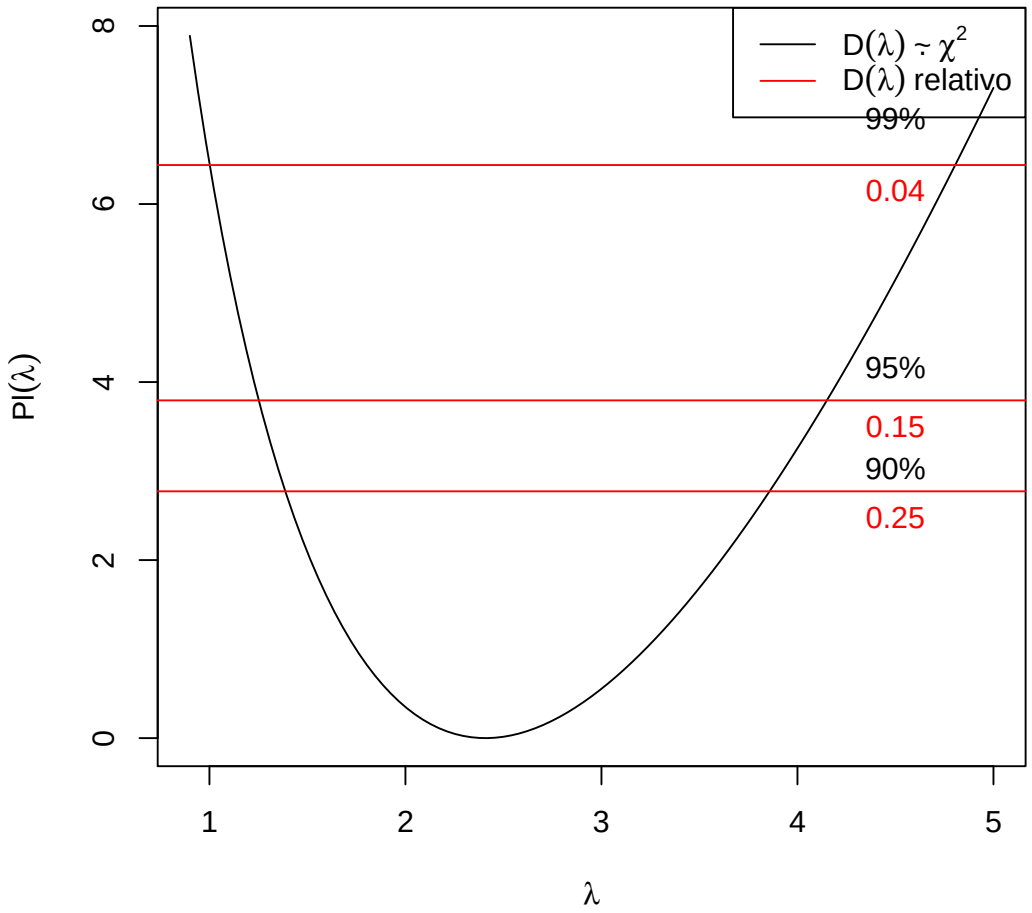


Figura 5: **Parametrização 3**: superfícies de verossimilhanças (expressa como deviance) a dois parâmetros. Gráficos superiores com parâmetros originais e inferiores na escala logarítmica.



Os gráficos e funções poderiam ser obtidos em escala logarítmica para os parâmetros e os intervalos por transformação dos limites dos IC's baseados em verossimilhança, dada a propriedade de invariância.

Aproximação Quadrática - Aproximação de Taylor de 2a ordem da função verossimilhança e *deviance* ao redor do estimador de M.V. $\hat{\theta}$.

$$\begin{aligned} l(\theta) &= l(\hat{\theta}) + (\theta - \hat{\theta})l'(\hat{\theta}) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^2 l''(\hat{\theta}) \\ &= l(\hat{\theta}) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^2 l''(\hat{\theta}) \end{aligned}$$

Uma vez que pela definição de E.M.V. $l'(\hat{\theta}) = 0$. A aproximação da função *deviance* fica:

$$\begin{aligned} D(\theta) &= -2[l(\theta) - l(\hat{\theta})] \\ &\approx -2[l(\hat{\theta}) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^2 l''(\hat{\theta}) - l(\hat{\theta})] \\ &= -(\theta - \hat{\theta})^2 l''(\hat{\theta}) \end{aligned}$$

As expressões consideram θ escalar, mas a extensão para um vetor de parâmetros é trivial.
Falta ainda completar texto com:

- obter Io/Ie para cada parametrização
- escrever e usar as funções gradiente para 1-D e 2-D

- ilustrar obtenção dos intervalos por diferentes métodos
- ...