

Investigando a sensibilidade dos processos Gaussianos à especificação da função de correlação e distribuição *a priori* dos seus parâmetros

Alexandra M. Schmidt
Ma. de Fátima da G. Conceição
Guido A. Moreira
Instituto de Matemática - UFRJ
www.dme.ufrj.br/~alex

I Workshop em Estatística Espacial e
Métodos Computacionalmente Intensivos
UFPR - Outubro de 2005

Estrutura
Introdução
Fção Correlação
Exemplos Correlação
Modelo
Inferência
Dado Artificial
Comparação
Resultados
Comentários
Projetos

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

1 Introdução

1 Definindo a função de covariância de um PG

1 Exemplos de funções de correlação

1 Modelo

1 Procedimento de Inferência

1 Estudo de simulação: obtendo um conjunto de dados artificiais

1 Comparação de Modelos

1 Resultados

2 Comentários

2 Projetos Correntes de Pesquisa

Definição de um Processo Gaussiano

Uma função $Y(\cdot)$ assumindo valores $y(\mathbf{x})$, para $\mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^2$, segue um processo Gaussiano (PG) com função de média $m(\cdot)$ e função de covariância $c(\cdot, \cdot)$, denotada por

$$Y(\cdot) \sim PG(m(\cdot), c(\cdot, \cdot)),$$

se para todo $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^2$, e qualquer $n = 1, 2, \dots$, a distribuição conjunta de $Y(\mathbf{x}_1), \dots, Y(\mathbf{x}_n)$ é Normal multivariada com parâmetros dados por $E\{Y(\mathbf{x})\} = m(\mathbf{x})$ e $Cov(Y(\mathbf{x}), Y(\mathbf{x}')) = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

- Note que precisamos especificar somente $m(\cdot)$ e $c(\cdot, \cdot)$;
- PG's são amplamente usados para modelar observações que são tomadas em diferentes posições geográficas (*Geoestatística*), por exemplo, modelagem de PM_{10} ou CO_2 em uma região, etc.
- A especificação da função de covariância é de grande importância, pois define a suavidade do processo.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Assumindo que $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x}'$ estão em D , costuma-se definir $c(.,.)$ como

$$c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \rho(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|; \phi),$$

onde σ^2 é a variância de $Y(.)$ para todas as localidades em D , $\rho(., \phi)$ é uma função de correlação que depende do vetor paramétrico ϕ e $\|\cdot\|$ representa a distância euclidiana.

Para um dado ϕ , $\rho(., \phi)$ tem que ser uma função positiva definida.

Estrutura

Introdução

Função Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Além disso, espera-se que $\rho(., \phi)$ tenha as seguintes propriedades (Diggle & Ribeiro Jr. (2002)):

1. $\rho(.)$ deve ser monótona não crescente em h ;
2. $\rho(h) \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow \infty$;
3. pelo menos um parâmetro no modelo define o quão rápido $\rho(h)$ decai para zero.

Também podemos querer incluir um parâmetro na função $\rho(.)$ que dê alguma flexibilidade para descrever sua forma.

Estrutura

Introdução

Função Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dados Artificiais

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Além disso, espera-se que $\rho(., \phi)$ tenha as seguintes propriedades (Diggle & Ribeiro Jr. (2002)):

1. $\rho(.)$ deve ser monótona não crescente em h ;
2. $\rho(h) \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow \infty$;
3. pelo menos um parâmetro no modelo define o quão rápido $\rho(h)$ decai para zero.

Também podemos querer incluir um parâmetro na função $\rho(.)$ que dê alguma flexibilidade para descrever sua forma.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Seja d a distância euclidiana entre quaisquer dois pontos em D . As funções de correlação mais usadas na literatura são

(i) **Família Exponencial Potência:**

$$\rho(d, \phi) = \exp(-(\phi d)^\kappa), \phi > 0 \text{ e } \kappa \in (0, 2];$$

(a) $\kappa = 2 \Rightarrow$ **Gaussiana:**

(b) $\kappa = 1 \Rightarrow$ **Exponencial:**

(ii) **Matérn:** $\rho(h; \phi; \kappa) = \{2^{\kappa-1} \Gamma(\kappa)\}^{-1} (h \phi)^\kappa K_\kappa(h \phi)$,
($\phi > 0$ e $\kappa > 0$), onde $K_\kappa(\cdot)$ é a função de Bessel modificada de terceiro tipo de ordem κ .

- Casos especiais $\kappa = 0.5$ (Exponencial) e $\kappa \rightarrow \infty$ (Gaussiana).
- A parte inteira de κ controla a suavidade do PG $\Rightarrow$ Correlação gaussiana leva a um processo infinitamente diferenciável (suave demais).

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

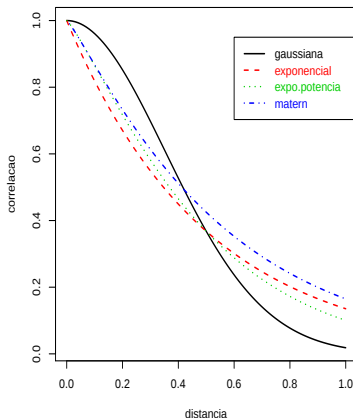
Comparação

Resultados

Comentários

Projetos





Objetivo (1) Investigar a sensibilidade dos PG's à escolha da função de correlação

Estrutura

Introdução

Função Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Considere o seguinte modelo

$$Y(\mathbf{x}) = \beta + Z(\mathbf{x}), \quad (1)$$

onde β é um intercepto, e

$$(Z(\mathbf{x}) \mid \sigma^2, \phi) \sim PG(0, \sigma^2 \rho(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|; \phi)), \quad (2)$$

com σ^2 sendo a variância (comum) de $Z(\cdot)$ e $\rho(\cdot; \phi)$ como antes. Assim temos que cada elemento de $c(\cdot, \cdot)$ é dado por

$$\Sigma_{Y(\mathbf{x}), Y(\mathbf{x}')} = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \rho(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|; \phi).$$

[Estrutura](#)[Introdução](#)[Fção Correlação](#)[Exemplos Correlação](#)[Modelo](#)[Inferência](#)[Dado Artificial](#)[Comparação](#)[Resultados](#)[Comentários](#)[Projetos](#)

Seja $\theta = (\beta, \phi, \sigma^2)$, sob o enfoque bayesiano

$$\begin{aligned} \pi(\theta | \mathbf{y}) &\propto f_n(\mathbf{y} | \theta) \pi(\theta) \\ &\propto \underbrace{|\Sigma|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)' \Sigma^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) \right\}}_{f_n(\mathbf{y} | \theta)} \pi(\beta) \pi(\sigma^2) \pi(\phi) \end{aligned} \quad (3)$$

Não é possível obter qualquer sumário da distribuição a posteriori de θ analiticamente $\Rightarrow$ Utilizamos **Markov Chain Monte Carlo (MCMC)**.

Objetivo (2) Investigar a sensibilidade dos PG's à escolha da distribuição a priori de θ

- Inicialmente, fixamos $n = 64$ localidades no quadrado $[0, 5] \times [0, 5]$ (Figura 12);
- Fixamos então os parâmetros em $\beta = 1$, $\sigma^2 = 1$, $\phi = 2.2$;
- Obtivemos 25 amostras usando a função de correlação exponencial (Figura 13) e (Figura 14) ;
- Para cada conjunto, ajustamos 11 diferentes modelos, com diferentes especificações *a priori* e diferentes funções de correlação;
- Mantivemos $M = 15$ localizações (escolhidas aleatoriamente entre as 64) fora do procedimento de inferência, para verificarmos a capacidade preditiva de cada modelo. (Figura 12)

Tabela 1.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

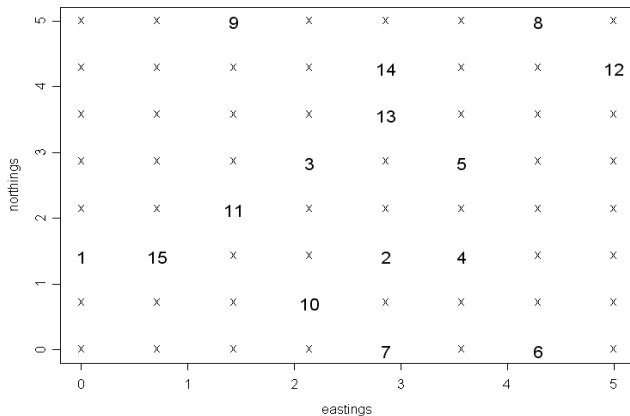


Figura: Localizações medidas e não medidas.

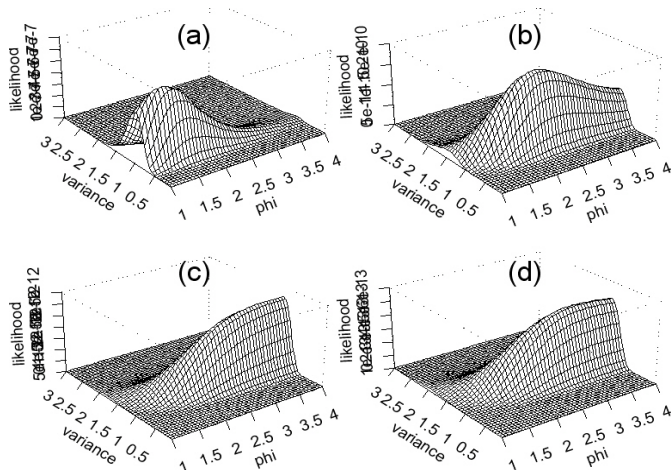


Figura: Verossimilhança para ϕ e σ^2 para amostras (a) 1, (b) 3, (c) 10 and (d) 13.

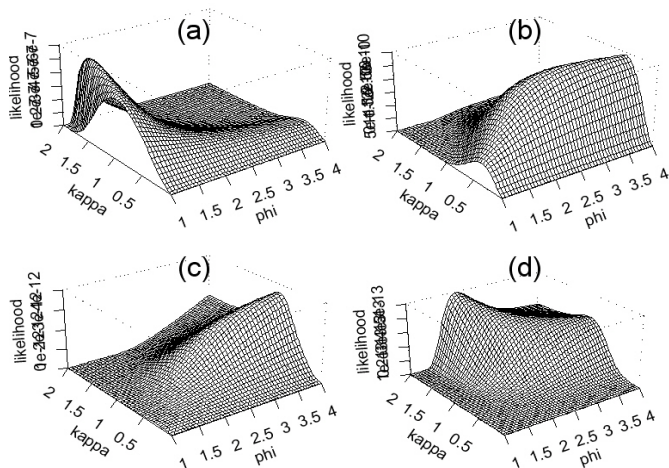


Figura: Verossimilhança para ϕ e κ (a) 1, (b) 3, (c) 10 and (d) 13.

Tabela: Funções de Correlação e Prioris

Funções de Correlação			
Expo.(E), Expo. Pot.(PE) e Matérn(M)			
Prioris	σ^2	ϕ	κ
P1	$IG(2, b)$	$Ga(0.1, 0.1)$	$U(0, 2]$
P2	$IG(2, b)$	$Ga(0.14, 0.17)$	$U(0, 2]$
P3	$IG(0.1, 0.1)$	$IG(2, 0.85)$	$U(0, 2]$
P4	$IG(2, 1)$	$Ga(0.97, 0.44)$	1
PBE	-	-	-

P1 σ^2 tem variância a priori infinita e b baseado em EMQ;

P2 priori de ϕ baseada na distância máxima;

P3 priori de ϕ com variância infinita;

P4 priori baseada nos valores usados para a geração das amostras;

PBE priori sugerida por Berger et. al. (2001), usada apenas para a função exponencial.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

(Berger et. al. JASA (2001))

$p^R(\beta, \sigma^2, \phi)$, é da forma

$$p^R(\beta, \sigma^2, \phi) \propto \frac{p(\phi)}{(\sigma^2)^a}, a \in \mathbb{R}, \text{ com}$$

$$a = 1 \text{ e } p(\phi) \propto \left\{ \text{tr}[W_\phi^2] - \frac{1}{n-p} (\text{tr}[W_\phi])^2 \right\}^{1/2},$$

onde

$$\begin{aligned} W_\phi &= \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \Sigma_\phi \right) \Sigma_\phi^{-1} P_\phi^\Sigma \text{ e} \\ P_\phi^\Sigma &= I - X(X' \Sigma_\phi^{-1} X)^{-1} X' \Sigma_\phi^{-1}; \end{aligned}$$

$(\partial/\partial \phi) \Sigma_\phi$ denota a matriz obtida da diferenciação de Σ_ϕ elemento a elemento.

- DIC (Spiegelhalter et. al. (2002))

$$DIC = \overline{D} + p_D = 2\overline{D} - D(\overline{\theta}),$$

onde $\overline{D} = E_{\theta|y}(D)$ e $p_D = \overline{D} - D(\overline{\theta})$;

- EPD (Gelfand & Ghosh (1998))

$$D_\gamma = \frac{\gamma}{\gamma + 1}G + P,$$

$$\text{onde } G = \sum_{r=1}^n (\mu_r - y_{r,obs})^2 \text{ e } P = \sum_{r=1}^n \sigma_r^2.$$

$\mu_r = E(Y_{r,rep} | \mathbf{y})$ e $\sigma_r^2 = Var(Y_{r,rep} | \mathbf{y})$;

- Capacidade Preditiva

$$(\mathbf{Y}_u | \mathbf{Y}, \boldsymbol{\theta}) \sim N_k(\boldsymbol{\mu}_u + \boldsymbol{\Psi}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}); \boldsymbol{\Sigma}_u - \boldsymbol{\Psi}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\Psi})$$

$$p(\mathbf{Y}_u | \mathbf{Y}) \approx \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q p(\mathbf{Y}_u | \boldsymbol{\theta}^q).$$

$$(MSE)_l = \frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} (Y(\mathbf{x}_{ui}) - \hat{Y}(\mathbf{x}_{ui}))^2, l = 1, 2, \dots, 25.$$

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

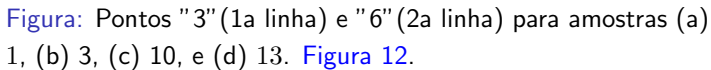
Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos



Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

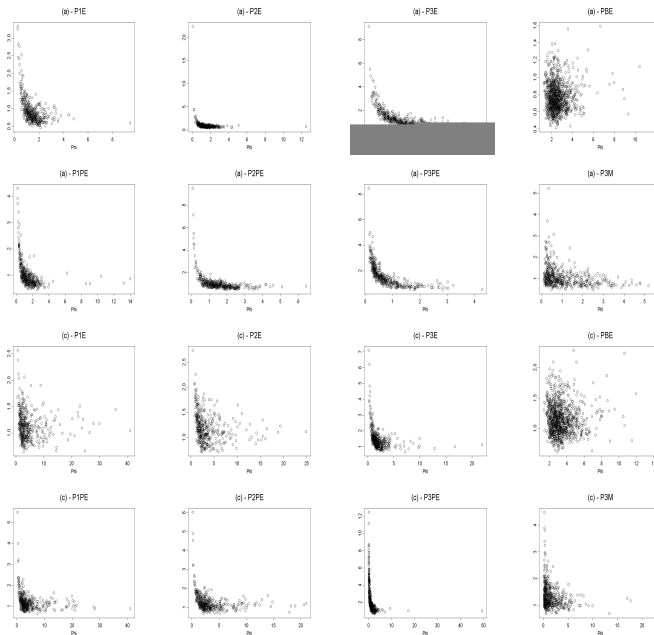


Figura 13

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

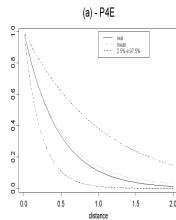
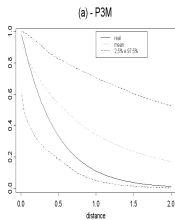
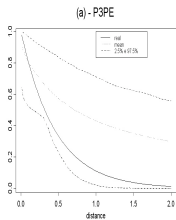
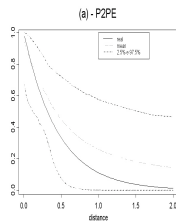
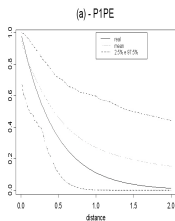
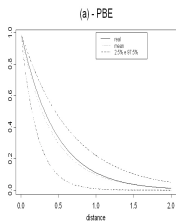
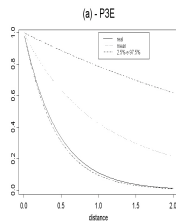
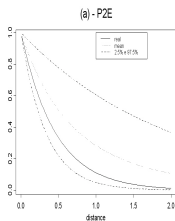
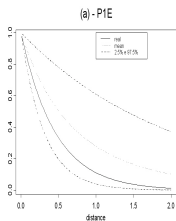
Dado Artificial

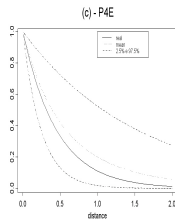
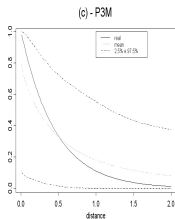
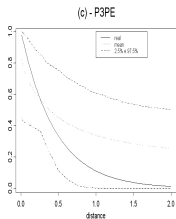
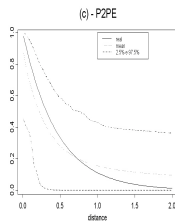
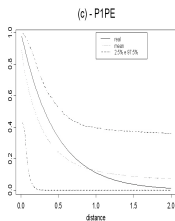
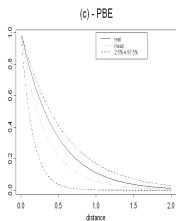
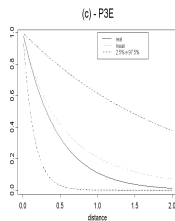
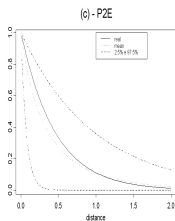
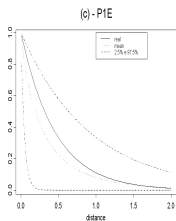
Comparação

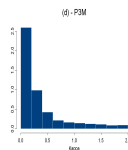
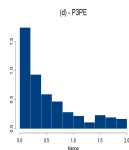
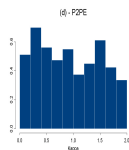
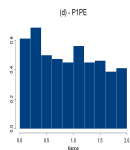
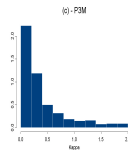
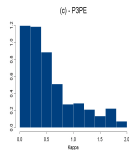
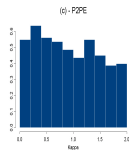
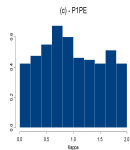
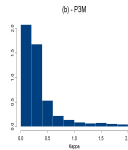
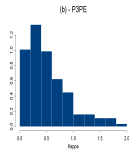
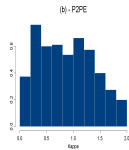
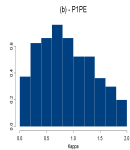
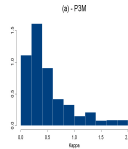
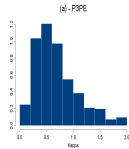
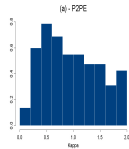
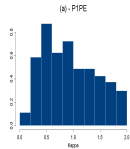
Resultados

Comentários

Projetos







Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Tabela: DIC para cada um dos modelos e amostras.

P1PE	P2PE	P3PE	P1E	P2E	P3E	P4E	PBE	P3M
125.36	125.25	125.78	116.04	124.99	125.87	139.77	124.68	125.08
131.93	131.25	125.85	128.53	130.36	132.86	119.76	130.27	132.74
139.13	124.44	109.33	139.18	138.52	140.81	120.608	137.56	139.56
148.72	148.30	152.17	148.19	145.19	149.33	122.28	149.29	150.51
129.05	129.11	130.59	128.55	123.51	128.92	141.50	127.33	130.22
139.45	140.97	141.42	138.52	139.11	140.31	141.26	138.86	140.67
135.14	135.86	135.11	133.19	135.40	135.52	151.96	135.68	137.31
147.14	146.34	147.58	146.60	146.41	148.49	120.09	145.26	147.94
125.55	124.88	117.84	121.03	124.86	123.27	124.56	124.42	126.76
146.87	147.66	146.78	145.04	146.26	147.95	136.15	145.64	147.83
125.40	140.35	138.76	139.95	136.95	141.22	122.09	139.78	140.90
142.95	138.58	143.20	142.66	144.23	142.78	136.85	143.45	145.24
151.62	152.06	153.62	149.85	151.30	154.49	134.45	150.82	153.22
137.26	139.77	140.93	130.32	138.78	120.66	140.01	137.37	140.17
138.80	140.25	140.25	138.65	137.28	137.31	122.56	139.69	139.01
145.31	149.17	150.15	146.41	140.74	150.49	123.26	147.39	149.54
132.40	128.55	115.53	132.56	130.74	133.74	122.92	131.42	133.18
138.92	139.22	140.45	138.37	133.48	141.08	116.97	138.36	140.22
151.24	151.62	154.22	150.67	150.69	152.13	116.70	151.06	152.63
143.93	144.24	146.74	142.81	143.70	146.53	137.59	143.30	145.71
153.70	152.41	149.59	153.66	153.41	155.87	107.95	152.52	154.95
128.74	131.30	133.25	131.01	131.49	113.53	139.49	131.49	133.38
56.87	98.98	125.88	125.10	124.95	124.79	129.48	123.68	125.95
148.10	150.41	137.61	149.91	149.02	149.47	144.94	149.00	150.97
136.81	135.13	92.82	141.07	140.96	142.07	128.84	139.98	140.87

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

Para 56%(= 14/25) das amostras P4E foi apontado como melhor. Se P4E não fosse utilizada, P1E e P2E seriam os mais indicados.

Tabela: EPD para cada um dos modelos e amostras.

P1PE	P2PE	P3PE	P1E	P2E	P3E	P4E	PBE	P3M
85.19	78.29	141.51	70.10	73.86	94.94	92.86	58.59	81.90
65.51	68.39	114.37	64.06	67.65	86.41	48.73	61.88	77.81
87.69	93.85	167.77	77.46	76.31	98.04	54.19	73.11	89.99
84.82	86.27	176.29	83.93	84.83	90.93	64.48	87.52	90.15
61.74	65.17	118.22	57.10	58.67	73.77	79.59	58.17	67.45
98.37	97.86	156.32	81.26	84.61	130.44	97.09	76.20	99.66
64.93	67.13	130.85	62.37	64.07	68.40	98.79	66.63	68.79
99.94	96.46	179.31	86.16	93.58	117.22	59.70	84.88	107.02
54.62	57.95	122.11	53.61	54.64	62.10	57.91	53.90	60.64
88.73	96.25	176.26	83.75	87.69	106.36	92.09	84.06	100.16
97.45	103.95	164.47	87.39	88.47	119.62	59.73	79.07	102.58
92.87	93.77	172.26	78.92	80.40	113.44	92.58	79.87	95.53
95.40	100.66	172.13	89.77	90.86	111.20	85.41	92.04	103.23
76.35	82.57	143.46	77.97	76.38	100.43	79.77	72.59	89.61
133.88	114.49	176.05	102.03	100.31	151.77	69.80	80.40	124.47
99.22	101.59	202.12	90.12	91.24	115.82	54.99	88.29	101.40
73.59	75.75	121.07	74.09	74.83	110.75	75.98	65.05	88.98
76.98	81.13	155.57	68.78	70.01	76.56	50.52	70.86	78.48
94.28	128.70	208.81	87.97	87.15	96.41	76.18	90.62	97.82
84.02	85.16	140.56	75.28	77.01	91.94	108.72	78.51	85.58
108.36	101.79	204.97	97.24	97.10	130.33	42.60	96.79	118.01
63.05	63.93	121.70	59.17	58.36	63.39	85.02	61.48	64.13
60.44	60.52	104.48	58.31	57.87	87.90	73.63	55.27	75.60
104.39	99.24	186.60	89.19	89.69	109.99	107.05	89.84	108.56
105.31	118.96	176.70	89.65	88.14	115.33	65.10	78.87	106.14

P4E 48%. Se P4E não fosse usada, para 60% das amostras, PBE seria escolhida.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

- O modelo Matérn não rodou para as prioris $P1$ e $P2$;
- Os valores de DIC são inconclusivos para algumas amostras, p_D negativo;
- Os valores de EPD parecem discriminar melhor os diferentes modelos;
- Em termos de previsão, as funções de correlação não diferem muito (previsões, MSE e MAE);
- ϕ e σ^2 são altamente correlacionados *a posteriori*;
- Estimação de ϕ influenciada pelas unidades do sistema de coordenadas $\Rightarrow$ afeta estimacão $\sigma^2 \rightarrow$ transformar em km via Projeção Lambert;
- A priori proposta por Berger et. al. (2001) parece fornecer bons resultados;
- Sugestão: antes de ajustar modelo, gerar realizações do PG a partir das prioris e verificar os campos resultantes.

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos

- Estrutura de covariância
 - espacial univariada (Schmidt & O'Hagan (JRSS B, 2003));
 - espacial multivariada (Schmidt & Gelfand (JGR, 2003));
 - espaço-temporal (Sansó e Schmidt (Rel. Técnico DME-UFRJ, 2004) + Tese Doutorado Aline A. Nobre
 - → Minicurso SINAPE 2006: *Modelando a estrutura de covariância de processos espaciais e espaço-temporais* (com Bruno Sansó, UCSC-EUA)
- Modelos espaço-temporais inflacionados de zeros (com Marcus V. M. Fernandes e Helio S. Migon);
- Modelos para o problema chuva-vazão (com Romy Ravines e Helio S. Migon);
- Desenho de uma rede de estações monitoradoras (com Ramiro R. Cárdenas e Marco A. R. Ferreira).

Estrutura

Introdução

Fção Correlação

Exemplos Correlação

Modelo

Inferência

Dado Artificial

Comparação

Resultados

Comentários

Projetos