Data de Depósito: 20/02/2001

Assinatura: Flavio Augusto

EXISTE UMA VERSÃO REVISADA

Classificação e Discriminação: Um Enfoque Bayesiano

Emerson Wruck

Orientador: Prof. Dr. Jorge Alberto Achcar

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências de Computação e Matemática Computacional.

USP – São Carlos
Fevereiro de 2001

A Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Jorge Alberto Achcar

Prof. Dr. Marinho Gomes de Andrade Filho

Profª. Dra. Márcia D'Elia Branco

Agradecimentos

Em primeiro lugar à Deus por me conceder saúde e estar presente sob várias formas em todos os momentos da minha vida.

Ao Prof. Dr. Jorge Alberto Achcar, por me confiar este trabalho, pela orientação segura, compartilhando sua grande experiência e pelo incentivo nas etapas mais difíceis.

Aos professores: Profa. Dra. Maria Creuza B. Salles, Prof.Dr. Josemar Rodrigues e Prof.Dr.Marinho Gomes de Andrade Filho pela dedicação ao ensino e principalmente pela amizade compartilhada.

Ao Prof. Dr. Luiz Milan e ao Prof. Dr. Marinho pelas valiosas sugestões e comentários quando da realização do meu exame de qualificação.

A todos meus amigos que direta ou indiretamente contribuíram para realização deste trabalho, entre eles, Ulisses, Valéria, Vanderly, Lucimary, Josenildo, Sidney, Willian, Manoel, Sandra, Rubia, Val, Gil, Guilherme, Tutia,...

Em especial aos meus padrinhos de casamento e companheiros de turma Cillene e Juliano.

Ao professor e grande amigo Josmar Mazucheli, pela grande ajuda computacional.

Com muito carinho, agradeço a minha família, principalmente pais (Luizinho e Odenilze) e irmãos (Flávio, Salete, Luis Carlos e Wagner) pelo apoio em todos os aspectos, o incentivo e a confiança.

Com amor agradeço a minha noiva, hoje com muita alegria minha esposa, pelo apoio, compreensão e paciência nos momentos de falta.

Aos funcionários do ICMC pela dedicação e empenho para com todos do Departamento.

E finalmente, à Instituição FAPESP pelo apoio financeiro, sem o qual não teria concluído tal trabalho.

Abstract

In this dissertation, we present Bayesian alternatives for classification problem under different approaches.

First of all, we propose a Box and Cox transformation to have normal data to be used in classification problems. We also consider the classification problem assuming a vector X with a mixture of multivariate normal distributions, using Bayesian procedures to build a classification rule.

We also consider the classification for binary data and correlated binary data using the Bayesian approach and also introducing random effects to capture the correlation.

For the Bayesian approach, we use MCMC methods and we consider the utilization of the software “Ox” as a great alternative for problems related the efficiency of the algorithm.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Visão geral do problema de Classificação.	1
1.1.1	Organização do Trabalho	3
2	O problema de Classificação e Discriminação	5
2.1	Visão geral do problema de classificação	5
2.1.1	Enfoque Bayesiano para o Problema de Classificação	8
2.2	Classificação de duas populações Normais Multivariadas	9
2.3	Desempenho das Funções de Classificação	11
2.4	Separação de Populações : Função Discriminante de Fisher.	13
2.5	Classificação de Várias Populações	14
2.5.1	Método do custo mínimo de classificação errada	15
2.5.2	Classificação de Populações Normais	16
2.6	Alguns exemplos ilustrativos.	18
3	Classificação e Discriminação com Dados Transformados	24
3.1	Transformação dos dados para a forma Normal: Caso Univariado.	24
3.1.1	Função de Verossimilhança para λ , μ e σ^2	25
3.1.2	Uso do logaritmo da função de verossimilhança perfilada (“Profile Log-Likelihood”).	26
3.2	Transformação de Dados Multivariados (TBox).	27
3.3	Enfoque Bayesiano para a transformação Box-Cox (TBox1).	28
3.3.1	Distribuições a priori para os parâmetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$	28
3.3.2	Distribuição a posteriori conjunta para os parâmetros	29

3.3.3	Distribuições Condicionais a Posteriori necessárias para o algoritmo Gibbs Sampling.	29
3.4	Outro Enfoque Bayesiano: O uso da Função de Verossimilhança Completa (TBox2).	30
3.4.1	Estimação dos parâmetros de transformação: caso univariado. . . .	30
3.4.2	Estimação dos parâmetros de transformação: caso multivariado. . .	32
3.5	Procedimentos de Simulação e Diagnóstico de Convergência.	35
3.6	Alguns Exemplos Numéricos	35
3.6.1	Estimação dos parâmetros de transformação via Box-Cox Clássico (TBox).	36
3.6.2	Estimação dos parâmetros de transformação via Box & Cox Bayesiano (TBox1).	36
3.6.3	Estimação dos parâmetros de transformação via Box & Cox Bayesiano (TBox2).	38
3.6.4	Comparação das transformações e dos procedimentos de Classificação. 40	
3.6.5	Resultados para dados transformados de ordem $p > 2$	42
4	Classificação Considerando a distribuição do vetor de medidas X, como uma Misturas de Distribuições	44
4.1	Introdução aos Modelos de Misturas	44
4.2	Análise Bayesiana Assumindo uma Mistura de $K=2$ Distribuições Normais Multivariadas	45
4.2.1	Incorporação da Variável Latente	46
4.3	Distribuições a Priori para o Modelo de Mistura	47
4.3.1	Desenvolvimento do Modelo com Distribuição a Priori Não Informativa	47
4.3.2	Distribuições Condicionais a Posteriori Necessárias para o Algoritmo Gibbs Sampling	48
4.3.3	Desenvolvimento do modelo com distribuição a priori conjugada . .	50
4.3.4	Distribuições Condicionais a Posteriori Necessárias para o Algoritmo Gibbs Sampling	51
4.3.5	Classificação para duas Populações	53

4.4	Um Exemplo Ilustrativo	54
4.4.1	Utilização dos Procedimentos Usuais de Classificação	55
4.5	Aplicação dos Modelos de Mistura para a Classificação	56
4.5.1	Utilização de Distribuições a Priori Não Informativas	57
4.5.2	Utilização de Distribuições a Priori Informativas	61
4.5.3	Classificação Utilizando o algoritmo EM	64
5	Classificação e Discriminação a partir de Variáveis Binárias	67
5.1	Desenvolvimento do Critério de Classificação	68
5.2	Alternativa Bayesiana para a Classificação Binária.	70
5.3	Exemplo de Aplicação.	72
6	Classificação Considerando Dados Binários Correlacionados	79
6.1	Desenvolvimento do Modelo	79
6.2	Análise Bayesiana Hierárquica Assumindo Efeitos Aleatórios Normais . . .	80
6.3	Modelos de Efeitos Aleatórios com uma Mistura de Distribuições Normais .	84
6.4	Exemplo Ilustrativo	89
7	Conclusões Finais e Propostas Futuras	100
	Apêndices	102
	A ALGORITMO GIBBS SAMPLING	102
	B ALGORITMO METROPOLIS-HASTINGS	104
	C O CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA DE GELMAN E RUBIN (1992)	106
	D O CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA DE GEWEKE (1992)	108
	E UM PROGRAMA COMPUTACIONAL	110
	Referências Bibliográficas	115

Capítulo 1

Introdução

1.1 Visão geral do problema de Classificação.

Num problema de classificação, temos um objeto (ou pessoa) conhecido que pertence a um de g grupos distintos de um mesmo universo. O objetivo é designar o objeto a um desses grupos com base num vetor x de medidas características associado ao objeto (ver por exemplo Cacoullos, 1973; Lachenbruch, 1975a; Huberty, 1975; Goldstein e Dillon, 1978; Lachenbruch & Goldstein, 1979; Johnson & Wichern, 1982). Este problema é verificado em diversas áreas de aplicações tais como Ciências Sociais, Economia, Medicina, Biologia, Física, etc.

Algumas situações em que necessitamos usar classificação são ilustradas abaixo:

- a- Conhecimento incompleto ou desempenho futuro. Ex: No passado valores extremos de certas variáveis financeiras foram observadas dois anos antes de uma falência. A classificação de uma outra firma como segura ou em dificuldades, com base nos valores observados desses indicadores, pode permitir que os executivos tomem a ação corretiva (quando necessária), antes que seja muito tarde.
- b- Informação perfeita exige a destruição do objeto. Ex: Tempo de vida de uma bateria é determinado usando até acabar. Produtos sem carga não podem ser vendidos. Poderíamos classificar produtos como bons ou ruins com base em certas medidas preliminares.
- c- Informação impossível ou muito cara. Ex: Atribuir autoria de artigos. Frequências das palavras ou comprimento das sentenças podem ajudar a classificar a autoria.

d- O número de trabalhos literários datados por um autor estão disponíveis e estes podem ser classificados em g grupos cronologicamente. Um trabalho não datado é encontrado e desejamos classifica-lo cronologicamente. Aqui devemos mensurar o estilos característicos que mudam com o tempo.

Em geral nas abordagens usadas para o problema de classificação, (ver por exemplo Anderson,1984;Johnson & Wichern,1982),assume-se que o vetor aleatório X de medidas associado a cada objeto, tenha um distribuição Normal Multivariada e usa-se os procedimentos tradicionais de classificação como a Função Discriminante Linear (F.D.L) e a Função Discriminante Quadrática (F.D.Q). No entanto, quando não temos a normalidade multivariada para a distribuição de X , podemos ter problemas na taxa de classificação de novos objetos, usando tais procedimentos.

Neste trabalho exploramos os procedimentos de Inferência Bayesiana, aplicados direta e indiretamente ao problema de classificação e discriminação, utilizando principalmente os métodos MCMC (Monte Carlo em Cadeias Markov), entre esses métodos, destacamos o algoritmo Gibbs Sampling (ver por exemplo, Gelfand & Smith, 1990) e o algoritmo Metropolis-Hastings (ver por exemplo Smith & Roberts,1993).

Na primeira parte do trabalho, considerando uma distribuição contínua para o vetor aleatório X de medidas, exploramos o problema de classificação e discriminação utilizando a transformação de Box & Cox (1964). Aqui, transformamos os dados para uma distribuição Normal Multivariada e usamos as técnicas usuais de discriminação (F.D.L e F.D.Q). Assim, consideramos uma transformação Box-Cox para cada variável na forma:

$$x_i^{(\lambda_i)} = \begin{cases} \frac{x_i^{\lambda_i} - 1}{\lambda_i} & \text{se } \lambda_i \neq 0, \\ \ln(x_i) & \text{se } \lambda_i = 0. \end{cases}$$

onde $i = 1, \dots, k$; $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$.

Quando temos $\mathbf{x}$ de dimensão alta, $k \geq 3$, a obtenção dos valores de λ_i pelo método clássico "Profile Log-Likelihood" pode se tornar complicado(ver Johnson & Wichern,pp 167-171), necessitando de muito trabalho computacional. O uso de algoritmos MCMC citados acima pode ser uma alternativa razoável para achar os valores de λ_i , $i = 1, 2, \dots, k$, a partir da função de verossimilhança perfilada. Também utilizamos procedimentos Bayesianos para estimar os valores acima, diretamente da função de verossimilhança completa.

Outra ênfase dada para o problema de classificação, foi supor para o vetor aleatório X de medidas, uma distribuição diferente da distribuição Normal Multivariada. Neste caso, consideramos uma mistura de distribuições normais multivariadas (ver por exemplo Robert,1996; Lavine & West,1992) que em algumas situações, possibilitam uma melhor adequação do modelo aos dados e usamos a distribuição preditiva na regra de classificação.

Consideramos também, o problema de classificação a partir de dados binários. Analisamos o procedimento usual para a classificação e propusemos procedimentos alternativos Bayesianos, onde incorporamos o fator correlação com o intuito de formular um modelo mais robusto.

1.1.1 Organização do Trabalho

Este trabalho encontra-se dividido em 7 capítulos. Neste capítulo introdutório apresentamos uma idéia geral do problema de Classificação e Discriminação, citando alguns exemplos cotidianos e um pequeno esboço do que se refere o trabalho.

No capítulo 2, apresentamos a maioria dos conceitos e procedimentos usuais do problema de Classificação e Discriminação considerando dados contínuos e utilizamos exemplos ilustrativos de alguns livros textos (por exemplo, Applied Multivariate Statistical Analysis, Johnson & Wichern, 1982; Statistical Methods for Survival Data Analysis, Lee, 1980).

No capítulo 3, consideramos a transformação de Box & Cox para os dados dos exemplos mostrados no capítulo 2. Aqui utilizamos procedimentos Bayesianos para a transformação dos dados e aplicamos as regras usuais de classificação utilizadas anteriormente. Todos os resultados foram analisados e discutidos.

No capítulo 4, apresentamos modelos com misturas de distribuições normais multivariadas, considerando a introdução de variáveis latentes. Dentro do enfoque Bayesiano, utilizamos o algoritmo Gibbs Sampling para estimação e consideramos ainda para o problema distribuições a priori não informativas e informativas conjugadas. Como alternativa Clássica, utilizamos o algoritmo EM (ver McLachlan & Krishnan, 1997). A classificação foi feita com base na densidade preditiva para cada população.

No capítulo 5, apresentamos o problema de Classificação e Discriminação utilizando somente variáveis binárias. Neste caso, introduzimos o procedimento usual de classificação e uma opção Bayesiana.

No capítulo 6, dando continuidade ao problema de classificação com dados binários, foi proposto modelos que incorporam o fator correlação entre as variáveis binárias associadas a cada objeto.

No capítulo 7, apresentamos as conclusões e algumas propostas futuras.

Capítulo 2

O problema de Classificação e Discriminação

Neste capítulo apresentamos uma breve introdução ao problema de classificação e discriminação dentro da abordagem tradicional.

2.1 Visão geral do problema de classificação

Inicialmente nos concentramos no problema de classificação para duas populações embora a maioria das idéias apresentadas possam ser imediatamente generalizadas para mais de duas populações.

Sejam $f_1(x)$ e $f_2(x)$, as funções densidades de probabilidades associadas com o vetor da v.a $X_{(p \times 1)}$ para as populações π_1 e π_2 , respectivamente. Um objeto com medidas associadas x , deve ser atribuído à π_1 ou π_2 . Seja Ω , o espaço amostral, isto é, a coleção de todas as observações possíveis de x . Temos R_1 : o conjunto de valores de x , utilizados para classificar objetos como π_1 e $R_2 = \Omega - R_1$: os valores restantes utilizados para classificar π_2 ; aqui os conjuntos R_1 e R_2 são mutuamente exclusivos.

A probabilidade condicional, $P(2|1)$, de classificar um objeto como π_2 , quando de fato é de π_1 é dada por,

$$P(2|1) = P(x \in R_2|\pi_1) = \int_{R_2=\Omega-R_1} f_1(x)dx \quad (2.1)$$

Similarmente, a probabilidade condicional, $P(1|2)$, de classificar um objeto como π_1 , quan-

do na verdade é π_2 é dada por,

$$P(1|2) = P(x \in R_1 | \pi_2) = \int_{R_1} f_2(x) dx \quad (2.2)$$

Agora, sejam p_1 , a probabilidade a priori de π_1 e p_2 , a probabilidade a priori de π_2 , onde $p_1 + p_2 = 1$. As probabilidades totais de classificar objetos corretamente ou incorretamente podem ser derivadas dos produtos das probabilidades a priori e probabilidades condicionais.

$$P(\text{classificada corretamente como } \pi_1) = P(X \in R_1 | \pi_1)P(\pi_1)$$

$$P(\text{classificada incorretamente como } \pi_1) = P(X \in R_2 | \pi_1)P(\pi_1)$$

$$P(\text{classificada corretamente como } \pi_2) = P(X \in R_2 | \pi_2)P(\pi_2)$$

$$P(\text{classificada incorretamente como } \pi_2) = P(X \in R_1 | \pi_2)P(\pi_2)$$

Assim, mesmo uma probabilidade aparentemente pequena pode ser muito grande se o custo de fazer uma atribuição incorreta for muito alto. O custo de uma classificação errada pode ser definido por uma matriz de custo (ver Tabela 2.1).

Tabela 2.1: Matriz de Custo

		Classificar como	
		π_1	π_2
População	π_1	0	$c(2 1)$
Verdadeira	π_2	$c(1 2)$	0

onde

$c(1|2)$: custo da observação de π_2 ser incorretamente classificada em π_1 .

$c(2|1)$: custo da observação de π_1 ser incorretamente classificada em π_2 .

O custo esperado por classificação errada (ECM) é dado por,

$$ECM = c(2|1)P(2|1)p_1 + c(1|2)P(1|2)p_2 \quad (2.3)$$

O objetivo para uma boa regra de classificação é obter um ECM com valor bem pequeno.

Resultado 2.1. : *As regiões R_1 e R_2 que minimizam o ECM são definidas pelos valores de x para os quais as seguintes desigualdades valem.*

$$R_1 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \geq \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \left[\frac{p_2}{p_1} \right] \quad R_2 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} < \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \left[\frac{p_2}{p_1} \right] \quad (2.4)$$

Prova:(ver Johnson & Wichern,1982; Seber,1983)

Alguns casos especiais de regiões de custos mínimos esperados, são dados por:

a) $(p_1/p_2) = 1$ (probabilidades a priori iguais)

$$R_1 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \geq \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \quad R_2 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} < \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right]$$

b) $c(1|2)/c(2|1) = 1$ (custos de classificação erradas iguais)

$$R_1 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \geq \left[\frac{p_2}{p_1} \right] \quad R_2 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} < \left[\frac{p_2}{p_1} \right]$$

c) $(p_1/p_2) = (c(1|2)/c(2|1)) = 1$

$$R_1 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \geq 1 \quad R_2 : \frac{f_1(x)}{f_2(x)} < 1$$

Em geral, sendo as probabilidades a priori desconhecidas, estas são consideradas iguais. Também se é desconhecida a razão entre os custos de uma classificação errada, então ela pode ser considerada igual a 1.

Quando ignorarmos os custos de classificação errada, podemos escolher R_1 e R_2 que minimizam a probabilidade total de classificação errada TPM .

$$TPM = p_1 \int_{R_2} f_1(x)dx + p_2 \int_{R_1} f_2(x)dx \quad (2.5)$$

Observar que este problema é equivalente a minimizar o custo esperado de classificação errada quando os custos de classificação são iguais. Portanto as regiões ótimas neste caso são dados no item (b) acima. Podemos também alocar uma nova observação x_0 para a população com maior probabilidade a posteriori $P(\pi_i|x_0)$, onde pela regra de Bayes as probabilidades a posteriori são dadas por,

$$P(\pi_1|x_0) = \frac{p_1 f_1(x_0)}{p_1 f_1(x_0) + p_2 f_2(x_0)} \quad (2.6)$$

$$P(\pi_2|x_0) = \frac{p_2 f_2(x_0)}{p_1 f_1(x_0) + p_2 f_2(x_0)} \quad (2.7)$$

Classificar uma observação x_0 como π_1 quando $P(\pi_1|x_0) \geq P(\pi_2|x_0)$ é equivalente a usar a regra do item (b) acima, pois os denominadores são os mesmos.

2.1.1 Enfoque Bayesiano para o Problema de Classificação

Nesta seção, vamos continuar nos concentrando em classificação para duas populações embora a maioria das idéias apresentadas possam ser imediatamente generalizadas para mais de 2 populações.

Supor agora as distribuições $f_j(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_j)$ parametrizadas pelo vetor $\boldsymbol{\theta}_j$, com $j = 1, 2$ para cada respectiva população π_1 e π_2 . Sob o enfoque Bayesiano, vamos ter para cada $\boldsymbol{\theta}_j$ uma distribuição a priori $g_j(\boldsymbol{\theta}_j)$. Conseqüentemente, teremos também, para cada $j = 1, 2$ uma distribuição do vetor de parâmetros dado os dados $g_j(\boldsymbol{\theta}_j|\mathbf{x})$, designada como distribuição a posteriori, que pode ser escrita como:

$$g_j(\boldsymbol{\theta}_j|\mathbf{x}) \propto g_j(\boldsymbol{\theta}_j) f_j(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_j) \quad (2.8)$$

Podemos então determinar as densidades preditivas para cada população $j = 1, 2$ por:

$$f_1(\mathbf{x}) = \int_{\Theta_1} f_1(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_1) g_1(\boldsymbol{\theta}_1|\mathbf{x}) d\boldsymbol{\theta}_1 \quad (2.9)$$

$$f_2(\mathbf{x}) = \int_{\Theta_2} f_2(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_2) g_2(\boldsymbol{\theta}_2|\mathbf{x}) d\boldsymbol{\theta}_2$$

onde Θ_j , $j = 1, 2$ é o espaço de parâmetros.

Assim determinamos as regiões de classificação de acordo com o **Resultado 1.1**, onde temos,

$$R_1 : \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} \geq \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \left[\frac{p_2}{p_1} \right] \quad R_2 : \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} < \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \left[\frac{p_2}{p_1} \right]$$

Aqui, podemos usar métodos de simulação via MCMC (Monte Carlo em Cadeias de Markov), para gerar amostras para $\boldsymbol{\theta}_j$, $j = 1, 2$. Gerado uma amostra, usamos estimativas de $f_1(\mathbf{x})$ e $f_2(\mathbf{x})$ para realizarmos o procedimento de classificação. As estimativas de Monte Carlo para $f_1(\mathbf{x})$ e $f_2(\mathbf{x})$ são dadas por:

$$\hat{f}_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{M} \sum_{s=1}^M f_1(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_1^{(s)}) \quad (2.10)$$

$$\hat{f}_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{M} \sum_{s=1}^M f_2(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_2^{(s)})$$

onde M é o número de valores gerados para cada parâmetro na amostra, $s = 1, \dots, M$.

Usualmente assumimos $f_1(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_1)$, onde $\boldsymbol{\theta}_1 = (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1)$ e $f_2(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_2)$, onde $\boldsymbol{\theta}_2 = (\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2)$ com distribuições Normais p -variada $N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1)$ e $N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2)$. Num caso mais geral podemos supor que $f_1(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_1)$ e $f_2(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_2)$ tenham distribuições t -Student p -variadas.

2.2 Classificação de duas populações Normais Multivariadas

Supor que $f_1(\mathbf{x})$ e $f_2(\mathbf{x})$ sejam densidades normais multivariadas, a primeira com vetor de média $\boldsymbol{\mu}_1$ e matriz de covariância $\boldsymbol{\Sigma}_1$ e a segunda com vetor de média $\boldsymbol{\mu}_2$ e matriz de covariância $\boldsymbol{\Sigma}_2$. Num caso especial, considerar também que $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \boldsymbol{\Sigma}$.

Seja a densidade conjunta de $\mathbf{X}' = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ para as populações π_1 e π_2 dadas por :

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) \right] \quad (2.11)$$

para $i = 1, 2$.

Supor que os parâmetros populacionais $\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2$ e $\boldsymbol{\Sigma}$ sejam conhecidos.

Neste caso, as regiões que minimizam o ECM são dadas por,

$$R_1 : \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2) \right\} \geq \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \left[\frac{p_2}{p_1} \right]$$

$$R_2 : \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2) \right\} < \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \right] \left[\frac{p_2}{p_1} \right] \quad (2.12)$$

Resultado 2.2. : *Sejam as populações π_1 e π_2 descritas por (2.11). A regra de alocação que minimiza o ECM é dada por:*

Alocar x_0 em π_1 se

$$(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} x_0 - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2) \geq \ln \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \frac{p_2}{p_1} \right] \quad (2.13)$$

caso contrário, alocar x_0 em π_2 .

Prova: (Johnson & Wichern, 1982).

Na maioria das situações, as quantidades populacionais $\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2$ e $\boldsymbol{\Sigma}$ são desconhecidas. Neste caso, alguns autores (ver por exemplo Anderson, T. W., 1984) sugerem a regra de alocação que minimiza o ECM para duas populações normais dada por:

Alocar x_0 em π_1 se

$$(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)' S_{pooled}^{-1} x_0 - \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)' S_{pooled}^{-1} (\bar{\mathbf{x}}_1 + \bar{\mathbf{x}}_2) \geq \ln \left[\frac{c(1|2)}{c(2|1)} \frac{p_2}{p_1} \right] \quad (2.14)$$

caso contrário alocar x_0 em π_2 .

Neste caso, estamos supondo que temos, n_1 observações de uma variável aleatória multivariada $X' = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ de π_1 e n_2 medidas desta quantidade para π_2 , com $n_1 + n_2 - 2 \geq p$. As respectivas matrizes de dados são:

$$X_1 = [x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n_1}]_{(p \times n_1)} \quad (2.15)$$

$$X_2 = [x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2n_2}]_{(p \times n_2)}$$

Para essas matrizes de dados, os vetores de médias e a matrizes de covariância são dados por,

$$\bar{x}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} x_{ij} \quad (2.16)$$

$$S_i = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - \bar{x}_i)(x_{ij} - \bar{x}_i)'$$

onde $i = 1, 2$

Supondo Σ comum, temos,

$$S_{pooled} = \frac{(n_1 - 1)S_1 + (n_2 - 1)S_2}{(n_1 + n_2 - 2)} \quad (2.17)$$

A expressão

$$w = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' S_{pooled}^{-1} x_0 - \frac{1}{2} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' S_{pooled}^{-1} (\bar{x}_1 + \bar{x}_2) \quad (2.18)$$

é conhecida como função (estatística) de classificação de Anderson ou Função Discriminante Linear (F.D.L).

Quando $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$, considerando as densidades normais multivariadas, dadas em (2.11) com Σ_i , $i = 1, 2$, no lugar de Σ , temos:

$$R_1 = -\frac{1}{2} x' (\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1}) x + (\mu_1' \Sigma_1^{-1} - \mu_2' \Sigma_2^{-1}) x - k \geq \ln \left[\frac{c(1|2) p_2}{c(2|1) p_1} \right] \quad (2.19)$$

$$R_2 = -\frac{1}{2} x' (\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1}) x + (\mu_1' \Sigma_1^{-1} - \mu_2' \Sigma_2^{-1}) x - k < \ln \left[\frac{c(1|2) p_2}{c(2|1) p_1} \right]$$

onde

$$k = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{|\Sigma_1|}{|\Sigma_2|} \right) + \frac{1}{2} (\mu_1' \Sigma_1^{-1} \mu_1 - \mu_2' \Sigma_2^{-1} \mu_2) \quad (2.20)$$

As regiões de classificação são definidas pelas funções quadráticas de x .

Resultado 2.3. : *Sejam as populações π_1 e π_2 descritas por densidades normais multivariadas com vetor de médias e matriz de covariância, respectivamente μ_1, Σ_1 e μ_2, Σ_2 . A regra de classificação que minimiza o custo esperado da classificação errada é dada por:*

Alocar x_0 em π_1 se

$$-\frac{1}{2}x_0'(\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1})x_0 + (\mu_1'\Sigma_1^{-1} - \mu_2'\Sigma_2^{-1})x_0 - k \geq \ln \left[\frac{c(1|2)p_2}{c(2|1)p_1} \right] \quad (2.21)$$

caso contrário, alocar x_0 em π_2

Na prática, μ_1, Σ_1 e μ_2, Σ_2 , são substituídos pelas respectivas quantidades amostrais $\bar{x}_1, \bar{x}_2, S_1$ e S_2 . Portanto, a regra de classificação quadrática ou Função Discriminante Quadrática (F.D.Q) é dada por:

Alocar x_0 em π_1 se

$$-\frac{1}{2}x_0'(S_1^{-1} - S_2^{-1})x_0 + (\bar{x}_1'S_1^{-1} - \bar{x}_2'S_2^{-1})x_0 - k \geq \ln \left[\frac{c(1|2)p_2}{c(2|1)p_1} \right] \quad (2.22)$$

caso contrário, alocar x_0 em π_2 .

2.3 Desempenho das Funções de Classificação

Uma maneira de julgar o desempenho de qualquer procedimento de classificação é calcular suas "taxas de erros" ou probabilidades de classificação erradas. Esses valores podem ser obtidos facilmente, quando as populações são conhecidas. No entanto, na prática isso ocorre raramente, e precisamos trabalhar com taxas de erros associados a função de classificação amostral. Esta função de classificação é construída, baseada no seu desempenho em amostras futuras.

A probabilidade total de classificação errada (*TPM*) é dado por:

$$TPM = p_1 \int_{R_2} f_1(x)dx + p_2 \int_{R_1} f_2(x)dx \quad (2.23)$$

O menor valor dessa quantidade é obtido pela escolha adequada de R_1 e R_2 (supondo custos de classificação erradas iguais), e é chamado de taxa de erro ótimo (*OER*).

Uma medida de desempenho que não depende das formas das populações e podem ser calculadas para qualquer procedimento de classificação, é dada pela taxa de erro aparente (*APER*), definida como a fração de observações na amostra piloto que são classificadas incorretamente pela função de classificação amostral. Para n_1 observações de π_1 e n_2 observações de π_2 , temos a Tabela de classificação 2.2 abaixo:

Tabela 2.2: Tabela de Classificação

		Membro pela Previsão	
		π_1	π_2
Membro	π_1	n_{1C}	$n_{1M} = n_1 - n_{1C}$
Verdadeiro	π_2	$n_{2M} = n_2 - n_{2C}$	n_{2C}

onde

n_{iC} : número de itens de π_i classificados corretamente como π_i .

n_{iM} : número de itens de π_i classificados incorretamente como π_j .

A taxa de erro aparente é então:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} \quad (2.24)$$

que é conhecida como proporção de itens na amostra piloto que são classificados incorretamente.

Na prática podemos dividir uma amostra em duas sub-amostras: uma amostra piloto (treino) para construir a função de classificação e outra para verificar o desempenho da função. Neste caso temos dois problemas:

- (i) Este procedimento requer uma amostra grande.
- (ii) A função avaliada não é a de interesse. Quase todos os dados devem ser considerados para construir a função de classificação, caso contrário o valor da informação pode não ser muito bom.

Outra técnica que parece funcionar bem é o procedimento “holdout” de Lachenbruch (ver Lachenbruch & Mickey, 1968).

1. Iniciar com o grupo de observações de π_1 . Omita uma observação desse grupo e desenvolva uma função de classificação baseada nas $n_1 - 1$ observações restantes.
2. Classifique essa observação omitida usando a função construída na etapa 1.
3. Repita passos 1 e 2 até classificar todas as observações. Seja n_{1M}^H : o número de holdout (H) observações classificadas incorretamente neste grupo.
4. Repita os passos 1 até 3 para observações de π_2 , calculando n_{2M}^H .

As estimativas de $\hat{P}(2|1)$ e $\hat{P}(1|2)$ são dadas por,

$$\hat{P}(2|1) = \frac{n_{1M}^{(H)}}{n_1} \quad \text{e} \quad \hat{P}(1|2) = \frac{n_{2M}^{(H)}}{n_2}, \quad (2.25)$$

e a estimativa da taxa de erros esperado $E(AER)$ é dada por:

$$\hat{E}(AER) = \frac{n_{1M}^{(H)} + n_{2M}^{(H)}}{n_1 + n_2} \quad (2.26)$$

2.4 Separação de Populações : Função Discriminante de Fisher.

A idéia de Fisher (Fisher, R.A, 1936) é transformar as observações multivariadas x em observações univariadas y , onde y 's provêm das populações π_1 e π_2 , separadas o máximo possível (aqui estamos considerando separação de duas populações).

O procedimento de Fisher não assume que as populações sejam normais. No entanto, assume-se que as matrizes de covariâncias populacionais sejam iguais.

Uma combinação linear fixada para os x 's tomam os valores $y_{11}, y_{12}, \dots, y_{1n_1}$ para as observações da população π_1 e os valores $y_{21}, y_{22}, \dots, y_{2n_2}$ para as observações da população π_2 . A separação desses dois conjuntos univariados y 's é feita em termos da diferença entre $\bar{y}_1$ e $\bar{y}_2$ relativo à variância dos y 's. Isto é:

$$sep. = \frac{|\bar{y}_1 - \bar{y}_2|}{s_y}, \quad \text{onde} \quad s_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^{n_1} (y_{1j} - \bar{y}_1)^2 + \sum_{j=1}^{n_2} (y_{2j} - \bar{y}_2)^2}{n_1 + n_2 - 2}.$$

O objetivo é selecionar a combinação linear de x para realizar a separação máxima das médias amostrais $\bar{y}_1$ e $\bar{y}_2$.

Resultado 2.4. : A combinação linear $y = \hat{\ell}'x = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)'S_{pooled}^{-1}x$ maximiza a razão:

$$\begin{aligned} \frac{(SQ \text{ de } \bar{y})}{Var(y)} &= \frac{(\bar{y}_1 - \bar{y}_2)^2}{s_y^2} \\ &= \frac{(\hat{\ell}'\bar{x}_1 - \hat{\ell}'\bar{x}_2)^2}{\hat{\ell}'S_{pooled}\hat{\ell}} \\ &= \frac{(\hat{\ell}'d)^2}{\hat{\ell}'S_{pooled}\hat{\ell}} \end{aligned} \quad (2.27)$$

sobre todos os possíveis coeficientes do vetor $\hat{\ell}$, onde $d = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)$ e s_y^2 também pode ser calculado como:

$$s_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^{n_1} (y_{1j} - \bar{y}_1)^2 + \sum_{j=1}^{n_2} (y_{2j} - \bar{y}_2)^2}{n_1 + n_2 - 2}. \quad (2.28)$$

com $y_{1j} = \hat{\ell}' x_{1j}$ e $y_{2j} = \hat{\ell}' x_{2j}$

O máximo da razão é dado por:

$$\max_{\hat{\ell}} \frac{(\hat{\ell}' d)^2}{\hat{\ell}' S_{pooled} \hat{\ell}} = d' S_{pooled}^{-1} d = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' S_{pooled}^{-1} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2) = D^2 \quad (2.29)$$

onde D^2 é a distância quadrada amostral entre as duas médias.

A solução de Fisher para o problema de separação pode ser usado para classificar novas observações.

Uma regra de alocação baseada na Função Discriminante de Fisher :

Alocar x_0 à π_1 se

$$y_0 = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' S_{pooled}^{-1} x_0 \geq \hat{m} = \frac{1}{2} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' S_{pooled}^{-1} (\bar{x}_1 + \bar{x}_2) \quad \text{ou} \quad (2.30)$$

$$y_0 - \hat{m} \geq 0.$$

caso contrário, alocar x_0 à π_2 .

Perceba que esta regra de classificação é dada em (2.13) quando $\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right) \left(\frac{p_2}{p_1}\right) = 1$.

Em resumo, para duas populações, a separação máxima relativa que pode ser obtida considerando a combinação linear das observações multivariadas é igual à distância D^2 . Isto pode ser conveniente porque pode ser usado em certas situações para testar se as médias populacionais μ_1 e μ_2 diferem significativamente. Consequentemente um teste para a diferença nos vetores de média pode ser visto como um teste para a significância da separação a ser realizada.

Suponha que as médias populacionais μ_1 e μ_2 sejam médias das distribuições normais multivariadas com uma matriz de covariância comum Σ . Um teste de $H_0 : \mu_1 = \mu_2$ contra $H_0 : \mu_1 \neq \mu_2$ é dado pela estatística

$$\left(\frac{n_1 + n_2 - p - 1}{(n_1 + n_2 - 2)p} \right) \left(\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} \right) D^2 \quad (2.31)$$

que tem uma distribuição F com $v_1 = p$ e $v_2 = n_1 + n_2 - p - 1$ graus de liberdade. Se H_0 é rejeitada, podemos concluir que a separação entre as duas populações π_1 e π_2 é significativa.

2.5 Classificação de Várias Populações

Nesta seção apresentamos a generalização dos procedimentos de classificação para $g > 2$ ou seja mais de 2 grupos.

2.5.1 Método do custo mínimo de classificação errada

Seja $f_i(x)$ a densidade associada a população π_i , para $i = 1, 2, \dots, g$ (Em geral considera-se $f_i(x)$, densidade normal multivariada, mas essa não é uma condição necessária)

Assim, sejam:

p_i : probabilidade a priori da população π_i .

$c(k|i)$: custo de alocar um item a π_k quando de fato, ele pertence a π_i , para $k, i = 1, 2, \dots, g$.

Para $k = i$, temos $c(i|i) = 0$. Finalmente, seja R_k o conjunto dos x 's classificados como π_k então:

$$P(k|i) = P(\text{classificar um item como } \pi_k | \pi_i) = \int_{R_k} f_i(x) dx, \quad \text{para } k, i = 1, 2, \dots, g.$$

com $P(i|i) = 1 - \sum_{k=1}^g P(k|i)$, para $k \neq i$.

O custo esperado condicional de uma classificação errada de um x de π_1 , em π_2 , ou $\pi_3, \dots$, ou π_g é:

$$ECM(1) = P(2|1)c(2|1) + P(3|1)c(3|1) + \dots + P(g|1)c(g|1) = \sum_{k=2}^g P(k|1)c(k|1) \quad (2.32)$$

Esse custo esperado condicional ocorre com probabilidade a priori p_1 , a probabilidade de π_1 .

Dê maneira similar calculamos $ECM(2), \dots, ECM(g)$. Portanto o custo esperado condicional geral de uma classificação errada é dado por:

$$\begin{aligned} ECM &= p_1 ECM(1) + p_2 ECM(2) + \dots + p_g ECM(g) \\ &= \sum_{i=1}^g p_i \left(\sum_{k=1}^g P(k|i)c(k|i) \right), \quad \text{para } k \neq i \end{aligned} \quad (2.33)$$

Resultado 2.5. : As regiões de classificação que minimizam o ECM são definidas por alocar x a população π_k , $k = 1, \dots, g$ quando

$$\sum_{i=1}^g p_i f_i(x) c(k|i), \quad \text{para } k \neq i \quad (2.34)$$

seja o menor possível.

Prova: (ver Anderson, T.W, 1984).

Um caso especial é dado quando todos os $c(k|i)$ são iguais. Neste caso temos:

Alocar x à população π_k se

$$p_k f_k(x) > p_i f_i(x), \quad \forall i \neq k \quad (2.35)$$

ou equivalentemente,

Alocar x à população π_k se

$$\ln p_k f_k(x) > \ln p_i f_i(x), \quad \forall i \neq k \quad (2.36)$$

Essa regra é idêntica a aquela que maximiza a probabilidade a “posteriori”,

$$P(\pi_k|x) = \frac{p_k f_k(x)}{\sum_{i=1}^g p_i f_i(x)} = \frac{(\text{priori}) * (\text{veross})}{\sum[(\text{priori}) * (\text{veross})]}, \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, g. \quad (2.37)$$

2.5.2 Classificação de Populações Normais

Considerar x com densidade,

$$f_i(x) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_i|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x - \mu_i)' \Sigma_i^{-1} (x - \mu_i) \right\} \quad i = 1, 2, \dots, g. \quad (2.38)$$

isto é, densidades normais multivariadas com vetor de média μ_i e matriz de covariância Σ_i . Se $c(i|i) = 0$ e $c(k|i) = 1$, para $k \neq i$ (custos iguais), então:

Alocar x à π_k se

$$\ln p_k f_k(x) = \ln p_k - \left(\frac{p}{2}\right) \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (x - \mu_k)' \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k) = \max_i \ln p_i f_i(x) \quad (2.39)$$

A constante $\left(\frac{p}{2}\right) \ln(2\pi)$ pode ser descartada, daí podemos definir o escore discriminante quadrático para a i -ésima população como,

$$d_i^Q(x) = -\frac{1}{2} \ln |\Sigma_i| - \frac{1}{2} (x - \mu_i)' \Sigma_i^{-1} (x - \mu_i) + \ln p_i \quad (2.40)$$

A regra que minimiza a probabilidade total de classificação errada para populações normais quando temos Σ_i diferentes, é dada por:

Alocar x à π_k se

$$d_k^Q(x) = \max(d_1^Q(x), d_2^Q(x), \dots, d_g^Q(x)) \quad (2.41)$$

Na prática μ_i e Σ_i não são conhecidos, assim os substituímos respectivamente pelas quantidades amostrais:

$\bar{x}_i$: Vetor de média amostral

S_i : Matriz de covariância amostral

onde n_i é o tamanho amostral de cada população.

Neste caso, o escore discriminante quadrático é definido por:

$$\tilde{d}_i^Q(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \ln |\mathbf{S}_i| - \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_i)' \mathbf{S}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_i) + \ln p_i \quad (2.42)$$

e a regra de classificação baseada na amostra é dada por :

Alocar $\mathbf{x}$ à π_k se

$$\tilde{d}_k^Q(\mathbf{x}) = \max(\tilde{d}_1^Q(\mathbf{x}), \tilde{d}_2^Q(\mathbf{x}), \dots, \tilde{d}_g^Q(\mathbf{x})) \quad (2.43)$$

Se as matrizes de covariâncias Σ_i são iguais, o escore discriminante quadrático é dado por:

$$d_i^Q(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \ln |\Sigma| - \frac{1}{2}(\mathbf{x})' \Sigma^{-1} \mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}_i' \Sigma^{-1} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_i' \Sigma^{-1} \boldsymbol{\mu}_i + \ln p_i, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, g. \quad (2.44)$$

Observar que os primeiros dois termos de $d_i^Q(\mathbf{x})$ são os mesmos para todo $i = 1, 2, \dots, g$, portanto podem ser ignorados para propósitos de classificação. Assim o escore linear de classificação é dado por:

$$d_i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}_i' \Sigma^{-1} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_i' \Sigma^{-1} \boldsymbol{\mu}_i + \ln p_i \quad (2.45)$$

Uma estimativa $\hat{d}_i(\mathbf{x})$, para o escore discriminante linear, baseado na estimativa "Spooled" da matriz de covariância é dado por:

$$\hat{d}_i(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{x}}_i' \mathbf{S}_{pooled}^{-1} \mathbf{x} - \frac{1}{2} \bar{\mathbf{x}}_i' \mathbf{S}_{pooled}^{-1} \bar{\mathbf{x}}_i + \ln p_i \quad (2.46)$$

Assim a regra de classificação fica na forma:

Alocar $\mathbf{x}$ à π_k se

$$\hat{d}_k(\mathbf{x}) = \max(\hat{d}_1(\mathbf{x}), \hat{d}_2(\mathbf{x}), \dots, \hat{d}_g(\mathbf{x})) \quad (2.47)$$

Podemos estimar a performance dessas regras de classificações amostrais, usando o procedimento de Lachenbruch(1968).

Se n_{iM}^H é o número de observações classificadas incorretamente no i -ésimo grupo, para $i = 1, 2, \dots, g$, então uma estimativa da taxa verdadeira de erro, $E(AER)$ é dada por:

$$\hat{E}(AER) = \frac{\sum_{i=1}^g n_{iM}^H}{\sum_{i=1}^g n_i} \quad (2.48)$$

2.6 Alguns exemplos ilustrativos.

Nesta seção apresentamos dois exemplos envolvendo o problema de classificação. Um exemplo é relacionado com Bioestatística (dados em Lee, 1980, p. 349-351) e outro relacionado com Geologia (dados em Johnson & Wichern, 1982, p. 568-569). Em ambos os casos o objetivo é discriminar (indivíduos e regiões) de acordo com algumas variáveis.

Exemplo 2.1. Neste estudo temos 71 pacientes com Leucemia, dos quais 37 respondem a um tratamento e os outros 34 não respondem a esse tratamento (ver Tabela 2.3). Ou seja vamos ter duas populações $g = 2$ e duas variáveis $p = 2$. Nosso objetivo é discriminar indivíduos nesses dois grupos (respondem ou não respondem ao tratamento) só com a informação das 2 variáveis x_1 (idade) e x_2 (LI%), onde (LI %) é a taxa de medicamento ou dose.

Na Tabela 2.3, temos a tabela de dados. Nas figuras 2.1 e 2.2 temos histogramas de cada variável, para cada grupo, para termos idéia sobre a forma dos mesmos:

Tabela 2.3: Idade, LI% e Resposta de 71 pacientes com leucemia

Idade	LI%	Resposta(*)	Idade	LI%	Resposta(*)
20	7	1	33	7	2
25	16	1	45	10	2
26	12	1	59	8	2
26	16	1	61	4	2
27	6	1	65	10	2
28	20	1	73	6	2
28	14	1	36	16	2
31	5	1	59	6	2
33	5	1	34	7	3
33	12	1	43	4	3
36	14	1	51	8	3
40	9	1	53	6	3
40	12	1	60	7	3
45	14	1	61	8	3
45	10	1	61	11	3
50	19	1	73	4	3
50	14	1	74	16	3
53	13	1	28	26	3
56	10	1	27	8	4
62	19	1	37	15	4
71	11	1	45	4	4
74	10	1	47	2	4
75	17	1	48	10	4
77	9	1	52	7	4
18	3	1	57	19	4
19	9	1	59	5	4
22	10	1	60	12	4
26	36	1	63	5	4
27	28	1	71	6	4
28	8	1	80	7	4
28	9	1	21	11	4
28	22	1	55	5	4
34	14	1	62	14	4
37	11	1	83	9	4
47	13	1			
56	15	1			
19	5	1			

(*) 1-Respondente; 2,3,4-Não Respondente

Fonte: Lee, E. T.; 1980

Figura 2.1: Histograma dos dados do grupo 1 (Respondente)

Figura 2.2: Histograma dos dados do grupo 2 (Não-Respondente)

Neste exemplo consideramos $\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right) \left(\frac{p_2}{p_1}\right) = 1$, ou seja, os custos de classificação errados e as probabilidades a priori iguais para cada grupo.

Primeiramente, considerando $\Sigma_i = \Sigma$, $i = 1, 2$, vamos verificar se a separação entre as duas populações é significativa ou seja testar se $H_0 : \mu_1 = \mu_2$ contra $H_0 : \mu_1 \neq \mu_2$.

Temos,

$$n_1 = 37, \quad n_2 = 34, \quad p_1 = 2$$

, assim

$$\bar{x}'_1 = (38.9189 \quad 12.8919); \quad S_1 = \begin{pmatrix} 287.0210 & 5.0465 \\ 5.0465 & 41.9880 \end{pmatrix}$$

e

$$\bar{x}'_2 = (54.0000 \quad 8.9118); \quad S_2 = \begin{pmatrix} 237.2121 & -18.7576 \\ -18.7576 & 24.9926 \end{pmatrix}$$

Conseqüentemente,

$$S_{pooled} = \frac{(n_1 - 1)S_1 + (n_2 - 1)S_2}{(n_1 + n_2 - 2)} = \begin{pmatrix} 263.1994 & -6.3380 \\ -6.3380 & 33.8595 \end{pmatrix}$$

e

$$S_{pooled}^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0038 & 0.0007 \\ 0.0007 & 0.0297 \end{pmatrix}$$

Logo

$$D^2 = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)' S_{pooled}^{-1} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2) = 1.2523$$

e

$$F = \left(\frac{n_1 + n_2 - p - 1}{(n_1 + n_2 - 2)p} \right) \left(\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} \right) D^2 = 10.9331$$

Ao nível de significância de 5% temos $F_{p,(n_1+n_2-p-1)}(0.05) = F_{2,68}(0.05) = 3.131670$. Como $F > F_{2,68}(0.05)$ rejeitamos H_0 , ou seja, existe uma diferença significativa entre μ_1 e μ_2 . Agora vamos utilizar as regras de classificação usuais, apoiados nos softwares "MiniTab 10.1 e MatLab 4.2".

Utilizando primeiro a Função Discriminante de Linear (F.D.L), ou seja, assumindo a normalidade dos dados e matriz de covariância comum, temos a seguinte tabela de classificação:

Tabela 2.4:Tabela de Classificação

Pela Função Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	29	78.38	8	21.62	37
Verdadeiro	π_2	8	23.53	26	76.47	34

Assim a taxa de erro aparente $APER$ é igual a:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{8 + 8}{37 + 34} = 0.2253$$

onde n_{iM} , $i = 1, 2$ é o número de classificações erradas para cada grupo ou seja, número de elemento que são do grupo i e foram classificados no grupo k onde $i, k = 1, 2$ com $i \neq k$.

Considerando Σ_i diferentes, vamos ter a Função Discriminante Quadrática (F.D.Q), para este caso temos os seguintes resultados.

Tabela 2.5:Tabela de Classificação

Pela Função Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	27	72.97	10	27.03	37
Verdadeiro	π_2	8	23.53	26	76.47	34

Assim a taxa de erro aparente $APER$ é igual a:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{10 + 8}{37 + 34} = 0.254$$

Percebemos um desempenho relativamente bom, quando utilizamos a F.D.L e um desempenho pior quando usamos a F.D.Q. Vamos verificar agora um exemplo com 3 populações e 5 variáveis.

Exemplo 2.2. Neste exemplo temos amostras de óleo cru de três zonas de arepito.

π_1 : Wilhelm

π_2 : Sub-Mulínia

π_3 : Upper(Mulínia, segunda subescala, primeira subescala)

Os valores de cada elemento são dados por,

x_1 : vanádio,

x_2 : ferro,

x_3 : berílio,

e duas medidas para os hidrocarbonetos:

x_4 : hidrocarbonetos saturados,

x_5 : hidrocarbonetos aromáticos,

Nosso objetivo é classificar cada observação com 5 variáveis em uma das 3 populações.

Na Tabela 2.6 temos os dados e nas figuras 2.1, 2.2 e 2.3 os respectivos histogramas para cada variável em cada grupo.

Tabela 2.6: Dados de Óleo cru

zona π_1				
x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
3.9	51.0	0.20	7.06	12.19
2.7	49.0	0.07	7.14	12.23
2.8	36.0	0.30	7.00	11.30
3.1	45.0	0.08	7.20	13.01
3.5	46.0	0.10	7.81	12.63
3.9	43.0	0.07	6.25	10.42
2.7	35.0	0.00	5.11	9.00
zona π_2				
x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
5.0	47.0	0.07	7.06	6.10
3.4	32.0	0.20	5.82	4.69
1.2	12.0	0.00	5.54	3.15
8.4	17.0	0.07	6.31	4.55
4.2	36.0	0.50	9.25	4.95
4.2	35.0	0.50	5.69	2.22
3.9	41.0	0.10	5.63	2.94
3.9	36.0	0.07	6.19	2.27
7.3	32.0	0.30	8.02	19.92
4.4	46.0	0.07	7.54	5.76
3.0	30.0	0.00	5.12	10.77

Continuação Tabela 2.5:

Zona π_3				
6.3	13.0	0.05	4.24	8.27
1.7	5.6	1.00	5.69	4.64
7.3	24.0	0.00	4.34	2.99
7.8	18.0	0.50	3.92	6.09
7.8	25.0	0.70	5.39	6.20
7.8	26.0	1.00	5.02	2.50
9.5	17.0	0.05	3.52	5.71
7.7	14.0	0.30	4.65	8.63
11.0	20.0	0.05	4.27	8.40
8.0	14.0	0.30	4.32	7.87
8.4	18.0	0.20	4.38	7.98
10.0	18.0	0.10	3.06	7.67
7.3	15.0	0.05	3.76	6.84
9.5	22.0	0.30	3.98	5.02
8.4	15.0	0.20	5.02	10.12
8.4	17.0	0.20	4.42	8.25
9.5	25.0	0.50	4.44	5.95
7.2	22.0	1.00	4.70	3.49
4.0	12.0	0.50	5.71	6.32
6.7	52.0	0.50	4.80	3.20
9.0	27.0	0.30	3.69	3.30
7.8	29.0	1.50	6.72	5.75
4.5	41.0	0.50	3.33	2.27
6.2	34.0	0.70	7.56	6.93
5.6	20.0	0.50	5.07	6.70
9.0	17.0	0.20	4.39	8.33
8.4	20.0	0.10	3.74	3.77
9.5	19.0	0.50	3.72	7.37
9.0	20.0	0.50	5.97	11.17
6.2	16.0	0.05	4.23	4.18
7.3	20.0	0.50	4.39	3.50
3.6	15.0	0.70	7.00	4.82
6.2	34.0	0.07	4.84	2.37
7.3	22.0	0.00	4.13	2.70
4.1	29.0	0.70	5.78	7.76
5.4	29.0	0.20	4.64	2.65
5.0	34.0	0.70	4.21	6.50
6.2	27.0	0.30	3.97	2.97

Fonte: Johnson & Wichern, 1982

Figura 2.3: Histograma dos Dados da Primeira Zona de Arenito

Figura 2.4: Histograma dos Dados da Segunda Zona de Arenito

Figura 2.5: Histograma dos Dados da Terceira Zona de Arenito

Para este exemplo, utilizamos as regras de classificação dadas na seção 2.5.2. Aqui, novamente consideramos $\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right) = 1$. Os procedimentos são equivalentes a classificação pela Função Discriminante Linear (F.D.L) e Função Discriminante Quadrática (F.D.Q), quando trabalhamos com duas populações.

No primeiro caso, consideramos as matrizes de covariâncias Σ_i iguais. Abaixo, apresentamos os seguintes resultados mostrados na Tabela 2.7, tabela de classificação, e a estimativa do erro de classificação *APER*.

Tabela 2.7:Tabela de Classificação

		Membro pelo Critério Discriminante						valor real
		π_1	taxa	π_2	taxa	π_3	taxa	
Membro	π_1	7	100.00	0	0.00	0	0.00	7
	π_2	1	9.09	10	90.91	0	0.00	11
Verdadeiro	π_3	0	0.00	3	7.89	35	92.11	38

Assim,

$$EC = \frac{n_{1M} + n_{2M} + n_{3M}}{n_1 + n_2 + n_3} = \frac{0 + 1 + 3}{7 + 11 + 38} = 0.0714.$$

Quando consideramos Σ_i diferentes, os resultados foram

Tabela 2.8:Tabela de Classificação

		Membro pelo Critério Discriminante						valor real
		π_1	taxa	π_2	taxa	π_3	taxa	
Membro	π_1	7	100.00	0	0.00	0	0.00	7
	π_2	0	0.00	10	90.91	0	0.00	11
Verdadeiro	π_3	0	0.00	1	2.63	37	97.36	38

Assim,

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M} + n_{3M}}{n_1 + n_2 + n_3} = \frac{0 + 1 + 1}{7 + 11 + 38} = 0.0357.$$

Pelas tabelas de classificação, percebemos uma considerável eficiência dos métodos, sendo que quando consideramos Σ_i diferentes conseguimos um melhor desempenho.

Percebemos que o desempenho dos métodos de classificação, nos exemplos acima, variam muito de caso para caso. No próximo capítulo, será mostrado o desempenho dessas regras de classificação, quando aplicamos diferentes metodologias de transformação de dados, baseados na transformação Box & Cox.

Capítulo 3

Classificação e Discriminação com Dados Transformados

Na maioria dos exemplos utilizados para os problemas de classificação e discriminação considera-se que o vetor x de observações tenha uma distribuição normal multivariada (ver por exemplo Anderson, T.W, 1984; Johnson, R.A & Wichern, D.W, 1982). No entanto quando o vetor x não se aproxima muito dessa distribuição, os procedimentos de classificação usuais podem não ser tão eficientes. Uma alternativa para o problema seria a transformação dos dados para a forma normal (ver por exemplo Box & Cox, 1964).

Neste capítulo descrevemos o procedimento de transformação de Box-Cox para o caso univariado e multivariado, apresentamos alternativas Bayesianas a partir dessa transformação, considerando as funções de verossimilhança perfilada e completa. Utilizamos os dados do exemplo visto no capítulo anterior, que foram transformados e depois efetuamos os procedimentos de classificação. Os resultados foram comparados.

3.1 Transformação dos dados para a forma Normal: Caso Univariado.

Box & Cox (1964), introduz uma transformação que aproxima x de uma distribuição normal dada por:

$$x^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{x^\lambda - 1}{\lambda} & \text{se } \lambda \neq 0, \\ \ln(x) & \text{se } \lambda = 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

Na prática podemos ter dificuldade para encontrar um valor de λ que viabilize tal transformação. O procedimento usado é assumir $y = x^{(\lambda)} \sim N(\mu, \sigma^2)$. Assim

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (y - \mu)^2 \right\} \quad (3.2)$$

isto é,

$$f(x^\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (x^{(\lambda)} - \mu)^2 \right\} \quad (3.3)$$

De (3.1), temos

$$y = \frac{x^\lambda - 1}{\lambda}, \quad \text{isto é,} \quad x^\lambda = \lambda y + 1.$$

Portanto,

$$x = (\lambda y + 1)^{\frac{1}{\lambda}} \quad \text{e} \quad \frac{dx}{dy} = \frac{1}{\lambda} (\lambda y + 1)^{\frac{1}{\lambda} - 1} \lambda$$

Assim

$$\frac{dx}{dy} = (x^\lambda)^{\frac{1}{\lambda} - 1}, \quad \text{isto é,} \quad \left| \frac{dx}{dy} \right| = x^{1-\lambda}, \quad \text{ou} \quad \left| \frac{dy}{dx} \right| = x^{\lambda-1}.$$

Portanto,

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (x^{(\lambda)} - \mu)^2 \right\} x^{\lambda-1} \quad (3.4)$$

3.1.1 Função de Verossimilhança para λ , μ e σ^2

Seja $x_1, x_2, \dots, x_n$ uma amostra aleatória de tamanho n . A função de verossimilhança para λ , μ e σ^2 é dada por:

$$L(\lambda, \mu, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 \right\} \prod_{i=1}^n x_i^{\lambda-1} \quad (3.5)$$

O logaritmo da verossimilhança é dado por,

$$l(\lambda, \mu, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 + (\lambda - 1) \ln \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \quad (3.6)$$

Fixado λ , os E.M.V's de μ e σ^2 são encontrados pelas equações

$$\frac{\partial l}{\partial \mu} = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu) = 0$$

e

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 = 0,$$

de onde vamos ter,

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^{(\lambda)}}{n} = \overline{x^{(\lambda)}} \quad (3.7)$$

e

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \overline{x^{(\lambda)}})^2 \quad (3.8)$$

Nosso objetivo agora é determinar $\hat{\lambda}$.

3.1.2 Uso do logaritmo da função de verossimilhança perfilada (“Profile Log-Likelihood”).

Substituindo os estimadores encontrados (3.7) e (3.8) na expressão (3.6), chegamos numa expressão, a menos de constantes, que envolve somente λ e os dados, dada por:

$$l(\lambda) = -\frac{n}{2} \ln \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i^\lambda - \overline{x^\lambda})^2 \right] + (\lambda - 1) \sum_{i=1}^n \ln x_i \quad (3.9)$$

A partir da equação perfilada (3.9) podemos encontrar λ , que maximiza tal expressão. Primeiro atribuímos um intervalo grande para λ a qual suspeitamos conter o ponto de máximo e através de várias tentativas, selecionamos o mais indicado. Identificado o intervalo, particionamos o mesmo de acordo com a precisão requerida e testamos cada ponto substituindo na expressão acima, até encontrar um ponto tal que maximize-a. Encontrado o valor de λ , realizar a transformação de acordo com

$$x^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{x^\lambda - 1}{\lambda} & \text{se } \lambda \neq 0, \\ \ln(x) & \text{se } \lambda = 0. \end{cases}$$

Encontrar tal estimativa com uma boa precisão, requer um grande número de operações que só se viabiliza com a utilização de recursos computacionais. Esses programas foram desenvolvidos usando o software Matlab 4.2.

3.2 Transformação de Dados Multivariados (TBox).

Seja x um vetor aleatório $(p \times 1)$. Para efetuarmos o procedimento de transformação de Box-Cox, temos que encontrar os valores $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_p$ que maximizam conjuntamente a expressão:

$$l(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p) = -\frac{n}{2} \ln |S(\lambda)| + (\lambda_1 - 1) \sum_{j=1}^n \ln x_{1j} + (\lambda_2 - 1) \sum_{j=1}^n \ln x_{2j} + \dots + (\lambda_p - 1) \sum_{j=1}^n \ln x_{pj}. \quad (3.10)$$

que é a generalização de (3.9), onde $S(\lambda)$ é a matriz de covariância calculada a partir da matriz de dados transformados

$$x_j^\lambda = \begin{pmatrix} \frac{x_{1j}^{\lambda_1} - 1}{\lambda_1} \\ \frac{x_{2j}^{\lambda_2} - 1}{\lambda_2} \\ \vdots \\ \frac{x_{pj}^{\lambda_p} - 1}{\lambda_p} \end{pmatrix}; \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Este procedimento é muito trabalhoso e requer um grande esforço computacional. Se $p > 3$ o problema fica bastante complicado.

Para simplificação, selecionamos uma transformação Box-Cox para cada variável como no caso univariado e daí estimamos os λ 's para aplicar a transformação.

Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ os parâmetros para cada transformação, cada λ_k pode ser selecionado maximizando,

$$l_k(\lambda) = -\frac{n}{2} \ln \left[\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(x_{kj}^{(\lambda_k)} - \overline{x_k^{\lambda_k}} \right)^2 \right] + (\lambda_k - 1) \sum_{j=1}^n \ln x_{kj} \quad (3.11)$$

para $k = 1, 2, \dots, p$; $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_p)$.

Com $x_{k1}, x_{k2}, \dots, x_{kn}$, n observações na k -ésima variável, temos,

$$\overline{x_k^{\lambda_k}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{kj}^{(\lambda_k)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\frac{x_{kj}^{\lambda_k} - 1}{\lambda_k} \right)$$

Assim, a j -ésima observação transformada é dada por,

$$x_j^{\hat{\lambda}} = \begin{pmatrix} \frac{x_{1j}^{\hat{\lambda}_1} - 1}{\hat{\lambda}_1} \\ \vdots \\ \frac{x_{2j}^{\hat{\lambda}_2} - 1}{\hat{\lambda}_2} \\ \vdots \\ \frac{x_{pj}^{\hat{\lambda}_p} - 1}{\hat{\lambda}_p} \end{pmatrix}; \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

onde $\hat{\lambda} = (\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_p)$, maximiza individualmente (3.11).

Este procedimento é equivalente a levar cada distribuição marginal próxima da distribuição Normal. Isso não garante a normalidade multivariada, mas na prática pode melhorar muito a aproximação para a distribuição Normal Multivariada.

Uma alternativa para o problema, seria a utilização de procedimentos Bayesianos e o uso de MCMC para gerar amostras dos parâmetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$. Daí, encontramos $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_p$ que maximizam conjuntamente a expressão (3.10).

3.3 Enfoque Bayesiano para a transformação Box-Cox (TBox1).

Dada a dificuldade que envolve a transformação de $x_{p \times 1}$, um vetor aleatório de dados multivariados para a forma normal multivariada, o uso dos procedimentos Bayesianos, considerando, distribuições a priori apropriadas para os parâmetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$, conjuntamente com o uso de métodos MCMC (Monte Carlo em Cadeias de Markov), se mostrou uma boa alternativa para o problema da transformação.

3.3.1 Distribuições a priori para os parâmetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$

Consideramos distribuições a priori informativas para os parâmetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$. Assim, vamos propor distribuições Normais, como por exemplo, $N(a_k, b_k^2)$, onde a_k e b_k^2 são conhecidos e variam para cada λ_k , $k = 1, \dots, p$.

Como não temos um algoritmo eficiente para a estimação da moda, a escolha de distribuições a priori normais facilita tal estimação.

3.3.2 Distribuição a posteriori conjunta para os parâmetros

A função de verossimilhança perfilada para $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ é dada por,

$$L(\lambda_1, \dots, \lambda_p) = \exp \left\{ -\frac{n}{2} \ln |S(\lambda)| + \sum_{k=1}^p \sum_{j=1}^n (\lambda_k - 1) \ln(x_{kj}) \right\}$$

Assumindo as distribuições a priori Normais independentes, a distribuição a priori conjunta para $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ é dada por,

$$\pi(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p) = \prod_{k=1}^p N(a_k, b_k^2). \quad (3.12)$$

Portanto a distribuição a posteriori conjunta pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \pi(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p | x_1^{(\lambda_1)}, x_2^{(\lambda_2)}, \dots, x_p^{(\lambda_p)}) &\propto \pi(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p) L(\lambda_1, \dots, \lambda_p) \\ &\propto \left(\prod_{k=1}^p N(a_k, b_k^2) \right) \exp \left\{ -\frac{n}{2} \ln |S(\lambda)| + \sum_{k=1}^p \sum_{j=1}^n \lambda_k \ln(x_{kj}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

3.3.3 Distribuições Condicionais a Posteriori necessárias para o algoritmo Gibbs Sampling.

Da expressão (3.13), vamos derivar as distribuições condicionais, necessárias para a gerar amostras via simulação MCMC para análise Bayesiana.

Para cada parâmetro λ_k , ($k = 1, \dots, p$) a distribuição condicional tem a forma

$$\pi(\lambda_k | \lambda_{k'}, x^{(\lambda)}) \propto N(a_k, b_k^2) \exp \left\{ -\frac{n}{2} |S(\lambda)| + \lambda_k \sum_{j=1}^n \ln x_{kj} \right\}; \quad (3.14)$$

onde $\lambda_{k'} = (\lambda_1, \dots, \lambda_{k-1}, \lambda_{k+1}, \dots, \lambda_p)$

Neste caso vamos utilizar o algoritmo Metropolis-Hastings, onde os núcleos para a geração dos candidatos λ_k 's são as distribuições $N(a_k, b_k^2)$ e as probabilidades de acei-

tação são calculadas por

$$\min \left\{ \frac{\Psi_k(\lambda^{(s+1)}, \bar{x}^\lambda)}{\Psi_k(\lambda^{(s)}, \bar{x}^\lambda)}, 1 \right\} \quad (3.15)$$

onde $s + 1$ indica a iteração atual e s a iteração anterior e,

$$\Psi_k(\cdot) = \exp \left\{ -\frac{n}{2} \ln |S(\lambda)| + \lambda_k \sum_{j=1}^n \ln(x_{kj}) \right\}.$$

Gerada e selecionada a amostra de parâmetros λ_k para $k = 1, \dots, p$, calculamos para cada conjunto a moda amostral que é uma estimativa dos λ_k que maximizam (3.10) conjuntamente.

3.4 Outro Enfoque Bayesiano: O uso da Função de Verossimilhança Completa (TBox2).

Na seção anterior, utilizamos o logaritmo da função de verossimilhança perfilada para encontrar as estimativas dos parâmetros de transformação.

Dentro do enfoque Bayesiano, a utilização da verossimilhança perfilada pode ser perigoso devido a forte influência da distribuição a priori no modelo.

Nesta seção tentamos uma alternativa para este problema, utilizando a função de verossimilhança completa e distribuições a priori apropriadas.

3.4.1 Estimação dos parâmetros de transformação: caso univariado.

Dado $x_1, x_2, \dots, x_n$ uma amostra aleatória de tamanho n , a função de verossimilhança completa para o caso univariado foi dada em (3.5) como,

$$L(\lambda, \mu, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 \right\} \prod_{i=1}^n x_i^{\lambda-1}$$

Vamos considerar distribuições a priori para λ, μ e σ^2 dadas por,

$$\begin{aligned} \mu &\sim N(\mu_0, \sigma_0^2), \text{ onde } \mu_0 \text{ e } \sigma_0^2 \text{ são conhecidos.} \\ \sigma^2 &\sim IG(a, \frac{1}{b}), \text{ onde } a \text{ e } b \text{ são conhecidos.} \\ \lambda &\sim N(c, d^2), \text{ onde } c \text{ e } d \text{ são conhecidos.} \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $N(\mu_0, \sigma_0^2)$ é uma distribuição Normal com parâmetros μ_0 e σ_0^2 , $IG(a, \frac{1}{b})$ é uma distribuição Gama Invertida com parâmetros a e $\frac{1}{b}$, e $N(c, d^2)$ também é uma distribuição Normal com parâmetros c e d^2 .

Assumindo que as distribuições a priori sejam independentes, a distribuição conjunta para λ, μ e σ^2 é dada por,

$$\pi(\lambda, \mu, \sigma^2) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} (\mu - \mu_0)^2 \right\} (\sigma^2)^{-(a+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{\sigma^2 b} \right\} N(c, d^2) \quad (3.17)$$

Portanto a distribuição a posteriori conjunta é dada por,

$$\begin{aligned} \pi(\lambda, \mu, \sigma^2 | D) &\propto (\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 \right\} \left[\prod_{i=1}^n x_i^{\lambda-1} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} (\mu - \mu_0)^2 \right\} \\ &(\sigma^2)^{-(a+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{\sigma^2 b} \right\} N(c, d^2) \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde $D = \{x_1, \dots, x_n\}$.

As distribuições condicionais a posteriori necessárias para o algoritmo Gibbs Sampling para cada parâmetro são dadas abaixo.

Para σ^2 temos,

$$\pi(\sigma^2 | \mu, \lambda, D) \propto (\sigma^2)^{-(\frac{n}{2} + a + 1)} \exp \left\{ -\frac{1}{\sigma^2 \left(\frac{1}{b} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 \right)} \right\}$$

Portanto,

$$(\sigma^2 | \mu, \lambda, D) \sim IG \left(\frac{n}{2} + a, \left(\frac{1}{b} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 \right)^{-1} \right) \quad (3.19)$$

Para μ vamos ter,

$$\pi(\mu | \sigma^2, \lambda, D) \propto \left[\prod_{i=1}^n \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (x_i^{(\lambda)} - \mu)^2 \right\} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} (\mu - \mu_0)^2 \right\}.$$

Desenvolvendo esta expressão, temos,

$$(\mu | \sigma^2, \lambda, D) \sim N(b_1, a_1^{-1}) \quad (3.20)$$

onde

$$b_1 = \frac{\frac{\mu_0}{\sigma_0^2} + \frac{\eta \bar{x}_i^{(\lambda)}}{\sigma^2}}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{\eta}{\sigma^2}} \quad \text{e} \quad a_1^{-1} = \frac{1}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{\eta}{\sigma^2}}.$$

Para λ vamos ter,

$$\pi(\lambda | \mu, \sigma^2, D) \propto N(c, d^2) \Psi_1(\cdot) \quad (3.21)$$

onde

$$\begin{aligned} \Psi_1(\cdot) &= \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^\lambda - \mu)^2 \right\} \prod_{i=1}^n x_i^{\lambda-1} \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i^\lambda - \mu)^2 + (\lambda - 1) \sum_{i=1}^n \ln(x_i) \right\} \end{aligned}$$

Portanto neste caso utilizamos o algoritmo Gibbs Sampling para a geração das amostras dos parâmetros de σ^2 e μ , juntamente com o algoritmo Metropolis-Hastings para a geração da amostra do parâmetro λ , onde o núcleo de geração é uma distribuição $N(c, d^2)$, com o valor $\Psi_1(\cdot)$ usado no cálculo de aceitação.

3.4.2 Estimação dos parâmetros de transformação: caso multivariado.

Para o caso multivariado temos,

$$y_i = x_i^{(\lambda)} = (x_{i1}^{(\lambda_1)}, \dots, x_{ip}^{(\lambda_p)})$$

no qual y_i é um vetor aleatório i.i.d na forma $N_p(\mu, \Sigma)$, $i = 1, \dots, n$.

Ou seja,

$$f(x_i^{(\lambda)} | \mu, \Sigma) = (2\pi)^{-\frac{p}{2}} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x_i^{(\lambda)} - \mu)' \Sigma^{-1} (x_i^{(\lambda)} - \mu) \right\} \quad (3.22)$$

Aqui,

$$x_{ik}^{(\lambda_k)} = \begin{cases} \frac{x_{ik}^{\lambda_k - 1}}{\lambda_k} & \text{se } \lambda_k \neq 0, \\ \ln(x_{ik}) & \text{se } \lambda_k = 0 \end{cases}$$

para $k = 1, \dots, p$.

Fazendo a transformação temos,

$$f(x_i | \lambda, \mu, \Sigma) \propto |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x_i^{(\lambda)} - \mu)' \Sigma^{-1} (x_i^{(\lambda)} - \mu) \right\} |J| \quad (3.23)$$

onde

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_p} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_2}{\partial x_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_p}{\partial x_1} & \frac{\partial y_p}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_p}{\partial x_p} \end{pmatrix}$$

com

$$y_k = x_k^{(\lambda_k)} = \begin{cases} \frac{x_k^{\lambda_k - 1}}{\lambda_k} & \text{se } \lambda_k \neq 0, \\ \ln(x_k) & \text{se } \lambda_k = 0 \end{cases}$$

para $k = 1, \dots, p$.

Daí,

$$|J| = \begin{vmatrix} x_1^{\lambda_1 - 1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_2^{\lambda_2 - 1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & x_p^{\lambda_p - 1} \end{vmatrix} = \prod_{k=1}^p x_k^{\lambda_k - 1}$$

Com n observações x_i independentes temos,

$$L(\lambda, \mu, \Sigma) \propto |\Sigma|^{-\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i^{(\lambda)} - \mu)' \Sigma^{-1} (x_i^{(\lambda)} - \mu) \right\} \prod_{i=1}^n \prod_{k=1}^p x_{ik}^{\lambda_k - 1} \quad (3.24)$$

Vamos considerar as distribuições a priori para μ e Σ propostas por Press, S.J (1972) e Box & Tiao (1976), que são dadas por,

$$\pi(\mu) \propto \text{constante}$$

$$\pi(\Sigma) \propto |\Sigma|^{-\frac{1}{2}(p+1)} \quad (3.25)$$

$$\pi(\lambda) \propto \prod_{k=1}^p N(a_k, b_k), \text{ com } a_k, b_k \text{ conhecidos.}$$

Assumindo que as distribuições a priori sejam independentes, a distribuição a posteriori conjunta é dada por,

$$\pi(\mu, \Sigma, \lambda | D) \propto |\Sigma|^{-\frac{1}{2}(n+p+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i^{\lambda} - \mu)' \Sigma^{-1} (x_i^{\lambda} - \mu) \right\} \prod_{i=1}^n \prod_{k=1}^p x_{ik}^{\lambda_k - 1} \quad (3.26)$$

Isto é,

$$\pi(\mu, \Sigma, \lambda | D) \propto |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{n}{2} \left[\left(\mu - \bar{x}^{(\lambda)} \right)' \Sigma^{-1} \left(\mu - \bar{x}^{(\lambda)} \right) \right] \right\} |\Sigma|^{-\frac{(n-1)}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr}[\Sigma] \right\} \exp \left\{ \sum_{k=1}^p \sum_{i=1}^n \lambda_k \ln(x_{ki}) \right\} \quad (3.27)$$

onde

$$V = \sum_{i=1}^n \left(x_i^{(\lambda)} - \bar{x}^{(\lambda)} \right) \left(x_i^{(\lambda)} - \bar{x}^{(\lambda)} \right)'$$

As distribuições condicionais para o algoritmo Gibbs Sampling, são dadas por,

$$\pi(\mu | \Sigma, \lambda, D) \propto \exp \left\{ -\frac{n}{2} \left[\left(\mu - \bar{x}^{(\lambda)} \right)' \Sigma^{-1} \left(\mu - \bar{x}^{(\lambda)} \right) \right] \right\}$$

Portanto,

$$(\mu | \Sigma, \lambda, D) \sim N_p \left(\bar{x}^{(\lambda)}, \frac{1}{n} \Sigma^{-1} \right) \quad (3.28)$$

Para Σ temos,

$$\begin{aligned} \pi(\Sigma | \mu, \lambda, D) &\propto |\Sigma|^{-\frac{1}{2}(n+p+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\left(x_i^{(\lambda)} - \mu \right)' \Sigma^{-1} \left(x_i^{(\lambda)} - \mu \right) \right] \right\} \\ &\propto |\Sigma|^{-\frac{1}{2}(n+p+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr}[\Sigma^{-1} P] \right\} \end{aligned}$$

onde

$$P = \sum_{i=1}^n \left(x_i^{(\lambda)} - \mu \right) \left(x_i^{(\lambda)} - \mu \right)'$$

Portanto,

$$(\Sigma | \mu, \lambda, D) \sim Inv - Wishart_n(P^{-1}) \quad (3.29)$$

onde $Inv - Wishart_v(S^{-1})$ denota uma distribuição Wishart Invertida com v graus de liberdade com densidade,

$$f(W) \propto |W|^{-\frac{1}{2}(v+q+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr}[SW^{-1}] \right\},$$

S é uma matriz escalar quadrada $q \times q$, simétrica e definida positiva e W é definida positiva.

Finalmente, para λ vamos ter,

$$(\lambda | \Sigma, \mu, D) \propto \prod_{k=1}^p N(a_k, b_k) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr}[\Sigma^{-1} P] \pm \sum_{k=1}^p \sum_{i=1}^n \lambda_k \ln(x_{ki}) \right\} \quad (3.30)$$

3.5 Procedimentos de Simulação e Diagnóstico de Convergência.

De forma geral, para os algoritmos MCMC, podemos gerar uma ou várias cadeias independentes para cada parâmetro de interesse. Quando geramos várias cadeias, este procedimento evita que uma parte significativa do espaço de parâmetros não seja explorado, sendo que o descarte inicial para cada cadeia protege contra estimativas viciadas devido à influência das condições iniciais (ver por exemplo, Gelman et al, 1995). No entanto pode-se também gerar uma única longa cadeia e descartar parte significativa da mesma. Verificado a convergência em ambos os casos, um ponto fundamental em simulação MCMC é a maneira como selecionamos as amostras obtidas. Temos, para cada cadeia gerada, que descartar uma quantidade inicial (burn-in) e tomar as observações restantes em saltos, por exemplo tomar de 10 em 10 observações, formando a amostra final selecionada. Este procedimento de obtenção de amostras é muito útil, principalmente para o algoritmo Metropolis-Hastings, pois diminui a correlação entre os valores repetidos devido rejeição durante o teste de aceitação.

Nos exemplos ilustrados, aplicamos os dois procedimentos, para a estimação a partir da verossimilhança perfilada usamos várias cadeias e para a verossimilhança completa usamos uma única longa cadeia.

Para o diagnóstico de convergência, no caso de várias cadeias, utilizamos o método de Gelman & Rubin (ver Gelman & Rubin, 1992) e o critério de Geweke (ver Geweke, J; 1992) para o caso de uma única cadeia.

3.6 Alguns Exemplos Numéricos

Nesta seção vamos nos voltar para os exemplos do capítulo 2, efetuando as transformações dos dados via Box & Cox, utilizando o procedimento clássico (TBox) e os procedimentos Bayesianos (TBox1 e TBox2).

Exemplo 3.1. *Agora, vamos utilizar os dados do exemplo 2.2, aplicar os métodos de transformação Box-Cox clássico e o enfoque Bayesiano, realizar os procedimentos de classificação e verificar o ganho ou não na taxa de classificação para cada caso.*

3.6.1 Estimação dos parâmetros de transformação via Box-Cox Clássico (TBox).

Para estimar os parâmetros de transformação λ_1 e λ_2 , fizemos alguns testes através de inspeções gráficas e definimos o intervalo comum $[-5; 5]$. Este intervalo foi particionado de 0.01 em 0.01, totalizando 1000 pontos. Cada ponto foi testado na função perfilada e comparados, sendo selecionados os pontos que maximizarão a função. Foi usado o software "MatLab" para a execução do algoritmo. Os resultados são mostrados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Estimativas (TBox)

λ_1	λ_2
0.45	0.12

3.6.2 Estimação dos parâmetros de transformação via Box & Cox Bayesiano (TBox1).

Para este procedimento, assumimos as distribuições a priori, descritas anteriormente, sendo a escolha para os valores dos parâmetros e as condições iniciais, feitas de forma arbitrária, tomando como base várias simulações feitas ao longo do experimento.

Neste exemplo, geramos 5 cadeias de 2000 observações para cada parâmetro, descartamos as 500 amostras iniciais de cada cadeia "burn-in" e tomamos o restante de 10 em 10, totalizando uma amostra final de 150 observações para cada parâmetro. Nas Tabelas 3.2, 3.3 e 3.4 temos os valores escolhidos para os parâmetros a priori, as condições iniciais e o resumo dos resultados.

Tabela 3.2: Parâmetros a priori.

parâmetros	a_k	b_k
λ_1	0.45	0.60
λ_2	0.12	0.25

Tabela 3.3: Condições Iniciais

λ_1	0.3	0.3625	0.425	0.4875	0.55
λ_2	-0.05	-0.0125	0.0250	0.0625	0.1

Tabela 3.4:Resumo dos Resultados

	Média	Moda	Desvio	(inf.)IC 95%	(sup.)IC 95%	GR	Aceitação
λ_1	0.486	0.52	0.2828	-0.0667	1.0033	1.0012	55.30%
λ_2	0.139	0.135	0.153	-0.1667	0.436	0.9984	67.15%

Nos procedimentos Bayesianos, damos particular importância as estatísticas referentes ao critério de convergência, aqui utilizamos o critério de Gelman & Rubin “GR”, que neste caso se mostrou plenamente satisfatório, próximo de 1, o que garante a convergência e também quando trabalhamos com o algoritmo Metropolis-Hastings, nos preocupamos com a taxa de aceitação, que neste caso também se mostrou aceitável. Abaixo nas Figuras 3.1 e 3.2, temos os gráficos de convergência e as densidades marginais a posteriori.

Figura 3.1: Convergência para os parâmetros.

Figura 3.2: Densidades Marginais a Posteriori

3.6.3 Estimação dos parâmetros de transformação via Box & Cox Bayesiano (TBox2).

Nesta seção tentamos propor uma outra alternativa para o problema de transformação. No entanto não fomos muito felizes, com relação ao procedimento usado e aos resultados obtidos.

Dificuldades Surgidas

Percebemos alguns problemas neste procedimento para estimarmos os parâmetros de transformação. A convergência requerida pelo método MCMC, só foi conseguida quando atribuímos uma distribuição a priori para os parâmetros muito informativa, ou seja, com variância muito baixa. Outro fato que nos preocupa e que percebemos ao longo da execução do algoritmo é que as estimativas de Σ e μ variam muito de acordo com os parâmetros atribuídos para as distribuições a priori dos λ 's, sempre convergindo. Enfim, é um procedimento que ainda nos gera dúvidas, portanto não aconselhamos seu uso da forma apresentada.

Procedimento de Estimação

Para estimação dos parâmetros utilizamos o algoritmo Gibbs Sampling com Metropolis-Hastings, onde geramos uma única grande cadeia com 10000 valores, descartamos os 4000 valores iniciais e tomamos de 20 em 20 totalizando uma amostra final de 300 valores para cada parâmetro. Como temos uma cadeia, utilizamos o critério de convergência de Geweke (ver Geweke, J; 1992). Nas Tabelas 3.5, 3.6 e 3.7 temos as condições iniciais, os valores escolhidos para os parâmetros a priori e o resumo dos resultados.

Tabela 3.5: Condições Iniciais

λ_1	λ_2	μ_1	μ_2	σ_1^2	σ_2^2	σ_{12}
0.42	0.11	10	2.2	6	-0.5	0.6

Tabela 3.6: Parâmetros a priori.

parâmetros	a_k	b_k
λ_1	0.46	0.005
λ_2	0.13	0.0065

Tabela 3.7: Resumo dos Resultados

	Média	Desvio	(inf.)IC 95%	(sup.)IC 95%	GW	Aceitação
λ_1	0.4673	0.0053	0.4569	0.4772	0.1992	33.79%
λ_2	0.1360	0.0064	0.1240	0.1483	0.0266	47.24%
μ_1	10.44	0.294	9.9065	11.07	0.0263	-
μ_2	2.66	0.09	2.50	2.85	0.033	-
σ_1^2	6.025	1.1437	4.29	8.78	0.085	-
σ_2^2	0.72	0.13	0.50	1.026	0.01	-
σ_{12}	-0.85	0.2961	-1.50	-0.32	0.019	-

Neste caso, conseguimos bons resultados para o “GW” e para a taxa de rejeição. Nas Figuras 3.3 e 3.4, temos os gráficos de convergência e as densidades marginais a posteriori.

Figura 3.3: Convergência para os parâmetros.

Figura 3.4: Densidades Marginais a Posteriori.

3.6.4 Comparação das transformações e dos procedimentos de Classificação.

Estimados os parâmetros de transformação por todos os procedimentos propostos, verificamos visualmente através do Qui-Quadrado Plot (ver Johnson & Wichern;1982) a normalidade multivariada para os dados sem transformação e com transformação.

Figura 3.5: Teste de Normalidade Multivariada $p=2$.

O teste acima, nos leva a acreditar que quando aplicamos os procedimentos de transformação a normalidade melhora, não tendo muita distinção entre os procedimentos propostos. Abaixo na Tabela 3.8, verificamos o desempenho dos critérios de classificação (F.D.L. e F.D.Q.) quando utilizamos os diferentes procedimentos de transformação

Tabela 3.8: Taxa de Erro Aparente (APER)

	DST	Tbox	Tbox1	Tbox2
FDL	0.2254	0.2394	0.2394	0.2394
FDQ	0.2535	0.2113	0.2113	0.2113

Verificamos que em todas as transformações, os efeitos nas taxas de classificação foram os mesmos para os procedimentos usados. No caso da F.D.L., dado as condições iniciais $\left(\frac{c(1/2)}{c(2/1)}\right) \left(\frac{p_2}{p_1}\right) = 1$, vamos acabar caindo na Função Discriminante Linear de Fisher. Neste caso, o fator normalidade não necessariamente melhora os resultados da classificação. Percebemos que as taxas de erro aumentaram, no entanto, com a normalidade temos propriedades ótimas que poderão garantir melhor estes resultados.

Já para F.D.Q., o fator normalidade e a condição de que as matrizes de covariâncias sejam diferentes são essenciais para uma boa classificação. Percebemos que neste caso a taxa de classificação errada diminuiu. Em relação aos métodos de transformação não houve nenhum destaque.

3.6.5 Resultados para dados transformados de ordem $p > 2$.

Nesta seção vamos apresentar os resultados da classificação com dados transformados para os dados do exemplo 3.2.

Da mesma forma, estimamos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_5$, que maximizam (3.10), utilizando as transformações Box & Cox Clássico(Tbox), Box & Cox Bayesiano a partir da função de Verossimilhança Perfilada (TBox1) e Box & Cox Bayesiano a partir da função de Verossimilhança Completa(TBox2).

O resumos das taxas de classificação estão dados na Tabela 3.9 abaixo:

Tabela 3.9: Taxa de Erro Aparente (APER)

	DST	Tbox	Tbox1	Tbox2
FDL	0.071	0.107	0.089	0.089
FDQ	0.036	0.018	0.018	0.018

Novamente temos um melhor desempenho para a classificação dos dados transformados quando usamos a F.D.Q., que acreditamos se dar pelo mesmo motivo anterior. No geral conseguimos melhorar a taxa de classificação a partir da transformação. No entanto, não conseguimos detectar um melhor procedimento.

Como foi comentado anteriormente, a maximização marginal para a transformação (TBox) em dados multivariados pode ser prejudicial em alguns casos. Aqui, com os exemplos ilustrados, não conseguimos verificar tal fato. No entanto mostramos a igual

eficiência para o procedimento Bayesiano (TBox1) e constatamos a facilidade em sua implementação e execução. Na nossa opinião este é um procedimento mais completo, pois efetua a maximização conjunta para dados multivariados. Assim, usando tal procedimento, não precisamos nos preocupar com o efeito da correlação ou não entre as variáveis de uma observação multivariada, portanto sugerimos a sua utilização.

No próximo capítulo trataremos o problema de classificação, considerando o vetor aleatório x de medidas como tendo uma mistura de distribuições normais multivariadas.

Capítulo 4

Classificação Considerando a distribuição do vetor de medidas X , como uma Misturas de Distribuições

Neste capítulo tratamos o problema de classificação, considerando a distribuição do vetor aleatório X de medidas, como uma mistura de duas distribuições normais multivariadas, tendo como objetivo, para algumas situações, adequar melhor o modelo aos dados e conseqüentemente melhorar a taxa de classificação.

4.1 Introdução aos Modelos de Misturas

Modelos estatísticos baseados em distribuições mistas formam uma classe de modelos, que se ajustam naturalmente quando são aplicados à observações amostrais obtidas de diferentes situações, isto é quando a população é heterogênea. Essas situações são encontradas com grande freqüência no nosso cotidiano. Por exemplo, a distribuição das alturas em uma população adulta reflete a mistura de homens e mulheres. Os modelos Bayesianos, baseados em distribuições mistas, estão sendo muito utilizados recentemente, apresentando certo sucesso, especialmente devido a formulação de novos algoritmos computacionais e pela forma natural de interpretar as diferentes situações em que o experimento é realizado.

No problema de classificação, a utilização da modelagem Bayesiana para os modelos de misturas se mostra bastante interessante, pois em várias situações tal procedimento poderá modelar melhor os dados de cada população específica, conseqüentemente, podemos ter

melhores resultados na classificação de novas observações.

Para o problema de classificação, normalmente se associa ao vetor aleatório X uma mistura de distribuições normais multivariadas (ver por exemplo, Lavine & West, 1992). Assim, para cada população temos,

$$f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{K-1} p_j f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_j)$$

onde $\boldsymbol{\theta}_j$ é um vetor de parâmetros associado com o j -ésimo componente da distribuição e $\sum_{j=1}^2 p_j = 1$.

A inferência Bayesiana para mistura de distribuições é introduzida por vários autores (ver por exemplo, Robert, 1996; ou Titterington, Smith e Makov, 1985).

Como um caso especial, consideramos uma alternativa Bayesiana para a classificação, assumindo uma mistura de distribuições normais multivariadas para cada população e usamos os métodos de simulação MCMC (Monte Carlo em Cadeias de Markov) para o desenvolvimento das regras de classificação.

4.2 Análise Bayesiana Assumindo uma Mistura de $K=2$ Distribuições Normais Multivariadas

Aqui, para cada população associamos uma mistura de duas densidades normais multivariadas para o vetor X , representando a contribuição de duas sub-populações na amostra. Assim, a densidade será escrita na forma,

$$f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^2 p_j f_j(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_j) \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_q)$; $\sum_{j=1}^2 p_j = 1$, sendo que $f_j(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_j)$ denota uma distribuição normal multivariada $N_q(\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)$, sendo $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2\}$, onde $\boldsymbol{\theta}_1 = \{\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1\}$, $\boldsymbol{\theta}_2 = \{\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2\}$ e $\mathbf{p} = \{p_1, p_2\}$.

A função de verossimilhança para $\boldsymbol{\theta}$ e $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ baseado em uma amostra aleatória $X_1, X_2, \dots, X_n$ é dada por

$$L(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}) = \prod_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^2 p_j f_j(\mathbf{x}_i|\boldsymbol{\theta}_j) \right\} \quad (4.2)$$

Atribuindo distribuições a priori $\pi(\theta)$ e $\pi(p)$ para os vetores de parâmetros θ e p , respectivamente e considerando-as independentes, temos a função de distribuição a posteriori dada por,

$$\pi(\theta, p|X) \propto \pi(\theta)\pi(p)L(\theta, p) \quad (4.3)$$

Percebemos que tal forma, independente da distribuição a priori utilizada, geralmente apresenta uma grande dificuldade na obtenção das densidades a posteriori marginais dos parâmetros do modelo, devido a complexidade da função de verossimilhança. Uma solução para o problema é a utilização da variável latente (ver Tanner e Wong, 1987), que irá transformar o modelo de misturas em um modelo de componentes independentes.

4.2.1 Incorporação da Variável Latente

As variáveis latentes são incorporadas no modelo com o objetivo de simplificar a distribuição a posteriori facilitando o trabalho computacional. Assim, definimos a seguinte variável não observada $Z_i = (Z_{i1}, Z_{i2})$, sendo,

$$Z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se a } i\text{-ésima obs. foi gerada da pop. } j, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.4)$$

onde $\sum_{j=1}^2 Z_{ij} = 1$, para $i = 1, \dots, n$.

Neste caso específico para $K=2$ componentes da distribuição temos,

$$(Z_{ij}|X, \theta, p) \sim \text{Bin}(1, v_{ij}) \text{ (uma distribuição binomial),}$$

onde v_{ij} é definido como,

$$v_{ij} = \frac{p_j f_j(x_i|\theta_j)}{\sum_{j=1}^2 p_j f_j(x_i|\theta_j)} \quad (4.5)$$

Assim,

$$f(z_i|X, \theta, p) = v_{i1}^{z_{i1}} v_{i2}^{z_{i2}} = v_{i1}^{z_{i1}} (1 - v_{i1})^{1-z_{i1}}.$$

Para uma amostra $Z_1, \dots, Z_n$, temos

$$\begin{aligned}
L(z|x, \theta, p) &= \prod_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{p_1 f_1(\bar{x}_i | \theta_1)}{\sum_{j=1}^2 p_j f_j(x_i | \theta_j)} \right)^{z_{i1}} \left(\frac{p_2 f_2(x_i | \theta_2)}{\sum_{j=1}^2 p_j f_j(x_i | \theta_j)} \right)^{z_{i2}} \right\} \\
&= \frac{\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^2 [p_j f_j(x_i | \theta_j)]^{z_{ij}}}{\prod_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^2 p_j f_j(x_i | \theta_j) \right\}},
\end{aligned} \tag{4.6}$$

onde $z = \{z_1, \dots, z_n\}$.

Portanto, a função de verossimilhança incorporada pelos dados ampliados será dada por:

$$\begin{aligned}
L(x, z | \theta, p) &= L(\bar{x} | \theta, p) L(z | x, \theta, p) \\
&= \prod_{i=1}^n \left\{ [p_1 f_1(x_i | \theta_1)]^{z_{i1}} [p_2 f_2(x_i | \theta_2)]^{z_{i2}} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Definida a verossimilhança com a incorporação da variável Latente, mostramos a seguir a incorporação das informações a priori e a determinação da distribuição posteriori.

4.3 Distribuições a Priori para o Modelo de Mistura

Como sempre, uma das grandes dificuldades da inferência Bayesiana é incorporar a informação a priori no modelo quando não temos a opinião de um especialista. A escolha da densidade a priori é feita de forma a se ter uma distribuição a posteriori tratável. Nos modelos de mistura onde $f_j(x|\theta_j)$ pertencem a família exponencial, além de usarmos a distribuição a priori não informativa (Priori de Jeffrey), também podemos usar a distribuição a priori conjugada, ver por exemplo Robert, C.P (1996). Neste trabalho incorporamos prioris não informativas e prioris conjugadas para o modelo e verificamos o desempenho destes para o problema de classificação.

4.3.1 Desenvolvimento do Modelo com Distribuição a Priori Não Informativa

O modelo Bayesiano de misturas normais multivariadas, utilizando prioris não informativas, está bem ilustrado em (Lavine, 1994). Neste vamos ter prioris não informativas para os parâmetros dados abaixo,

$$\pi(\theta) = |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}(q+1)} |\Sigma_2|^{-\frac{1}{2}(q+1)} \quad (4.8)$$

$$\pi(p) = \text{Beta}(a, b), \text{ onde } a, b \text{ conhecidos.}$$

Supondo independência a priori, teremos a densidade posteriori dada por,

$$\begin{aligned} \pi(\theta, p | x, z) &\propto \pi(\theta) \pi(p) p_1^{\sum_{i=1}^n z_{i1}} p_2^{\sum_{i=1}^n z_{i2}} \prod_{i=1}^n \left\{ [f_1(x_i | \theta_1)]^{z_{i1}} [f_2(x_i | \theta_2)]^{z_{i2}} \right\} \\ &\propto |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}(q+1)} \prod_{i=1}^n \left\{ [f_1(x_i | \theta_1)]^{z_{i1}} \right\} |\Sigma_2|^{-\frac{1}{2}(q+1)} \prod_{i=1}^n \left\{ [f_2(x_i | \theta_2)]^{z_{i2}} \right\} \\ &\quad p_1^{(r+a)-1} (1-p_1)^{(n-r+b)-1} \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde $p_2 = 1 - p_1$, $r = \sum_{i=1}^n z_{i1}$ e $n - r = \sum_{i=1}^n z_{i2}$.

4.3.2 Distribuições Condicionais a Posteriori Necessárias para o Algoritmo Gibbs Sampling

Da expressão (4.9), vamos derivar as distribuições condicionais necessárias para gerarmos amostras via simulação MCMC para a análise Bayesiana. Assim,

$$\pi(p | \theta, x, z) \propto p_1^{(r+a)-1} (1-p_1)^{(n-r+b)-1}$$

Portanto,

$$(p | \theta, x, z) \sim \text{Beta}(r + a; n - r + b) \quad (4.10)$$

Para μ_1 temos,

$$\begin{aligned} \pi(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto \prod_{i=1}^n \left[|\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x_i - \mu_1)' \Sigma_1^{-1} (x_i - \mu_1) \right\} \right]^{z_{i1}} \\ &\propto |\Sigma_1|^{-\frac{r}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i - \mu_1)' \Sigma_1^{-1} (x_i - \mu_1) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n z_{i1} [x_i' \Sigma_1^{-1} x_i - \mu_1' \Sigma_1^{-1} x_i - x_i' \Sigma_1^{-1} \mu_1 + \mu_1' \Sigma_1^{-1} \mu_1] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{r}{2} [\mu_1' \Sigma_1^{-1} \mu_1 - 2 \mu_1' \Sigma_1^{-1} \frac{1}{r} \sum_{i=1}^n z_{i1} x_i + \frac{1}{r} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i' \Sigma_1^{-1} x_i)] \right\} \end{aligned}$$

Fazendo $\frac{1}{r} \sum_{i=1}^n z_{i1} x_i = \bar{x}_1$, temos,

$$\begin{aligned} \pi(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto \exp \left\{ -\frac{r}{2} [\mu_1' \Sigma_1^{-1} \mu_1 - 2\mu_1' \Sigma_1^{-1} \bar{x}_1 + \bar{x}_1' \Sigma_1^{-1} \bar{x}_1 + \frac{1}{r} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i' \Sigma_1^{-1} x_i) - \bar{x}_1' \Sigma_1^{-1} \bar{x}_1] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{r}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i' \Sigma_1^{-1} x_i) - r \bar{x}_1' \Sigma_1^{-1} \bar{x}_1 \right\} \end{aligned}$$

Assim podemos escrever,

$$\pi(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) \propto \exp \left\{ -\frac{r}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) \right\}$$

Portanto,

$$(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) \sim N_q(\bar{x}_1; \frac{1}{r} \Sigma_1) \quad (4.11)$$

Para Σ_1 temos que,

$$\begin{aligned} \pi(\Sigma_1 | \mu_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto \int |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}(q+1)} |\Sigma_1|^{-\frac{r}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i - \mu_1)' \Sigma_1^{-1} (x_i - \mu_1) \right\} d\mu_1 \\ &\propto |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}(q+1)} |\Sigma_1|^{-\frac{r-1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i' \Sigma_1^{-1} x_i) - r (\bar{x}_1' \Sigma_1^{-1} \bar{x}_1) \right\} \\ &\int |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{r}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) \right\} d\mu_1 \end{aligned}$$

Assim temos,

$$\pi(\Sigma_1 | \mu_1, p_1, \theta_2, x, z) \propto |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}([r-1]+q+1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} tr[\Sigma_1^{-1} V_1] \right\},$$

onde $V_1 = \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i - \bar{x}_1)(x_i - \bar{x}_1)'$.

Portanto,

$$(\Sigma_1 | \mu_1, p_1, \theta_2, x, z) \sim Inv - Wishart_{r-1}(V_1^{-1}). \quad (4.12)$$

Dá mesma forma, vamos obter as marginais para μ_2 e Σ_2 . Assim,

$$\pi(\mu_2 | \Sigma_2, p_1, \theta_1, x, z) \propto \exp \left\{ -\frac{r_2}{2} (\mu_2 - \bar{x}_2)' \Sigma_2^{-1} (\mu_2 - \bar{x}_2) \right\},$$

onde $r_2 = n - r$ e $\bar{x}_2 = \frac{1}{r_2} \sum_{i=1}^n z_{i2} x_i$.

Portanto,

$$(\mu_2 | \Sigma_2, p_1, \theta_1, x, z) \sim N_q(\bar{x}_2; \frac{1}{r_2} \Sigma_2) \quad (4.13)$$

Para Σ_2 temos que,

$$\pi(\Sigma_2 | \mu_2, p_1, \theta_1, x, z) \propto |\Sigma_2|^{-\frac{1}{2}((r_2-1)+q+1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr[\Sigma_2^{-1}V_2]\right\},$$

onde $V_2 = \sum_{i=1}^n z_{i2}(x_i - \bar{x}_2)(x_i - \bar{x}_2)'$.

Pórtanto,

$$(\Sigma_2 | \mu_2, p_1, \theta_1, x, z) \sim Inv - Wishart_{r_T-1}(V_2^{-1}), \quad (4.14)$$

onde $Inv - Wishart_v(S^{-1})$ denota uma distribuição Wishart Invertida com v graus de liberdade cuja densidade é dada por:

$$f(W) \propto |W|^{-\frac{1}{2}(v+q+1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr[SW^{-1}]\right\},$$

sendo S é uma matriz escalar quadrada $q \times q$, simétrica e definida positiva e W é definida positiva.

Para geramos amostras da distribuição posteriori conjunta (4.9), temos os seguintes passos:

- i- Iniciar com valores iniciais $p_1^{(0)}, \mu_1^{(0)}, \mu_2^{(0)}, \Sigma_1^{(0)}$ e $\Sigma_2^{(0)}$;
- ii- Gerar uma amostra $Z_1^{(1)}, \dots, Z_n^{(1)}$ da distribuição binomial com probabilidade de sucesso v_{ij} (4.5).
- iii- Gerar uma amostra de μ_1, μ_2, Σ_1 and Σ_2 das distribuições condicionais dadas acima.

4.3.3 Desenvolvimento do modelo com distribuição a priori conjugada

Como trabalhamos com famílias exponenciais, propomos também um estudo com distribuições a priori conjugadas apresentado abaixo:

$$\begin{aligned} \pi(\theta) = & |\Sigma_1|^{-\frac{(g_1+q)}{2}+1} \exp\left\{-\frac{1}{2}tr[G_1\Sigma_1^{-1}] - \frac{k_1}{2}(\mu_1 - m_1)' \Sigma_1^{-1}(\mu_1 - m_1)\right\} |\Sigma_2|^{-\frac{(g_2+q)}{2}+1} \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2}tr[G_2\Sigma_2^{-1}] - \frac{k_2}{2}(\mu_2 - m_2)' \Sigma_2^{-1}(\mu_2 - m_2)\right\}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde G_i são matrizes de constantes conhecidas para cada sub-população, m_i vetores de constantes conhecidas para cada sub-população e g_i e k_i parâmetros conhecidos para cada sub-população, ou seja, $i=1,2$.

$$\pi(p_1) = \text{Beta}(\bar{a}, \bar{b}) \text{ onde } \bar{a}, \bar{b} \text{ conhecidos.} \quad (4.16)$$

Assumindo independência a priori, temos que a distribuição a posteriori será :

$$\pi(\theta, p_1 | x, z) \propto \pi(\theta) \pi(p_1) p_1^{\sum_{i=1}^n z_{i1}} p_2^{\sum_{i=1}^n z_{i2}} \prod_{i=1}^n \left\{ [f(x_i | \theta_1)]^{z_{i1}} [f(x_i | \theta_2)]^{z_{i2}} \right\} \quad (4.17)$$

onde $p_2 = 1 - p_1$, $r = \sum_{i=1}^n z_{i1}$ e $n - r = \sum_{i=1}^n z_{i2}$.

4.3.4 Distribuições Condicionais a Posteriori Necessárias para o Algoritmo Gibbs Sampling

$$\pi(p_1 | \theta_1, \theta_2, x, z) \propto p_1^{(r+a)-1} (1 - p_1)^{(n-r+b)-1}$$

Portanto,

$$(p_1 | \theta_1, \theta_2, x, z) \sim \text{Beta}(r + a; n - r + b) \quad (4.18)$$

Para μ_1 temos:

$$\begin{aligned} \pi(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto \exp \left\{ -\frac{k_1}{2} (\mu_1 - m_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - m_1) \right\} \prod_{i=1}^n \left[|\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x_i - \mu_1)' \Sigma_1^{-1} (x_i - \mu_1) \right\} \right]^{z_{i1}} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{k_1}{2} (\mu_1 - m_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - m_1) \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i - \mu_1)' \Sigma_1^{-1} (x_i - \mu_1) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{k_1}{2} (\mu_1 - m_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - m_1) \right\} \exp \left\{ -\frac{r_1}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) \right\} \\ &\exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} [\Sigma_1^{-1} V_1] \right\}, \end{aligned}$$

onde $r_1 = \sum_{i=1}^n z_{i1}$; $\bar{x}_1 = \frac{1}{r_1} \sum_{i=1}^n z_{i1} x_i$; $V_1 = \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i - \bar{x}_1)(x_i - \bar{x}_1)'$.

$$\begin{aligned} \pi(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto \exp \left\{ -\frac{k_1}{2} (\mu_1 - m_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - m_1) \right\} \exp \left\{ -\frac{r_1}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \Sigma_1^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{r_1} \right)^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) + (\mu_1 - m_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{k_1} \right)^{-1} (\mu_1 - m_1) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[(\mu_1 - a_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{r_1 + k_1} \right)^{-1} (\mu_1 - a_1) + (\bar{x}_1 - m_1)' \left(\frac{k_1 r_1}{k_1 + r_1} \right) \Sigma_1^{-1} (\bar{x}_1 - m_1) \right] \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[(\mu_1 - a_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{r_1 + k_1} \right)^{-1} (\mu_1 - a_1) \right] \right\}, \end{aligned}$$

onde $a_1 = \frac{r_1}{r_1 + k_1} \bar{x} + \frac{k_1}{r_1 + k_1} m_1$.

Portanto,

$$(\mu_1 | \Sigma_1, p_1, \theta_2, x, z) \sim N_q(a_1; \frac{\Sigma_1}{r_1 + k_1}) \quad (4.19)$$

Para Σ_1 temos,

$$\begin{aligned} \pi(\Sigma_1 | \mu_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto \int \pi(\theta, p_1 | x, z) d\mu_1 \\ &\propto |\Sigma_1|^{-(\frac{g_1 + q + 1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr[G_1 \Sigma_1^{-1}]\right\} |\Sigma_1|^{-(\frac{r_1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr[V_1 \Sigma_1^{-1}]\right\} \int |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}} \\ &\exp\left\{-\frac{1}{2} (\mu_1 - \bar{x}_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{r_1}\right)^{-1} (\mu_1 - \bar{x}_1) + (\mu_1 - m_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{k_1}\right)^{-1} (\mu_1 - m_1)\right\} d\mu_1 \end{aligned}$$

Assim vamos ter,

$$\begin{aligned} \pi(\Sigma_1 | \mu_1, p_1, \theta_2, x, z) &\propto |\Sigma_1|^{-(\frac{g_1 + q + 1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr[G_1 \Sigma_1^{-1}]\right\} |\Sigma_1|^{-(\frac{r_1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr[V_1 \Sigma_1^{-1}]\right\} \\ &\int |\Sigma_1|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[(\mu_1 - a_1)' \left(\frac{\Sigma_1}{r_1 + k_1}\right)^{-1} (\mu_1 - a_1) + (\bar{x}_1 - m_1)' \right. \right. \\ &\left. \left. \left(\frac{k_1 r_1}{k_1 + r_1}\right) \Sigma_1^{-1} (\bar{x}_1 - m_1)\right]\right\} d\mu_1 \\ &\propto |\Sigma_1|^{-(\frac{g_1 + q + 1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr[G_1 \Sigma_1^{-1}]\right\} |\Sigma_1|^{-(\frac{r_1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr[V_1 \Sigma_1^{-1}]\right\} \\ &\exp\left\{-\frac{1}{2} tr\left[\Sigma_1^{-1} \left(\frac{k_1 r_1}{k_1 + r_1}\right) (\bar{x}_1 - m_1)(\bar{x}_1 - m_1)'\right]\right\} \\ &\propto |\Sigma_1|^{-(\frac{g_1 + r_1 + q + 1}{2})} \exp\left\{-\frac{1}{2} tr\left[\Sigma_1^{-1} [G_1 + V_1 + \left(\frac{k_1 r_1}{k_1 + r_1}\right) (\bar{x}_1 - m_1)(\bar{x}_1 - m_1)']\right]\right\} \end{aligned}$$

onde $V_1 = \sum_{i=1}^n z_{i1} (x_i - \bar{x}_1)(x_i - \bar{x}_1)'$ e $a_1 = \frac{r_1}{r_1 + k_1} \bar{x} + \frac{k_1}{r_1 + k_1} m_1$.

Portanto,

$$(\Sigma_1 | \mu_1, p_1, \theta_2, x, z) \sim Inv - Wishart_{(g_1 + r_1)}(G_n^{-1}) \quad (4.20)$$

onde $G_n^{-1} = G_1 + V_1 + \left(\frac{k_1 r_1}{k_1 + r_1}\right) (\bar{x}_1 - m_1)(\bar{x}_1 - m_1)'$.

Da mesma forma,

$$(\mu_2 | \Sigma_2, p_1, \theta_1, x, z) \sim N_q(a_2; \frac{\Sigma_2}{r_2 + k_2}), \quad (4.21)$$

onde

$$a_2 = \frac{r_2}{r_2 + k_2} \bar{x}_2 + \frac{k_2}{r_2 + k_2} m_2, \quad \bar{x}_2 = \frac{1}{r_2} \sum_{i=1}^n z_{i2} x_i, \quad r_2 = \sum_{i=1}^n z_{i2}.$$

$$(\Sigma_2 | \mu_2, p_1, \theta_1, x, z) \sim Inv - Wishart_{(g_2+r_2)}(G_{n2}^{-1}), \quad (4.22)$$

onde $G_{n2}^{-1} = G_2 + V_2 + \left(\frac{k_2 r_2}{k_2 + r_2} \right) (\bar{x}_2 - m_2)(\bar{x}_2 - m_2)'$.

Resultados similares podem ser obtidos para $K > 2$.

4.3.5 Classificação para duas Populações

Num caso específico, vamos classificar um novo objeto em uma das duas populações baseados em q medidas associadas a variável aleatória $X^t = (X_1, \dots, X_q)$, assumindo uma mistura de distribuições normais $f^{(1)}(x | \theta^{(1)}) = \sum_{j=1}^2 p_j^{(1)} f_j^{(1)}(x | \theta_j^{(1)})$ para a população 1 e $f^{(2)}(x | \theta^{(2)}) = \sum_{j=1}^2 p_j^{(2)} f_j^{(2)}(x | \theta_j^{(2)})$ para a população 2, onde $\theta_j^{(l)} = (\mu_j^{(l)}, \Sigma_j^{(l)})$ e $f_j^{(l)}(x | \theta_j^{(l)})$ denota uma distribuição normal multivariada $N_q(\mu_j^{(l)}; \Sigma_j^{(l)})$; $j = 1, 2$; $l = 1, 2$.

A densidade preditiva para o vetor x é dado por,

$$f^{(l)}(\bar{x}) = \int f^{(l)}(x | \theta^{(l)}) \pi(\theta^{(l)} | x) d\theta^{(l)}, \quad (4.23)$$

onde $l = 1$ ou 2 (l índices das populações 1 e 2).

Um estimador de Monte Carlo para $f^{(l)}(\bar{x})$ baseado nas amostras geradas pelo algoritmo de Gibbs é dado por,

$$\hat{f}^{(l)}(\bar{x}) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S f^{(l)}(x | \theta^{(l)s}), \quad (4.24)$$

onde S é o número de amostras geradas pelo Gibbs.

Para classificar um novo objeto com base em suas medidas observadas x , consideramos a seguinte regra de classificação:

i- Alocar x para a população 1 se

$$\frac{\hat{f}^{(1)}(\bar{x})}{\hat{f}^{(2)}(\bar{x})} \geq \frac{[c(1|2)] \left[\frac{p_2}{p_1} \right]}{[c(2|1)]}, \quad (4.25)$$

onde $c(1|2)$ e $c(2|1)$ são os custos de classificação errada, e p_1 e p_2 são as probabilidades a priori de classificação para ambas populações, citados no capítulo 2.

ii- Alocar x para população 2, caso contrário.

Quando $c(1|2) = c(2|1)$ e $p_1 = p_2$ a regra de classificação é dada por:

i- Alocar x para a população 1 se,

$$\frac{\hat{f}^{(1)}(x)}{\hat{f}^{(2)}(x)} \geq 1 \quad (4.26)$$

ii- Alocar x para a população 2, caso contrário.

4.4 Um Exemplo Ilustrativo

Neste exemplo ilustrativo, geramos duas amostras para cada população, de tamanho 100, com uma mistura de duas distribuições Normais Multivariadas, com os respectivos parâmetros para ambas as populações:

Pop1:

$$\mu_1 = \begin{pmatrix} 2.5 & 4.5 \end{pmatrix}; \quad \Sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1.5 \end{pmatrix}; \quad p_1 = 0.4$$

$$\mu_2 = \begin{pmatrix} 4.0 & 10.0 \end{pmatrix}; \quad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 2.0 & 0.4 \\ 0.4 & 2.5 \end{pmatrix}; \quad p_2 = 0.6$$

Pop2:

$$\mu_1 = \begin{pmatrix} 3.5 & 5.5 \end{pmatrix}; \quad \Sigma_1 = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.3 \\ 0.3 & 2.0 \end{pmatrix}; \quad p_1 = 0.5$$

$$\mu_2 = \begin{pmatrix} 6.5 & 14.6 \end{pmatrix}; \quad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 2.0 & 0.4 \\ 0.4 & 3.0 \end{pmatrix}; \quad p_2 = 0.5$$

Os gráficos para os dois conjuntos são dados pela Figura 4.1

Figura 4.1: Dados das duas Populações: $pop1$ ($\circ$), $pop2$ ($\times$).

Percebemos neste conjunto de dados, um comportamento caracterizado por uma mistura de duas sub-populações. Os dados se mostram concentrados em duas regiões distintas. Neste caso, verificamos que os modelos tradicionais de classificação mostram-se pouco eficientes.

4.4.1 Utilização dos Procedimentos Usuais de Classificação

Aqui vamos utilizar os dois procedimentos de classificação mais usuais, já discutidos anteriormente: a Função Discriminante Linear (F.D.L.) e a Função Discriminante Quadrática (F.D.Q.).

Utilizando a F.D.L., chegamos a seguinte Tabela de classificação:

Tabela 4.1: Tabela de Classificação

Membro pelo Critério Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	70	70.00	30	30.00	100
Verdadeiro	π_2	40	40.00	60	60.00	100

Assim temos,

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{30 + 40}{100 + 100} = 0.35.$$

onde n_{iM} , $i = 1, 2$ é o número de classificações erradas para cada grupo ou seja, número de elementos que são do grupo i e foram classificados no grupo k onde $i, k = 1, 2$ com $i \neq k$.

Proporção de Classificação correta:

$$PrC = 1 - EC = 0.65$$

Utilizando a F.D.Q., chegamos a seguinte Tabela de classificação:

Tabela 4.2: Tabela de Classificação

Membro pelo Critério Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	76	76.00	24	24.00	100
Verdadeiro	π_2	41	41.00	59	59.00	100

Assim temos,

$$APER = \frac{24 + 41}{100 + 100} = 0.325.$$

Proporção de Classificação correta:

$$PrC = 1 - EC = 0.675$$

Com esses dois critérios de classificação utilizados, percebemos uma proporção total de classificação correta um pouco baixa, devido a característica específica dos dados. Assim, verificamos que os procedimentos tradicionais não são muito eficientes quanto temos este tipo de dado, justificando a procura por alternativas que nos levem a melhores resultados.

4.5 Aplicação dos Modelos de Mistura para a Classificação

Nesta seção utilizamos os procedimentos de classificação considerando a densidade de cada população como uma mistura de duas distribuições Normais Multivariadas, com o intuito de melhor modelarmos os dados, conseqüentemente proporcionar uma melhor

taxa de classificação correta. Aqui apresentamos o enfoque Bayesiano para a solução do problema considerando distribuições a priori não informativa e informativa para os parâmetros.

Para os procedimentos Bayesianos, foram geradas 10000 amostras de Gibbs para cada parâmetro, sendo descartadas as 4000 amostras iniciais e depois tomadas as amostras restantes de 20 em 20, totalizando uma amostra final de 300 observações para cada parâmetro. Dado o grande número de parâmetros envolvidos e a dificuldade computacional para realização do algoritmo multivariado, trabalhamos apenas com uma grande cadeia. O critério usado para a análise de convergência foi o de Geweke, J. (1992). Aqui, todo o procedimento de simulação foi gerado a partir do Software Ox 2.10 (ver Doornik, 1996).

4.5.1 Utilização de Distribuições a Priori Não Informativas

Nesta análise consideramos uma mistura de 2 distribuições normais bivariadas (4.1) com $\theta_1^{(l)} = (\mu_1^{(l)}, \Sigma_1^{(l)})$ e $\theta_2^{(l)} = (\mu_2^{(l)}, \Sigma_2^{(l)})$ onde,

$$\mu_1^{(l)} = (\mu_{11}^{(l)}, \mu_{12}^{(l)}), \quad \mu_2^{(l)} = (\mu_{21}^{(l)}, \mu_{22}^{(l)}), \quad \Sigma_1^{(l)} = \begin{pmatrix} \sigma_{111}^{(l)} & \sigma_{112}^{(l)} \\ \sigma_{121}^{(l)} & \sigma_{122}^{(l)} \end{pmatrix}, \quad \Sigma_2^{(l)} = \begin{pmatrix} \sigma_{211}^{(l)} & \sigma_{212}^{(l)} \\ \sigma_{221}^{(l)} & \sigma_{222}^{(l)} \end{pmatrix}$$

para $l = 1$ (Pop1) e $l = 2$ (Pop2) e os parâmetros da distribuição a priori (4.8), com $a=2$ e $b=3$ para Pop1 e $a=2$ e $b=2$ para Pop2.

Na Tabela 4.3 apresentamos um resumo as estimativas dos parâmetros das duas populações e a seguir os gráficos para a convergência e as densidades marginais posteriores.

Table 4.3 - Resumos das Estimativas (Mistura de 2 Distribuições Normais Bivariadas; Distribuição a Priori (4.8) para θ)

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW
Pop1	$\mu_{11}^{(1)}$	2.2180	0.20796	(1.8231;2.5952)	0.0187
	$\mu_{12}^{(1)}$	4.7413	0.36945	(4.1906;5.6530)	0.0312
	$\sigma_{111}^{(1)}$	1.2288	0.33482	(0.70499;2.0119)	0.0256
	$\sigma_{122}^{(1)}$	2.0556	1.1650	(0.79698;5.2064)	0.0104
	$\sigma_{112}^{(1)}$	0.38458	0.32913	(-0.22956;1.0659)	0.0864
	$p_1^{(1)}$	0.38848	0.069225	(0.26940;0.54735)	0.0455

Table 4.3 - Continuação

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW
Pop1	$\mu_{21}^{(1)}$	4.0117	0.28724	(3.4918;4.7025)	0.0163
	$\mu_{22}^{(1)}$	10.0520	0.40065	(9.1946;10.722)	0.0523
	$\sigma_{211}^{(1)}$	2.5543	0.50716	(1.6696;3.7523)	0.0164
	$\sigma_{222}^{(1)}$	4.1283	1.4710	(2.0013;8.0003)	0.0704
	$\sigma_{212}^{(1)}$	1.1125	0.5469	(0.15604;2.3419)	0.0175
Pop2	$\mu_{11}^{(2)}$	3.1585	0.1700	(2.8474;3.5063)	0.0497
	$\mu_{12}^{(2)}$	5.5554	0.18671	(5.1742;5.9197)	0.0539
	$\sigma_{111}^{(2)}$	1.2615	0.28094	(0.82515;1.9301)	0.0025
	$\sigma_{122}^{(2)}$	1.6764	0.43747	(1.0427;2.5983)	0.0131
	$\sigma_{112}^{(2)}$	0.18441	0.2566	(-0.31451;0.7831)	0.0327
	$p_1^{(2)}$	0.44199	0.046343	(0.3554;0.52604)	0.0075
	$\mu_{21}^{(2)}$	6.5406	0.2432	(5.9708;7.0236)	0.0036
	$\mu_{22}^{(2)}$	14.80	0.2556	(14.250;15.305)	0.0310
	$\sigma_{211}^{(2)}$	2.4759	0.49652	(1.7055;3.5964)	0.0055
	$\sigma_{222}^{(2)}$	4.4486	1.0596	(2.7541;7.0163)	0.0112
	$\sigma_{212}^{(2)}$	1.2344	0.55629	(0.19226;2.5609)	0.0174

Figura 4.2: Convergência dos parâmetros (Pop1).

Figura 4.3: Densidades Marginais a Posteriori (Pop1).

Abaixo temos os gráficos para a Pop2.

Figura 4.4: Convergência dos parâmetros (Pop2).

Figura 4.5: Densidades Marginais a Posteriori (Pop2).

Podemos notar que obtivemos bons resultados para a convergência, pois para todos os parâmetros temos $|GW| < 2$, além da constatação visual pelas Figuras 4.2 e 4.4.

Na Tabela 4.4 abaixo, temos a tabela de classificação.

Tabela 4.4: Tabela de Classificação

Membro pelo Critério Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	83	83.00	17	17.00	100
Verdadeiro	π_2	19	19.00	81	81.00	100

Assim temos,

$$EC = \frac{17 + 19}{100 + 100} = 0.18.$$

Proporção de Classificação correta:

$$PrC = 1 - EC = 0.82$$

Considerando este modelo de mistura, percebemos um grande aumento na proporção total de classificação correta. Isto mostra que o modelo proposto se adequa melhor aos dados, conseqüentemente melhorando a taxa de classificação. Verificamos agora o desempenho deste critério quando utilizamos uma distribuição a priori informativa.

4.5.2 Utilização de Distribuições a Priori Informativas

Nesta análise consideramos as distribuições a priori dadas em (4.15 e 4.16)

Os parâmetros da distribuição a priori para as duas Populações são dados abaixo:

Pop1:

$$m_1 = \begin{pmatrix} 2.5 & 4.5 \end{pmatrix}; \quad G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1.5 \end{pmatrix};$$

$$m_2 = \begin{pmatrix} 4.0 & 10.0 \end{pmatrix}; \quad G_2 = \begin{pmatrix} 2.0 & 0.4 \\ 0.4 & 2.5 \end{pmatrix}$$

$$k_1 = 3; \quad k_2 = 3; \quad g_1 = 7; \quad g_2 = 7; \quad a = 10; b = 10.$$

Pop2:

$$m_1 = \begin{pmatrix} 3.5 & 5.5 \end{pmatrix}; \quad G_1 = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.3 \\ 0.3 & 2.0 \end{pmatrix};$$

$$m_2 = \begin{pmatrix} 6.5 & 14.6 \end{pmatrix}; \quad G_2 = \begin{pmatrix} 2.0 & 0.4 \\ 0.4 & 3.0 \end{pmatrix};$$

$$k_1 = 3; \quad k_2 = 3; \quad g_1 = 7; \quad g_2 = 7; \quad a = 10; b = 10.$$

Os procedimentos de simulação foram semelhantes aos usados no exemplo anterior, considerando agora as distribuições condicionais a posteriori dadas na seção (4.3.4). Abaixo na Tabela 4.5, apresentamos um resumo das estimativas dos parâmetros para as duas populações e a seguir os gráficos para a convergência e as densidades marginais a posteriores.

Tabela 4.5 - Resumos das Estimativas (Mistura de 2 Distribuições Normais Bivariadas; Distribuições a Priori (4.15) e (4.16))

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW
Pop1	$\mu_{11}^{(1)}$	2.2626	0.19234	(1.8744;2.6433)	0.0019
	$\mu_{12}^{(1)}$	4.5904	0.22286	(4.2052;5.0603)	0.0116
	$\sigma_{111}^{(1)}$	0.94689	0.2639	(0.55589;1.6046)	0.0736
	$\sigma_{122}^{(1)}$	1.3017	0.47161	(0.70885;2.5620)	0.0588
	$\sigma_{112}^{(1)}$	0.3243	0.20275	(0.004668;0.81366)	0.0719
	$p_1^{(1)}$	0.39912	0.052701	(0.29853;0.50799)	0.0189
	$\mu_{21}^{(1)}$	3.9721	0.22622	(3.5397;4.4167)	0.0531

Tabela 4.5 - Continuação

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW
Pop1	$\mu_{22}^{(1)}$	10.054	0.28728	(9.4443;10.579)	0.1254
	$\sigma_{211}^{(1)}$	2.233	0.39157	(1.616;3.0994)	0.0404
	$\sigma_{222}^{(1)}$	3.6273	0.95053	(2.0555;5.8916)	0.0801
	$\sigma_{212}^{(1)}$	0.99682	0.42114	(0.26592;1.9683)	0.0718
Pop2	$\mu_{11}^{(2)}$	3.2034	0.16598	(2.8589;3.5076)	0.0114
	$\mu_{12}^{(2)}$	5.6200	0.1778	(5.2761;5.9473)	0.0023
	$\sigma_{111}^{(2)}$	1.0981	0.2387	(0.71551;1.5960)	0.0348
	$\sigma_{122}^{(2)}$	1.5455	0.35837	(0.98285;2.3600)	0.0296
	$\sigma_{112}^{(2)}$	0.20325	0.19768	(-0.20371;0.63515)	0.0405
	$p_1^{(2)}$	0.45774	0.044559	(0.37268;0.53877)	0.0274
	$\mu_{21}^{(2)}$	6.5791	0.20661	(6.1442;6.9367)	0.0154
	$\mu_{22}^{(2)}$	14.811	0.23635	(14.385;15.286)	0.0009
	$\sigma_{211}^{(2)}$	2.1137	0.41496	(1.4666;3.1241)	0.0266
	$\sigma_{222}^{(2)}$	3.7948	0.72236	(2.559;5.3511)	0.0649
	$\sigma_{212}^{(2)}$	1.0023	0.41995	(0.26454;1.8881)	0.0542

Figura 4.6: Convergência dos parâmetros (Pop1).

Figura 4.7: Densidades Marginais a Posteriori (Pop1).

Abaixo temos os gráficos para a Pop2.

Figura 4.8: Convergência dos parâmetros (Pop2).

Figura 4.9: Densidades Marginais a Posteriori (Pop2).

Novamente percebemos bons resultados para a convergência. Abaixo temos a Tabela de classificação.

Tabela 4.6: Tabela de Classificação

Membro pelo Critério Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	86	86.00	14	14.00	100
Verdadeiro	π_2	18	18.00	82	82.00	100

Assim temos,

$$EC = \frac{14 + 18}{100 + 100} = 0.16.$$

Proporção de Classificação correta:

$$PrC = 1 - EC = 0.84$$

Para a distribuição a priori informativa, conseguimos um considerável aumento na proporção total de classificação correta, isto se dá ao fato de termos uma excelente informação a priori. Abaixo, temos a classificação, quando utilizamos o algoritmo EM.

4.5.3 Classificação Utilizando o algoritmo EM

Nesta análise consideramos a estimação dos parâmetros de cada função de densidade, pelo algoritmo EM (ver McLachlan & Krishnan, 1997) e usamos as densidades estimadas

na regra de classificação para cada observação.

As condições iniciais necessárias para o algoritmo EM, dadas abaixo, foram escolhidas com base em várias simulações,

Os parâmetros da distribuição a priori para as duas Populações são dados abaixo:

Pop1:

$$m_1 = \begin{pmatrix} 2.5 & 4.5 \end{pmatrix}; \quad G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1.5 \end{pmatrix};$$

$$m_2 = \begin{pmatrix} 4.0 & 10.0 \end{pmatrix}; \quad G_2 = \begin{pmatrix} 2.0 & 0.4 \\ 0.4 & 2.5 \end{pmatrix};$$

$$p_1 = 0.4 \quad (e) \quad p_2 = 0.6.$$

Pop2:

$$m_1 = \begin{pmatrix} 3.5 & 5.5 \end{pmatrix}; \quad G_1 = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.3 \\ 0.3 & 2.0 \end{pmatrix};$$

$$m_2 = \begin{pmatrix} 6.5 & 14.6 \end{pmatrix}; \quad G_2 = \begin{pmatrix} 2.0 & 0.4 \\ 0.4 & 3.0 \end{pmatrix};$$

$$p_1 = 0.5 \quad e \quad p_2 = 0.5.$$

Abaixo temos as estimativas pontuais para as respectivas populações.

Tabela 4.7: Estimativas Pontuais: EM

Pop1	$\mu_{11}^{(1)}$	$\mu_{12}^{(1)}$	$\sigma_{111}^{(1)}$	$\sigma_{112}^{(1)}$	$\sigma_{122}^{(1)}$	$p_1^{(1)}$
	2.3395	4.5873	1.0910	0.46699	1.0267	0.38
	$\mu_{21}^{(1)}$	$\mu_{22}^{(1)}$	$\sigma_{211}^{(1)}$	$\sigma_{212}^{(1)}$	$\sigma_{222}^{(1)}$	$p_2^{(1)}$
	3.9138	10.073	2.9161	1.4646	2.9391	0.62
Pop2	$\mu_{11}^{(2)}$	$\mu_{12}^{(2)}$	$\sigma_{111}^{(2)}$	$\sigma_{112}^{(2)}$	$\sigma_{122}^{(2)}$	$p_1^{(2)}$
	3.1775	5.58	1.0576	0.1936	1.4385	0.45
	$\mu_{21}^{(2)}$	$\mu_{22}^{(2)}$	$\sigma_{211}^{(2)}$	$\sigma_{212}^{(2)}$	$\sigma_{222}^{(2)}$	$p_2^{(2)}$
	6.5746	14.842	2.6099	1.2188	3.0831	0.55

Abaixo temos a Tabela de classificação:

Tabela 4.8:Tabela de Classificação

Membro pelo Critério Discriminante						
		π_1	taxa	π_2	taxa	valor real
Membro	π_1	84	0.84	14	0.16	100
Verdadeiro	π_2	18	0.18	82	0.82	100

Assim temos,

$$EC = \frac{16 + 18}{100 + 100} = 0.17.$$

Proporção de Classificação correta:

$$PrC = 1 - EC = 0.83$$

Considerando a distribuição a priori informativa, conseguimos um considerável aumento na proporção total de classificação correta. Isto mostra que o modelo proposto modela melhor os dados, e como o aproveitamento da informação a priori leva a melhores resultados. Neste caso, considerando dados gerados, tivemos bons resultados, pois temos boas informações a priori. Talvez, em situações mais reais não tenhamos tanto sucesso, e uma solução clássica (uso do EM) ou a consideração da não informação seja mais indicado.

Um fato importante é que foi verificada a ineficácia dos procedimentos tradicionais de classificação quando trabalhamos com este tipo de dados.

Capítulo 5

Classificação e Discriminação a partir de Variáveis Binárias

Neste capítulo apresentamos o problema de classificação quando os componentes do vetor aleatório X de medidas referente ao objeto são variáveis binárias, ou seja, assumem um de dois possíveis valores (sucesso=1 ou fracasso=0). Em várias áreas de interesse percebemos tais fatos. Por exemplo, na área médica podemos discriminar um paciente em estado grave ou não com base em medidas binárias do tipo :

- Tem problema renal (sim=1, não=0).
- Infecção adquirida na UTI (sim=1, não=0).
- Presença de Câncer (sim=1, não=0).
- Sexo (F=1, M=0).

Em geral, existem vários outros métodos que podem ser aplicados ao problema de classificação quando temos este tipo de variável, como por exemplo, a Regressão Logística (ver por exemplo Hosmer & Lemeshow, 1989) ou o método discriminante apresentado por Krzanowsk(1975), onde é proposto o procedimento de classificação com misturas de variáveis contínuas e binárias. Neste trabalho apresentamos o modelo discriminante com base no procedimento geral de classificação descrito no Capítulo 2 e incorporamos procedimentos Bayesianos, utilizando novamente simulações via MCMC, formulando assim um procedimento alternativo.

5.1 Desenvolvimento do Critério de Classificação

Da mesma forma descrita anteriormente, nos concentramos na classificação para duas populações embora os resultados possam ser generalizados para mais de duas populações.

Supor que é dado um vetor aleatório binário de medidas X associado a um objeto (pessoa) de cada uma de duas populações. Assumindo inicialmente variáveis binárias independentes, temos que a densidade para cada população é dada por,

$$\begin{aligned} f_1(x) &= \prod_{k=1}^q p_{1k}^{x_k} (1 - p_{1k})^{1-x_k}, \text{ para Pop1;} \\ f_2(x) &= \prod_{k=1}^q p_{2k}^{x_k} (1 - p_{2k})^{1-x_k}, \text{ para Pop2;} \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde $x = (x_1, \dots, x_q)$; $x_k = (0 \text{ ou } 1)$; $k = 1, \dots, q$.

Fazendo a razão teremos,

$$\frac{f_1(x)}{f_2(x)} = \frac{\prod_{k=1}^q p_{1k}^{x_k} (1 - p_{1k})^{1-x_k}}{\prod_{k=1}^q p_{2k}^{x_k} (1 - p_{2k})^{1-x_k}} = \left\{ \frac{\prod_{k=1}^q (1 - p_{1k})}{\prod_{k=1}^q (1 - p_{2k})} \right\} \left\{ \prod_{k=1}^q \left(\frac{p_{1k}(1 - p_{2k})}{p_{2k}(1 - p_{1k})} \right)^{x_k} \right\}$$

Aplicando o logaritmo,

$$\log \left\{ \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \right\} = \log \left\{ \prod_{k=1}^q \left(\frac{1 - p_{1k}}{1 - p_{2k}} \right) \right\} + \sum_{k=1}^q x_k \log \left\{ \frac{p_{1k}(1 - p_{2k})}{p_{2k}(1 - p_{1k})} \right\}$$

Definir:

$$\begin{aligned} B_0 &= \log \left\{ \prod_{k=1}^q \left(\frac{1 - p_{1k}}{1 - p_{2k}} \right) \right\} \\ \text{e} \\ B_k &= \log \left\{ \frac{p_{1k}(1 - p_{2k})}{p_{2k}(1 - p_{1k})} \right\} \end{aligned} \quad (5.2)$$

para $k = 1, \dots, q$.

Assim, baseado na regra de classificação geral descrita no capítulo 2, considerando custos de classificação errada e probabilidades a priori para cada população iguais, temos a seguinte regra de alocação,

i- Alocar $x = (x_1, \dots, x_q)$ à população 1 se,

$$B_0 + \sum_{k=1}^q B_k x_k > 0 \quad (5.3)$$

ii- Alocar x para população 2, caso contrário.

Considerando probabilidades a priori para os dois grupos temos,

i- Alocar $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_q)$ à população 1 se,

$$B_0 + \sum_{k=1}^q B_k x_k > \log\left(\frac{\pi_2}{\pi_1}\right) \quad (5.4)$$

ii- Alocar $\mathbf{x}$ para população 2, caso contrário,

onde π_1 é a probabilidade a priori de classificação na população 1 e π_2 é a probabilidade a priori de classificação na população 2.

Os estimadores para p_{jk} ; $j = 1, 2$; $k = 1, \dots, q$ são calculados, tomando para a população 1 n_1 observações e para a população 2 n_2 , com $n = n_1 + n_2$: tamanho total da amostra preliminar. Assim temos,

$$\begin{aligned} \hat{p}_{1k} &= \frac{\sum_{i=1}^{n_1} x_{ki}}{n_1} \\ \hat{p}_{2k} &= \frac{\sum_{i=1}^{n_2} x_{ki}}{n_2} \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde $i = 1, \dots, n_j$, $j = 1, 2$.

Daí, temos,

$$\begin{aligned} \hat{B}_0 &= \log\left\{\prod_{k=1}^q \left(\frac{1-\hat{p}_{1k}}{1-\hat{p}_{2k}}\right)\right\} \\ \text{e} \\ \hat{B}_k &= \log\left\{\frac{\hat{p}_{1k}(1-\hat{p}_{2k})}{\hat{p}_{2k}(1-\hat{p}_{1k})}\right\} \end{aligned} \quad (5.6)$$

para $k = 1, \dots, q$.

Portanto, uma regra de classificação amostral simples é dada por,

i- Alocar $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_q)$ à população 1 se,

$$\hat{B}_0 + \sum_{k=1}^q \hat{B}_k x_k > 0 \quad (5.7)$$

ii- Alocar $\mathbf{x}$ para população 2, caso contrário.

Na próxima seção será apresentado uma alternativa Bayesiana para o problema.

5.2 Alternativa Bayesiana para a Classificação Binária.

Nesta seção apresentamos uma alternativa Bayesiana para a classificação com dados binários, utilizando métodos MCMC, em especial o algoritmo Gibbs Sampling, usando estimativas de Monte Carlo para as densidades preditivas que são utilizadas na regra de classificação. Considerando a população 1, a verossimilhança para o modelo é dada por,

$$L(p_1) = L(p_{11}, \dots, p_{1q}) = \prod_{i=1}^{n_1} \prod_{k=1}^q p_{1k}^{x_{ki}} (1 - p_{1k})^{1-x_{ki}} \quad (5.8)$$

Da mesma forma para a população 2 temos,

$$L(p_2) = L(p_{21}, \dots, p_{2q}) = \prod_{i=1}^{n_2} \prod_{k=1}^q p_{2k}^{x_{ki}} (1 - p_{2k})^{1-x_{ki}}, \quad (5.9)$$

onde $p_j = (p_{j1}, \dots, p_{jq})$ e $j = 1, 2$.

Fazendo para cada grupo,

$$\bar{x}_k^{(1)} = \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} x_{ki}, \text{ para a pop.1.} \quad (5.10)$$

$$\bar{x}_k^{(2)} = \frac{1}{n_2} \sum_{i=1}^{n_2} x_{ki}, \text{ para a pop.2.}$$

temos,

$$L(p_1) = \prod_{k=1}^q p_{1k}^{n_1 \bar{x}_k^{(1)}} (1 - p_{1k})^{n_1 (1 - \bar{x}_k^{(1)})} \text{ para a pop.1.} \quad (5.11)$$

$$L(p_2) = \prod_{k=1}^q p_{2k}^{n_2 \bar{x}_k^{(2)}} (1 - p_{2k})^{n_2 (1 - \bar{x}_k^{(2)})} \text{ para a pop.2.}$$

Consideramos aqui distribuições a priori dadas por,

$$p_{1k} \sim \text{Beta}(a_{1k}, b_{1k}) \quad (5.12)$$

$$p_{2k} \sim \text{Beta}(a_{2k}, b_{2k}),$$

para $k = 1, \dots, q$, onde $\text{Beta}(a, b)$ denota uma distribuição Beta com média $\frac{a}{a+b}$ e variância $\frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)}$.

Considerando as distribuições a priori independentes e combinando com as expressões dadas em (5.11), temos as distribuições a posteriori conjunta para cada população dadas por,

$$\pi(p_1|D_1) \propto \prod_{k=1}^q p_{1k}^{a_{1k}+n_1\bar{x}_k^{(1)}} (1-p_{1k})^{b_{1k}+n_1-\bar{x}_k^{(1)}} \text{ para a pop.1} \quad (5.13)$$

$$\pi(p_2|D_2) \propto \prod_{k=1}^q p_{2k}^{a_{2k}+n_2\bar{x}_k^{(2)}} (1-p_{2k})^{b_{2k}+n_2-\bar{x}_k^{(2)}} \text{ para a pop.2,}$$

onde D_j , $j = 1, 2$; representa as observações de cada grupo.

Assim, as distribuições condicionais necessárias para o algoritmo Gibbs Sampling para cada população são dados abaixo.

Para Pop1 temos,

$$(p_{1k}|D_1) \sim \text{Beta}(a_{1k}+n_1\bar{x}_k^{(1)}, b_{1k}+n_1-\bar{x}_k^{(1)}); \quad (5.14)$$

Para Pop2 temos,

$$(p_{2k}|D_2) \sim \text{Beta}(a_{2k}+n_2\bar{x}_k^{(2)}, b_{2k}+n_2-\bar{x}_k^{(2)}); \quad (5.15)$$

Assim, a densidade preditiva para cada população será da forma,

$$f_1(x) = \int_{\Theta_1} f_1(x|p_1)\pi(p_1|D_1)dp_1 \quad (5.16)$$

$$f_2(x) = \int_{\Theta_2} f_2(x|p_2)\pi(p_2|D_2)dp_2,$$

onde Θ_j , $j = 1, 2$; é o espaço de parâmetros da j -ésima população.

Gerado as amostras de p_1 e p_2 a partir do algoritmo Gibbs Sampling, usamos as estimativas de Monte Carlo para $f_1(x)$ e $f_2(x)$ dadas por,

$$\hat{f}_1(x) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S f_1(x|p_1^{(s)}) \quad (5.17)$$

$$\hat{f}_2(x) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S f_2(x|p_2^{(s)}),$$

onde $f_j(x|p_j) = \prod_{k=1}^q p_{jk}^{x_k} (1 - p_{jk})^{1-x_k}$, com $x = (x_1, \dots, x_q)$ e S o número de amostras geradas pelo algoritmo. Portanto,

$$\hat{f}_1(x) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{k=1}^q (p_{1k}^{(s)})^{x_k} (1 - p_{1k}^{(s)})^{1-x_k} \right\} \quad (5.18)$$

$$\hat{f}_2(x) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{k=1}^q (p_{2k}^{(s)})^{x_k} (1 - p_{2k}^{(s)})^{1-x_k} \right\}$$

Novamente a regra de classificação é dada por,

i- Alocar $x = (x_1, \dots, x_q)$ à população 1 se,

$$\frac{\hat{f}_1(x)}{\hat{f}_2(x)} \geq 1 \quad (5.19)$$

ii- Alocar x para população 2, caso contrário.

5.3 Exemplo de Aplicação.

Vamos ilustrar um problema de classificação com dados binários a partir dos dados de Hosmer (ver Hosmer, D.W.; Lemeshow, S; 1989). São dados de internação numa UTI de um hospital. Para os pacientes internados na UTI (200 pacientes ao total), há dois grupos:

- a). Pacientes que sobrevivem.
- b). Pacientes que não sobrevivem.

Para cada paciente, existe uma série de variáveis binárias associadas. Abaixo vamos descrever as variáveis usadas neste exemplo.

- 1- x_1 = Idade (anos) ($\geq 60 = 1$; $< 60 = 0$);
- 2- x_2 = Sexo (F=1; M=0).
- 3- x_3 = Raça (branco=1; não branco=0).
- 4- x_4 = Tipo de admissão à UTI (médico=0; cirurgia=1).
- 5- x_5 = Presença de câncer (sim=1; não=0).

- 6- x_6 = Problema renal (sim=1;não=0).
- 7- x_7 = Infecção adquirida na UTI(sim=1;não=0).
- 8- x_8 = cpr prévia à admissão na UTI(sim=1;não=0).
- 9- x_9 = Pressão sistólica no momento da admissão na UTI ($\geq 150 = 1$; $< 150 = 0$).
- 10- x_{10} = Batidas do coração no momento da internação na UTI ($> 110 = 1$; $\leq 110 = 0$).
- 11- x_{11} = Internação prévia (6 meses anteriores)(sim=1;não=0).
- 12- x_{12} = Tipo de internação (emergência=1;eletiva=0).
- 13- x_{13} = Presença de fratura (sim=1;não=0).
- 14- x_{14} = PO_2 no sangue ($\leq 60 = 1$; $> 60 = 0$).
- 15- x_{15} = PH no sangue ($< 7.25 = 1$; $\geq 7.25 = 0$).
- 16- x_{16} = PCO_2 no sangue ($> 45 = 1$; $\leq 45 = 0$).
- 17- x_{17} = Bicarbonato no sangue ($< 18 = 1$; $\geq 18 = 0$).

Assumimos inicialmente variáveis binárias independentes para os dois grupos. Com base nestas variáveis vamos classificar as pessoas em sobreviventes ou não sobreviventes. Para este conjunto de dados temos 17 variáveis ou seja $k = 1, \dots, 17$, para o grupo de sobreviventes, temos $n_1 = 160$ observações e para os não sobreviventes temos $n_2 = 40$, totalizando assim uma amostra prévia de $n = n_1 + n_2 = 200$ observações.

Primeiro utilizamos o procedimento geral de classificação. Abaixo, na Tabela 6.1, temos as estimativas para os parâmetros p_{jk} , estimados com base no procedimento apresentado na seção 6.1.

Table 6.1- Estimativas para p_{jk}

	p_{j1}	p_{j2}	p_{j3}	p_{j4}	p_{j5}	p_{j6}	p_{j7}	p_{j8}	p_{j9}
Pop1	0.537	0.375	0.862	0.581	0.100	0.0687	0.375	0.0375	0.300
Pop2	0.725	0.400	0.925	0.350	0.100	0.200	0.600	0.175	0.125
	p_{j10}	p_{j11}	p_{j12}	p_{j13}	p_{j14}	p_{j15}	p_{j16}	p_{j17}	-
Pop1	0.318	0.143	0.681	0.056	0.068	0.056	0.100	0.062	-
Pop2	0.350	0.175	0.950	0.100	0.125	0.100	0.100	0.125	-

Abaixo temos a Tabela 6.2, tabela de classificação,

Tabela 6.2:Tabela de Classificação

Pela Função Discriminante

		Pöp1	taxa	Pöp2	taxa	valor real
Membro	Pop1	109	68.10	51	31.80	160
Verdadeiro	Pop2	11	27.50	29	72.50	40

Assim a taxa de erro aparente (*APER*) é igual a:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{51 + 11}{160 + 40} = 0.31$$

Os resultados da classificação para este tipo de dado parecem não ser muito eficientes. No entanto, dão ao pesquisador uma idéia da situação preliminar de um novo paciente.

Agora vamos checar a eficiência do procedimento Bayesiano.

Abaixo, na Tabela 6.3, temos os parâmetros escolhidos a priori para a_{jk} e b_{jk} , $j = 1, 2$; $k = 1, \dots, 17$.

Table 6.3-Parâmetros a Priori

	a_{1k}	b_{1k}	a_{2k}	b_{2k}
k=1	0.1	0.09	0.1	0.04
k=2	0.1	0.17	0.10	0.15
k=3	0.1	0.02	0.10	0.01
k=4	0.1	0.07	0.1	0.18
k=5	0.1	0.9	0.1	0.9
k=6	0.1	1.32	0.1	.04
k=7	0.1	0.11	0.10	0.067
k=8	0.1	2.4	0.10	0.49
k=9	0.1	0.23	0.10	0.73
k=10	0.1	0.22	0.10	0.18
k=11	0.1	0.61	0.10	0.49
k=12	0.1	0.05	0.10	0.005
k=13	0.1	1.68	0.10	0.90
k=14	0.1	1.37	0.10	0.73
k=15	0.1	1.68	0.10	0.90
k=16	0.1	0.90	0.10	0.90
k=17	0.1	1.51	0.10	0.73

Abaixo temos a Tabela 6.4 com o resumo das estimativas.

Table 6.4 - Resumos das Estimativas

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW
Pop1	P ₁₁	0.537	0.042	(0.451;0.61)	0.035
	P ₁₂	0.371	0.036	(0.298;0.432)	0.035
	P ₁₃	0.862	0.025	(0.814;0.909)	0.0306
	P ₁₄	0.580	0.040	(0.503;0.664)	0.0568
	P ₁₅	0.101	0.024	(0.059;0.153)	0.0519
	P ₁₆	0.068	0.021	(0.032;0.113)	0.0115
	P ₁₇	0.376	0.036	(0.306;0.446)	0.0732
	P ₁₈	0.036	0.013	(0.014;0.066)	0.0582
	P ₁₉	0.302	0.035	(0.233;0.369)	0.0189
	P ₁₁₀	0.317	0.034	(0.263;0.390)	0.0019
	P ₁₁₁	0.141	0.028	(0.090;0.206)	0.0116
	P ₁₁₂	0.681	0.036	(0.604;0.740)	0.0426
	P ₁₁₃	0.057	0.019	(0.026;0.098)	0.0588
	P ₁₁₄	0.068	0.020	(0.035;0.111)	0.0719
	P ₁₁₅	0.055	0.017	(0.027;0.095)	0.0146
	P ₁₁₆	0.102	0.023	(0.060;0.155)	0.0736
	P ₁₁₇	0.063	0.020	(0.032;0.112)	0.0128
Pop2	P ₂₁	0.714	0.071	(0.568;0.849)	0.026
	P ₂₂	0.401	0.076	(0.255;0.552)	0.013
	P ₂₃	0.918	0.044	(0.816;0.983)	0.008
	P ₂₄	0.343	0.072	(0.220;0.497)	0.0586
	P ₂₅	0.095	0.043	(0.029;0.189)	0.0719
	P ₂₆	0.200	0.059	(0.100;0.330)	0.0116
	P ₂₇	0.598	0.080	(0.444;0.753)	0.0736
	P ₂₈	0.173	0.060	(0.0719;0.296)	0.0524
	P ₂₉	0.122	0.0525	(0.041;0.240)	0.0189
	P ₂₁₀	0.357	0.080	(0.223;0.521)	0.0019
	P ₂₁₁	0.173	0.059	(0.078;0.295)	0.0121
	P ₂₁₂	0.951	0.031	(0.882;0.993)	0.0436
	P ₂₁₃	0.100	0.0471	(0.025;0.205)	0.0388
	P ₂₁₄	0.121	0.051	(0.044;0.235)	0.0519
	P ₂₁₅	0.103	0.046	(0.035;0.209)	0.013
	P ₂₁₆	0.098	0.043	(0.0301;0.216)	0.0236
	P ₂₁₇	0.128	0.0493	(0.0507;0.229)	0.0588

Nas Figuras abaixo, temos os gráficos de convergência e as desindades marginais a posterior para os parâmetros.

Figura 5.11: Convergência dos parâmetros (Pop1).

Figura 5.2: Densidades Marginais a Posteriori (Pop1).

Figura 5.3: Convergência dos parâmetros (Pop2).

Figura 5.4: Densidades Marginais a Posteriori (Pop2).

Abaixo temos a Tabela de classificação,

Tabela 6.5:Tabela de Classificação

		Pela Função Discriminante				
		Pop1	taxa	Pop2	taxa	valor real
Membro	Pop1	109	68.10	51	31.80	160
Verdadeiro	Pop2	11	27.50	29	72.50	40

Assim a taxa de erro aparente $APER$ é igual a:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{51 + 11}{160 + 40} = 0.31$$

Os resultados da classificação para este procedimento foram idênticos ao anterior. O procedimento Bayesiano se mostrou como uma outra alternativa para a classificação com tais dados. Acreditamos que com uma boa informação a priori por parte do pesquisador, possamos ter um melhor desempenho.

Capítulo 6

Classificação Considerando Dados Binários Correlacionados

No capítulo 5, quando classificamos um objeto ou pessoa a um determinado grupo com base em medidas binárias, não estávamos levando em consideração a correlação entre essas medidas, o que pode ser um erro, pois para um mesmo indivíduo são tomadas várias medidas.

Neste capítulo, tentamos incorporar o fator correlação entre as medidas para um mesmo indivíduo, inspirados no modelo proposto por Prentice(1988).

Utilizamos uma análise Bayesiana Hierárquica, considerando um efeito aleatório comum a cada indivíduo, que captura a correlação entre as medidas. Num primeiro caso assumimos uma distribuição normal para tal efeito e em outro caso assumimos uma mistura de distribuições normais.

6.1 Desenvolvimento do Modelo

Novamente consideramos o procedimento de classificação para duas populações. Dentro das características do modelo, considerando uma amostra $x = (x_1, \dots, x_{n_j})$ para cada população $j = 1, 2$, onde $x_i = (x_{1i}, \dots, x_{ki}, \dots, x_{qi})$. As funções de verossimilhança para cada população são dadas por:

$$L(p_1) = L(\bar{p}_{11}, \dots, p_{1q}) = \prod_{i=1}^{n_1} \prod_{k=1}^q p_{1k}^{x_{ki}} (1 - p_{1k})^{1-x_{ki}} \quad (6.1)$$

$$L(p_2) = L(\bar{p}_{21}, \dots, p_{2q}) = \prod_{i=1}^{n_2} \prod_{k=1}^q p_{2k}^{x_{ki}} (1 - p_{2k})^{1-x_{ki}},$$

com $i = 1, \dots, n_j$, $j = 1, 2$, $k = 1, \dots, q$, sendo n_1 o número de observações da população 1 e n_2 o número de observações da população 2.

Associando o modelo logístico com efeitos aleatórios, tentamos incorporar a correlação entre as variáveis medidas de um mesmo indivíduo. Portanto para a população 1 temos,

$$p_{1ki} = \frac{e^{\alpha_{1i} + \beta_{1k}}}{1 + e^{\alpha_{1i} + \beta_{1k}}} \quad (6.2)$$

com $i = 1, \dots, n_1$; $k = 1, \dots, q$.

Aqui, α_{1i} é visto como efeito aleatório comum a cada indivíduo que captura a correlação entre as medidas. O parâmetro β_{1k} , contribui no peso individual da probabilidade de sucesso de cada medida binária.

Da mesma forma para população 2,

$$p_{2ki} = \frac{e^{\alpha_{2i} + \beta_{2k}}}{1 + e^{\alpha_{2i} + \beta_{2k}}} \quad (6.3)$$

com $i = 1, \dots, n_2$; $k = 1, \dots, q$.

6.2 Análise Bayesiana Hierárquica Assumindo Efeitos Aleatórios Normais

Aqui, assumimos que α_{ji} , $i = 1, \dots, n_j$, $j = 1, 2$, são efeitos aleatórios independentes com distribuição normal. Assim, para cada população temos,

$$\begin{aligned} \alpha_{1i} &\sim N(0, \sigma_1^2) \\ \alpha_{2i} &\sim N(0, \sigma_2^2), \end{aligned} \quad (6.4)$$

onde σ_j^2 é desconhecido com uma distribuição conhecida, portanto σ_j^2 é um hiperparâmetro e $N(0, \sigma_j^2)$ é uma distribuição a priori hierárquica para α_{ji} , $i = 1, \dots, n_j$, $j = 1, 2$. Sendo assim necessário a atribuição de uma distribuição a priori para estes hiperparâmetros.

Consideramos as seguintes distribuições a priori para σ_j^2 e β_{jk} em cada população.

Para a população 1, vamos ter,

$$\begin{aligned}\sigma_1^2 &\sim IG(a_1, b_1); a_1, b_1 \text{ conhecidos} \\ \beta_{1k} &\sim N(c_{1k}, d_{1k}^2); c_{1k}, d_{1k} \text{ conhecidos},\end{aligned}\quad (6.5)$$

com $k = 1, \dots, q$, onde IG é uma distribuição Gama Invertida com média $\frac{b}{a-1}$ para $a > 1$ e variância $\frac{b^2}{(a-1)^2(a-2)}$, $a > 2$.

Assumindo independência a priori para os parâmetros, a distribuição a priori conjunta é da forma,

$$\pi(\alpha_1, \sigma_1^2, \beta_1) \propto (\sigma_1^2)^{-(a_1+1)} \exp\left\{-\frac{b_1}{\sigma_1^2}\right\} \left\{\prod_{i=1}^{n_1} \frac{1}{\sqrt{\sigma_1^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_1^2} \alpha_{1i}^2\right\}\right\} \left\{\prod_{k=1}^q \exp\left\{-\frac{1}{2d_{1k}^2} (\beta_{1k} - c_{1k})^2\right\}\right\}$$

isto é,

$$\pi(\alpha_1, \sigma_1^2, \beta_1) \propto (\sigma_1^2)^{-(a_1 + \frac{n_1}{2} + 1)} \exp\left\{-\frac{1}{\sigma_1^2} \left[b_1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_1} \alpha_{1i}^2\right]\right\} \left\{\prod_{k=1}^q \exp\left\{-\frac{1}{2d_{1k}^2} (\beta_{1k} - c_{1k})^2\right\}\right\}, \quad (6.6)$$

onde $\alpha_1 = (\alpha_{11}, \dots, \alpha_{1n_1})$, $\beta_1 = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1q})$.

Assim a distribuição a posteriori conjunta a partir de 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6 é dada por:

$$\begin{aligned}\pi(\alpha_1, \sigma_1^2, \beta_1 | D_1) &\propto \pi(\alpha_1, \sigma_1^2, \beta_1) L(p_1) \\ &\propto (\sigma_1^2)^{-(a_1 + \frac{n_1}{2} + 1)} \exp\left\{-\frac{1}{\sigma_1^2} \left[b_1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_1} \alpha_{1i}^2\right]\right\} \left\{\prod_{k=1}^q \exp\left\{-\frac{1}{2d_{1k}^2} (\beta_{1k} - c_{1k})^2\right\}\right\} \\ &\quad \exp\left\{\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} + \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q x_{ki} \beta_{1k} - \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\right\},\end{aligned}\quad (6.7)$$

onde $D_1 = \{x_1, \dots, x_{n_1}\}$.

As distribuições condicionais necessárias para o algoritmo Gibbs Sampling são dadas abaixo.

Para α_{1i} temos,

$$\pi(\alpha_{1i} | \alpha_1^{(i)}, \sigma_1^2, \beta_1, D_1) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_1^2} \alpha_{1i}^2\right\} \exp\left\{\sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} - \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\right\},$$

isto é,

$$\pi(\alpha_{1i}|\alpha_1^{(i)}, \sigma_1^2, \beta_1, D_1) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_1^2}(\alpha_{1i} - y_i\sigma_1^2)^2\right\} \exp\left\{-\sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\right\},$$

ou seja,

$$\pi(\alpha_{1i}|\alpha_1^{(i)}, \sigma_1^2, \beta_1, D_1) \propto N(y_i\sigma_1^2, \sigma_1^2) \Psi_1(\alpha_1, \beta_1), \quad (6.8)$$

onde $\Psi_1(\alpha_1, \beta_1) = \exp\{-\sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\}$, $y_i = \sum_{k=1}^q x_{ik}$, $k = 1, \dots, q$, $i = 1, \dots, n_1$ e $\alpha_1^{(i)} = (\alpha_{11}, \dots, \alpha_{1(i-1)}, \alpha_{1(i+1)}, \dots, \alpha_{1n_1})$.

Para σ_1^2 ,

$$\pi(\sigma_1^2|\alpha_1, \beta_1, D_1) \sim IG(a_1 + \frac{n_1}{b_2}, b_1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_1} \alpha_{1i}^2) \quad (6.9)$$

Agora para β_{1k} temos,

$$\pi(\beta_{1k}|\beta_1^{(k)}, \sigma_1^2, \alpha_1, D_1) \propto \left\{ \prod_{k=1}^q \exp\left\{-\frac{1}{2d_{1k}^2}(\beta_{1k} - c_{1k})^2\right\} \right\} \exp\left\{\beta_{1k} \sum_{i=1}^{n_1} x_{ki} - \sum_{i=1}^{n_1} \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\right\},$$

isto é,

$$\pi(\beta_{1k}|\beta_1^{(k)}, \sigma_1^2, \alpha_1, D_1) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2d_{1k}^2}[\beta_{1k} - (c_{1k} + d_{1k}^2 V_k)]^2\right\} \exp\left\{-\sum_{i=1}^{n_1} \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\right\},$$

ou seja,

$$\pi(\beta_{1k}|\beta_1^{(k)}, \sigma_1^2, \alpha_1, D_1) \propto N(c_{1k} + d_{1k}^2 V_k, d_{1k}^2) \Psi_2(\alpha_1, \beta_{1k}), \quad (6.10)$$

onde $\Psi_2(\alpha_1, \beta_{1k}) = \exp\left\{-\sum_{i=1}^{n_1} \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\})\right\}$, $V_k = \sum_{i=1}^{n_1} x_{ki}$, para $k = 1, \dots, q$ e $\beta_1^{(k)} = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1(k-1)}, \beta_{1(k+1)}, \dots, \beta_{1q})$.

Dá mesma forma procedemos para a população 2:

Dados as formas das distribuições condicionais, vamos utilizar o algoritmo Gibbs Sampling para gerar amostras de σ_j^2 e o algoritmo Metropolis-Hasting para gerar amostras de α_{ji} e β_{jk} , $j = 1, 2$, $i = 1, \dots, n_j$, $k = 1, \dots, q$.

Assim gerado S amostras a partir de Gibbs-Metropolis, encontramos as médias a posteriori dos parâmetros para cada grupo, utilizando o estimador de Monte Carlo.

Portanto, para a população 1 temos,

$$\hat{\alpha}_{11}, \dots, \hat{\alpha}_{1n_1}, \hat{\sigma}_1^2, \hat{\beta}_{11}, \dots, \hat{\beta}_{1q}$$

para a população 2,

$$\hat{\alpha}_{21}, \dots, \hat{\alpha}_{2n_2}, \hat{\sigma}_2^2, \hat{\beta}_{21}, \dots, \hat{\beta}_{2q}$$

A partir daí, calculamos

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} \hat{\alpha}_{1i} \quad (6.11)$$

$$\hat{\alpha}_2 = \frac{1}{n_2} \sum_{i=1}^{n_2} \hat{\alpha}_{2i}$$

Portanto, temos as seguintes estimativas para cada população,

$$\hat{\alpha}_1, \hat{\sigma}_1^2, \hat{\beta}_{11}, \dots, \hat{\beta}_{1q}, \text{ para a população 1.}$$

$$\hat{\alpha}_2, \hat{\sigma}_2^2, \hat{\beta}_{21}, \dots, \hat{\beta}_{2q}, \text{ para a população 2.}$$

Logo, vamos ter

$$\hat{p}_{1k} = \frac{e^{\hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}_{1k}}}{1 + e^{\hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}_{1k}}}$$

e

$$\hat{p}_{2k} = \frac{e^{\hat{\alpha}_2 + \hat{\beta}_{2k}}}{1 + e^{\hat{\alpha}_2 + \hat{\beta}_{2k}}}$$

Assim,

$$\hat{f}_1(\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^q \hat{p}_{1k}^{x_k} (1 - \hat{p}_{1k})^{1-x_k} \quad (6.12)$$

$$\hat{f}_2(\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^q \hat{p}_{2k}^{x_k} (1 - \hat{p}_{2k})^{1-x_k}$$

Novamente a alocação para uma nova observação $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_q)$ será dado por,

i- Alocar x à população 1 se,

$$\frac{\hat{f}_1(x)}{\hat{f}_2(x)} > 1 \quad (6.13)$$

ii- Alocar x à população 2, caso contrário.

6.3 Modelos de Efeitos Aleatórios com uma Mistura de Distribuições Normais

Nesta seção, consideramos os $\alpha_{ji}, j = 1, 2, i = 1, \dots, n_j$ efeitos aleatórios independentes como uma mistura de distribuições normais, pois quando consideramos tais efeitos independentes, podemos ter uma multimodalidade e portanto modelar estes parâmetros com uma única distribuição normal pode não ser muito realístico.

Tentando construir um modelo mais robusto, assumimos para α_{ji} uma mistura de duas distribuições normais.

Desenvolvendo o modelo para a população 1 temos,

$$\pi(\alpha_{1i}) = \sum_{l=1}^2 \theta_{1l} \phi_i(\alpha_{1i} | \mu_{1l}, \sigma_{1l}^2),$$

ou seja,

$$\pi(\alpha_{1i}) = \theta_{11} \phi_1(\alpha_{1i} | \mu_{11}, \sigma_{11}^2) + (1 - \theta_{11}) \phi_2(\alpha_{1i} | \mu_{12}, \sigma_{12}^2); i = 1, \dots, n_j, \quad (6.14)$$

onde ϕ_l denota uma densidade normal $N(\mu_{1l}, \sigma_{1l}^2)$, com a restrição $\theta_{11} + \theta_{12} = 1$ e $l = 1, 2$ são índices dos componentes da mistura.

Assumindo as seguintes distribuições a priori para os parâmetros,

$$(i) \quad \mu_{1l} \sim N(d_{1l}, e_{1l}^2) \quad \text{com } d_{1l}, e_{1l} \quad \text{conhecidos, } l = 1, 2.$$

$$(ii) \quad \sigma_{1l}^2 \sim IG(a_{1l}, b_{1l}) \quad \text{com } a_{1l}, b_{1l} \quad \text{conhecidos, } l = 1, 2.$$

$$(iii) \quad \beta_{1k} \sim N(c_{1k}, d_{1k}^2) \quad \text{com } c_{1k}, d_{1k} \quad \text{conhecidos, } k = 1, \dots, q.$$

$$(iv) \quad \theta_{11} \sim Beta(f_1, g_1) \quad \text{com } f_1, g_1 \quad \text{conhecidos.}$$

Assumindo independência a priori entre os parâmetros, a distribuição a posteriori conjunta para $\alpha_1 = (\alpha_{11}, \dots, \alpha_{1n_1})$, $\mu_1 = (\mu_{11}, \mu_{12})$, θ_{11} , $\beta_1 = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1q})$ e $\sigma_1 = (\sigma_{11}^2, \sigma_{12}^2)$ é dada por,

$$\begin{aligned} \pi(\alpha_1, \beta_1, \mu_1, \sigma_1, \theta_{11} | D_1) \propto & \prod_{i=1}^{n_1} \left\{ \sum_{l=1}^2 \theta_{1l} \phi_l(\alpha_{1i} | \mu_{1l}, \sigma_{1l}^2) \right\} \prod_{l=1}^2 \left\{ (\sigma_{1l}^2)^{-(a_{1l}+1)} \exp \left[-\frac{b_{1l}}{\sigma_{1l}^2} \right] \right\} \\ & \prod_{l=1}^2 \left\{ \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_{1l}^2} (\mu_{1l} - d_{1l}^2) \right\} \right\} \theta_{11}^{f_{11}-1} (1 - \theta_{11})^{g_{11}-1} \left\{ \prod_{k=1}^q \exp \left\{ -\frac{1}{2d_{1k}^2} (\beta_{1k} - c_{1k})^2 \right\} \right\} \\ & \exp \left\{ \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} + \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q x_{ki} \beta_{1k} - \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\}, \end{aligned} \quad (6.16)$$

onde $D_1 = (x_1, \dots, x_{n_1})$.

Novamente percebemos que a mistura de distribuições normais, dificulta o cálculo das distribuições a posteriori marginais para os parâmetros quando consideramos uma análise Bayesiana. Assim, para simplificar as distribuições condicionais necessárias para o algoritmo Gibbs Sampling consideramos, como no capítulo 4, a incorporação de variáveis latentes (ver Tanner & Wong, 1987) dadas por $z_i = (z_{i1}, z_{i2})$, $z_{i1} + z_{i2} = 1$, $i = 1, \dots, n_j$ onde z_{i1} tem uma distribuição Binomial $b(1, h_{i1})$ onde,

$$h_{i1} = \frac{\theta_{11} \phi_1(\alpha_{1i} | \mu_{11}, \sigma_{11}^2)}{\sum_{l=1}^2 \theta_{1l} \phi_l(\alpha_{1i} | \mu_{1l}, \sigma_{1l}^2)} \quad (6.17)$$

Assim, considerando uma amostra $z = (z_1, \dots, z_{n_1})$, temos

$$\begin{aligned} \pi(z) &= \prod_{i=1}^{n_1} h_{i1}^{z_{i1}} (1 - h_{i1})^{z_{i2}} \\ &= \frac{\prod_{i=1}^{n_1} \prod_{l=1}^2 \left[\theta_{1l} \phi_l(\alpha_{1i} | \mu_{1l}, \sigma_{1l}^2) \right]^{z_{il}}}{\prod_{i=1}^{n_1} \left\{ \sum_{l=1}^2 \theta_{1l} \phi_l(\alpha_{1i} | \mu_{1l}, \sigma_{1l}^2) \right\}}, \end{aligned} \quad (6.18)$$

onde

$$z_{i1} = \begin{cases} 1 & \text{com probabilidade } h_{i1}, \\ 0 & \text{com probabilidade } 1 - h_{i1}. \end{cases}$$

Combinando (6.16) com (6.18) temos a seguinte distribuição a posteriori conjunta,

$$\pi(\alpha_1, \beta_1, \mu_1, \sigma_1, \theta_{11} | z, D_1) \propto \prod_{i=1}^{n_1} \prod_{l=1}^2 \left[\theta_{1l} \phi_l(\alpha_{1i} | \mu_{1l}, \sigma_{1l}^2) \right]^{z_{il}} \prod_{l=1}^2 \left\{ (\sigma_{1l}^2)^{-(a_{1l}+1)} \exp \left[-\frac{b_{1l}}{\sigma_{1l}^2} \right] \right\} \\ \prod_{l=1}^2 \left\{ \exp \left\{ -\frac{1}{2e_{1l}} (\mu_{1l} - d_{1l}^2) \right\} \right\} \theta_{11}^{f_{11}-1} (1 - \theta_{11})^{g_1-1} \left\{ \prod_{k=1}^q \exp \left\{ -\frac{1}{2d_{1k}^2} (\beta_{1k} - c_{1k})^2 \right\} \right\} \\ \exp \left\{ \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} + \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q x_{ki} \beta_{1k} - \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\} \quad (6.19)$$

De (6.19), encontramos as distribuições condicionais necessária para o algoritmo Gibbs Sampling.

Para α_{1i} temos,

$$\pi(\alpha_{1i} | \alpha_1^{(i)}, \beta_1, \mu_1, \sigma_1, \theta_{11}, z, D_1) \propto \exp \left\{ -\frac{z_{i1}}{2\sigma_{11}^2} (\alpha_{1i} - \mu_{11})^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{z_{i2}}{2\sigma_{12}^2} (\alpha_{1i} - \mu_{12})^2 \right\} \\ \exp \left\{ \sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} - \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\},$$

isto é,

$$\pi(\alpha_{1i} | \alpha_1^{(i)}, \beta_1, \mu_1, \sigma_1, \theta_{11}, z, D_1) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{12}^2 z_{i1} + \sigma_{11}^2 z_{i2}}{\sigma_{11}^2 \sigma_{12}^2} \right) \left(\alpha_{1i} - \frac{z_{i1} \mu_{11} \sigma_{12}^2 + z_{i2} \mu_{12} \sigma_{11}^2}{\sigma_{12}^2 z_{i1} + \sigma_{11}^2 z_{i2}} \right)^2 \right\} \\ \exp \left\{ \sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} - \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\},$$

ou seja,

$$\pi(\alpha_{1i} | \alpha_1^{(i)}, \beta_1, \mu_1, \sigma_1, \theta_{11}, z, D_1) \propto N \left(\frac{z_{i1} \mu_{11} \sigma_{12}^2 + z_{i2} \mu_{12} \sigma_{11}^2}{\sigma_{12}^2 z_{i1} + \sigma_{11}^2 z_{i2}}, \frac{\sigma_{11}^2 \sigma_{12}^2}{\sigma_{12}^2 z_{i1} + \sigma_{11}^2 z_{i2}} \right) \Psi_3(\alpha_{1i}, \beta_1), \quad (6.20)$$

onde

$$\Psi_3(\alpha_{1i}, \beta_1) = \exp \left\{ \sum_{k=1}^q x_{ki} \alpha_{1i} - \sum_{k=1}^q \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\}$$

para $i = 1, \dots, n_1$ e $\alpha_1^{(i)} = (\alpha_{11}, \dots, \alpha_{1(i-1)}, \alpha_{1(i+1)}, \dots, \alpha_{1n_1})$.

Para σ_{1l}^2 temos,

$$\pi(\sigma_{1l}^2 | \alpha_1, \beta_1, \mu_1, \theta_{11}, z, D_1) \propto (\sigma_{1l}^2)^{-\left(a_{1l} + \frac{\sum_{i=1}^{n_1} z_{il}}{2} + 1\right)} \exp \left\{ -\frac{1}{\sigma_{1l}^2} \left(\frac{\sum_{i=1}^{n_1} z_{il} (\alpha_{1i} - \mu_{1l})^2}{2} + b_{1l} \right) \right\},$$

ou seja,

$$(\sigma_{1l}^2 | \alpha_1, \beta_1, \mu_1, \theta_{1l}, z, D_1) \sim IG \left(a_{1l} + \frac{\sum_{i=1}^{n_1} z_{il}}{2} + 1, \frac{\sum_{i=1}^{n_1} z_{il} (\alpha_{1i} - \mu_{1l})^2}{2} + b_{1l} \right) \quad (6.21)$$

$l = 1, 2$.

Para θ_{1l} temos,

$$(\theta_{1l} | \alpha_1, \beta_1, \mu_1, \sigma_1, z, D_1) \sim \text{Beta}(f_1 + \sum_{i=1}^{n_1} z_{i1}, g_1 + \sum_{i=1}^{n_1} z_{i2}) \quad (6.22)$$

Para β_{1k} temos,

$$\pi(\beta_{1k} | \beta_1^{(k)}, \sigma_1, \alpha_1, \mu_1, \theta_{1l}, z, D_1) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2d_{1k}^2} \left[\beta_{1k} - (c_{1k} + d_{1k}^2 V_k) \right]^2 \right\} \exp \left\{ -\sum_{i=1}^{n_1} \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\}$$

ou seja,

$$\pi(\beta_{1k} | \beta_1^{(k)}, \sigma_1, \alpha_1, \mu_1, \theta_{1l}, z, D_1) \propto N(c_{1k} + d_{1k}^2 V_k) \Psi_4(\alpha_1, \beta_{1k}), \quad (6.23)$$

onde,

$$\Psi_4(\alpha_1, \beta_{1k}) = \exp \left\{ -\sum_{i=1}^{n_1} \ln(1 + \exp\{\alpha_{1i} + \beta_{1k}\}) \right\}; V_k = \sum_{i=1}^{n_1} x_{ki}; k = 1, \dots, q \text{ e}$$

$$\beta_1^{(k)} = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1(k-1)}, \beta_{1(k+1)}, \dots, \beta_{1q}).$$

Para μ_{1l}

$$(\mu_{1l} | \sigma_1, \alpha_1, \beta_1, \theta_{1l}, z, D_1) \sim N \left(\frac{d_{1l} \sigma_{1l}^2 + e_{1l}^2 \sum_{i=1}^{n_1} z_{il} \alpha_{1i}}{\sigma_{1l}^2 + e_{1l}^2 \sum_{i=1}^{n_1} z_{il}}, \frac{e_{1l}^2 \sigma_{1l}^2}{\sigma_{1l}^2 + e_{1l}^2 \sum_{i=1}^{n_1} z_{il}} \right) \quad (6.24)$$

$l = 1, 2$.

Da mesma forma procedemos para a população 2.

Novamente utilizamos Gibbs-Metropolis para gerarmos as amostras dos parâmetros.

O algoritmo é dado por:

- i- Atualizar em cada iteração o vetor $z = (z_1, \dots, z_{n_j})$, a partir da distribuição binomial $b(1, h_{1j})$.
- ii- Usar o algoritmo Gibbs-Metropolis para gerar amostras de α_1, β_1, μ_1 e σ_1 a partir das distribuições condicionais a posteriori.

ii- repetir os passos i e ii de acordo com o número de iterações.

Geração S amostras, utilizando o estimador de Monte Carlo, teremos para cada população,

$$\hat{\alpha}_{11}, \dots, \hat{\alpha}_{1n_1}, \hat{\sigma}_1^2, \hat{\beta}_{11}, \dots, \hat{\beta}_{1q}, \text{ para a população 1}$$

e

$$\hat{\alpha}_{21}, \dots, \hat{\alpha}_{2n_2}, \hat{\sigma}_2^2, \hat{\beta}_{21}, \dots, \hat{\beta}_{2q}, \text{ para a população 2}$$

Novamente, calculamos

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} \hat{\alpha}_{1i}$$

$$\hat{\alpha}_2 = \frac{1}{n_2} \sum_{i=1}^{n_2} \hat{\alpha}_{2i}$$

Portanto,

$$\hat{\alpha}_1, \hat{\sigma}_1^2, \hat{\beta}_{11}, \dots, \hat{\beta}_{1q}, \text{ para a população 1.}$$

$$\hat{\alpha}_2, \hat{\sigma}_2^2, \hat{\beta}_{21}, \dots, \hat{\beta}_{2q}, \text{ para a população 2.}$$

Logo,

$$\hat{p}_{1k} = \frac{e^{\hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}_{1k}}}{1 + e^{\hat{\alpha}_1 + \hat{\beta}_{1k}}}$$

e

$$\hat{p}_{2k} = \frac{e^{\hat{\alpha}_2 + \hat{\beta}_{2k}}}{1 + e^{\hat{\alpha}_2 + \hat{\beta}_{2k}}}$$

Assim,

$$\hat{f}_1(x) = \prod_{k=1}^q \hat{p}_{1k}^{x_k} (1 - \hat{p}_{1k})^{1-x_k}$$

$$\hat{f}_2(x) = \prod_{k=1}^q \hat{p}_{2k}^{x_k} (1 - \hat{p}_{2k})^{1-x_k}$$

Da mesma forma anterior, a alocação de uma nova observação $x = (x_1, \dots, x_q)$ fica:

i- Alocar x à população 1 se,

$$\frac{\hat{f}_1(x)}{\hat{f}_2(x)} > 1$$

ii- Alocar x à população 2, caso contrário.

6.4 Exemplo Ilustrativo

Vamos considerar novamente o problema proposto no capítulo 5.

Para o primeiro modelo, efeito aleatório visto como uma distribuição normal, o procedimento é descrito abaixo.

Para o exemplo, temos dois conjuntos de dados para as respectivas populações. Para a população 1, indivíduos que sobrevivem, temos $n_1 = 160$ observações, ou seja, vamos ter $\alpha_{1,1}, \dots, \alpha_{1,160}, \beta_{1,1}, \dots, \beta_{1,17}$ e σ_{11}^2 , teremos ao todo 178 parâmetros. Para a população 2, indivíduos que não sobrevivem, temos $n_2 = 40$ observações, ou seja, vamos ter $\alpha_{2,1}, \dots, \alpha_{2,40}, \beta_{2,1}, \dots, \beta_{2,17}$ e σ_{21}^2 , portanto teremos 58 parâmetros.

Os procedimentos de simulação são idênticos ao descrito no capítulo 4; aqui também utilizamos o Software Ox.

Os parâmetros a priori para as duas populações são dados na Tabela 6.1 abaixo,

Table 6.1 - Parâmetros a Priori

		hiperparâmetro 1	hiperparâmetro 2
Pop1	σ_1^2	150	1.92
	β_{11}	0.15	0.052
	β_{12}	-0.51	0.017
	β_{13}	1.83	0.14
	β_{14}	0.32	0.009
	β_{15}	-2.2	0.077
	β_{16}	-2.6	0.091
	β_{17}	-0.51	0.017
	β_{18}	-3.24	0.13
	β_{19}	-0.84	0.029
	β_{110}	-0.75	0.026
	β_{111}	-1.78	0.062
	β_{112}	0.76	0.026
	β_{113}	-2.82	0.13
	β_{114}	-2.60	0.12
	β_{115}	-2.82	.13
	β_{116}	-2.19	0.11
	β_{117}	-2.7	0.13

Table 6.1 - Continuação

		hiperparâmetro 1 - hiperparâmetro 2	
	σ_{12}^2	150	1.92
Pop2	β_{21}	0.96	0.04
	β_{22}	-0.40	0.02
	β_{23}	2.51	0.01
	β_{24}	-0.62	0.03
	β_{25}	-2.2	0.13
	β_{26}	-1.38	0.08
	β_{27}	0.40	0.02
	β_{28}	-1.55	0.09
	β_{29}	-1.94	0.11
	β_{210}	-0.62	0.04
	β_{211}	-1.55	0.09
	β_{212}	2.94	0.14
	β_{213}	-2.2	0.13
	β_{214}	-1.94	0.11
	β_{215}	-2.19	0.13
	β_{216}	-2.19	0.13
	β_{217}	-1.94	0.11

Dada a grande quantidade de parâmetros por parte dos efeitos aleatórios e verificando que a estimativa de tais de uma forma geral foram nulos, iremos ilustrar alguns resultados dados que os restantes seguem aproximadamente os mesmos valores.

Table 6.2 - Resumos das Estimativas

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW	Accitação
Pop1	α_{11}	-0.010	0.11	(-0.24;0.21)	0.035	69%
	α_{12}	-0.02	0.11	(-0.23;0.18)	0.01	70%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{180}	0.005	0.10	(-0.22;0.22)	0.008	70%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{160}	-0.024	0.10	(-0.22;0.17)	0.02	70%
Pop2	α_{21}	0.046	0.10	(-0.14;0.24)	0.02	65%
	α_{22}	0.01	0.11	(-0.19;0.25)	0.06	64%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{220}	0.02	0.10	(-0.17;0.23)	0.04	65%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{240}	-0.027	0.11	(-0.26;0.18)	0.03	64%

E as estimativas,

$$\hat{\alpha}_1 = -0.00018$$

$$\hat{\alpha}_2 = 0.0016$$

Na Tabela 6.3 abaixo, temos a continuação dos resultados para os parâmetros de ambas populações,

Table 6.3 - Resumos das Estimativas

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW	Aceitação
Pop1	β_{11}	0.15	0.052	(0.05;0.25)	0.025	74%
	β_{12}	-0.50	0.12	(-0.72;-0.23)	0.0106	44%
	β_{13}	1.84	0.21	(1.45;2.26)	0.012	38%
	β_{14}	0.32	0.09	(0.14;0.50)	0.0568	45%
	β_{15}	-2.22	0.26	(-2.83;-1.71)	0.049	37%
	β_{16}	-2.64	0.27	(-3.21;-2.21)	0.0415	45%
	β_{17}	-0.51	0.11	(-0.76;-0.29)	0.0312	45%
	β_{18}	-3.3	0.4	(-4.11;-2.60)	0.0512	61%
	β_{19}	-0.85	0.15	(-1.14;-0.55)	0.0239	30%
	β_{110}	-0.759	0.14	(-1.05;-0.48)	0.029	33%
	β_{111}	-1.80	0.21	(-2.2;-1.45)	0.0116	30%
	β_{112}	0.75	0.14	(0.495;1.035)	0.0226	77%
	β_{113}	-2.85	0.312	(-3.45;-2.25)	0.0558	52%
	β_{114}	-2.67	0.29	(-3.29;-2.14)	0.0419	46%
	β_{115}	-2.86	0.33	(-3.55;-2.26)	0.0346	41%
	β_{116}	-2.22	0.23	(-2.74;-1.78)	0.0736	35%
	β_{117}	-2.74	0.30	(-3.4;-2.21)	0.0428	39%
	σ_1^2	0.012	0.0011	(0.0108;0.015)	0.00128	-
Pop2	β_{21}	0.98	0.23	(0.48;1.39)	0.016	31%
	β_{22}	-0.41	0.13	(-0.64;-0.13)	0.023	82%
	β_{23}	2.64	0.56	(1.54;3.67)	0.018	66%
	β_{24}	-0.63	0.184	(-1.00;-0.27)	0.0126	71%
	β_{25}	-2.25	0.45	(-3.24;-1.43)	0.0319	66%
	β_{26}	-1.41	0.33	(-2.08;-0.79)	0.0416	63%
	β_{27}	0.40	0.13	(0.15;0.68)	0.0236	68%
	β_{28}	-1.57	0.31	(-2.14;-0.93)	0.0424	64%
	β_{29}	-1.99	0.41	(-2.76;-1.2)	0.0589	67%
	β_{210}	-0.62	0.17	(-0.97;-0.24)	0.0101	71%
	β_{211}	-1.60	0.32	(-2.27;-0.958)	0.0421	69%
	β_{212}	3.04	0.64	(1.80;4.39)	0.0436	66%
	β_{213}	-2.223	0.438	(-3.094;-1.4)	0.0688	66%
	β_{214}	-1.96	0.36	(-2.66;-1.28)	0.0488	66%
	β_{215}	-2.25	0.39	(-2.99;-1.50)	0.0719	66%
	β_{216}	-2.26	0.42	(-3.12;-1.50)	0.043	66%
	β_{217}	-1.97	0.40	(-2.80;-1.32)	0.0436	66%
	σ_2^2	0.012	0.0011	(0.0108;0.015)	0.00128	-

Abaixo temos gráficos de convergência e densidades marginais a posteriori para alguns parâmetros das duas populações.

Figura 6.1: Convergência dos parâmetros (Pop1).

Figura 6.2: Densidades Marginais a Posteriori (Pop1).

Figura 6.3: Convergência dos parâmetros (Pop2).

Figura 6.4: Densidades Marginais a Posteriori (Pop2).

Para as duas populações temos bons resultados para o critério de convergência; percebe-se também um índice muito elevado na taxa de aceitação. O fato é que para um alto número de parâmetros, fica muito difícil uma análise caso a caso, portanto as alterações nos hiperparâmetros são feitas de forma coletiva, o que pode levar a casos extremos de aceitação ou rejeição no algoritmo.

A Tabela de classificação é dada abaixo,

Tabela 6.4:Tabela de Classificação

Pela Regra Discriminante						
		Pop1	taxa	Pop2	taxa	valor real
Membro	Pop1	109	68.10	51	31.80	160
Verdadeiro	Pop2	11	27.50	29	72.50	40

Assim a taxa de erro aparente $APER$ é igual a:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{51 + 11}{160 + 40} = 0.31$$

Os resultados da classificação foram iguais ao procedimento anterior, onde consideramos independência entre as medidas para um mesmo indivíduo. Isto se deve em função dos efeitos aleatórios nulos estimados pelo modelo.

Para o segundo caso, considerando o efeito aleatório como uma mistura de 2 distribuições normais, vamos ter para a população 1 $\alpha_{1,1}, \dots, \alpha_{1,160}, \beta_{1,1}, \dots, \beta_{1,17}, \mu_{11}, \mu_{12}, \sigma_{11}^2, \sigma_{12}^2$ e ϕ_{11} , ou seja, teremos ao todo 182 parâmetros. Para a população 2, vamos ter $\alpha_{2,1}, \dots, \alpha_{2,40}, \beta_{2,1}, \dots, \beta_{2,17}, \mu_{21}, \mu_{22}, \sigma_{21}^2, \sigma_{22}^2$ e ϕ_{21} , portanto teremos 62 parâmetros.

Novamente, usamos os procedimentos de simulação descrito no capítulo 4, com a utilização do Software "Ox".

Os parâmetros a priori para as duas populações são dados na Tabela 6.5 abaixo,

Table 6.5 - Parâmetros a Priori

		hiperparâmetro 1	hiperparâmetro 2
Pop1	μ_{11}	0.003	0.002
	μ_{12}	0.001	0.001
	σ_{11}^2	149	1.91
	σ_{12}^2	150	1.92
	ϕ_{11}	15	15
	β_{11}	0.15	0.052
	β_{12}	-0.51	-0.17
	β_{13}	1.83	0.64
	β_{14}	0.32	0.114
	β_{15}	-2.2	-0.77
	β_{16}	-2.6	-0.91
	β_{17}	-0.51	-0.17
	β_{18}	-3.24	-1.13
	β_{19}	-0.84	-0.29
	β_{110}	-0.75	-0.26
	β_{111}	-1.78	-0.62
	β_{112}	0.76	0.26
	β_{113}	-2.82	-0.98

Table 6.5 - Continuação

		hiperparâmetro 1	hiperparâmetro 2
Pop1	β_{114}	-2.60	-0.91
	β_{115}	-2.82	-.98
	β_{116}	-2.19	-0.76
	β_{117}	-2.7	-0.94
Pop2	μ_{21}	0.002	0.005
	μ_{22}	0.001	0.002
	σ_{21}^2	149	1.91
	σ_{22}^2	150	1.92
	ϕ_{21}	15	15
	β_{21}	0.96	0.33
	β_{22}	-0.40	-0.14
	β_{23}	2.51	0.87
	β_{24}	-0.62	-0.21
	β_{25}	-2.2	-0.76
	β_{26}	-1.38	-0.48
	β_{27}	0.40	0.14
	β_{28}	-1.55	-0.54
	β_{29}	-1.94	-0.68
	β_{210}	-0.62	-0.21
	β_{211}	-1.55	-0.54
	β_{212}	2.94	1.03
	β_{213}	-2.2	-0.77
	β_{214}	-1.94	-0.68
	β_{215}	-2.19	-0.76
	β_{216}	-2.19	-0.76
	β_{217}	-1.94	-0.68

Novamente, dada a grande quantidade de parâmetros, por parte dos efeitos aleatórios, e verificando que a estimativa de tais, de uma forma geral foram nulos, iremos ilustrar alguns resultados.

Table 6.6 - Resumos das Estimativas

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW	Aceitação
Pop1	α_{11}	-0.014	0.105	(-0.21;0.18)	0.025	92%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{180}	0.017	0.11	(-0.17;0.23)	0.01	79%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
Pop2	α_{1160}	-0.019	0.108	(-0.229;0.183)	0.008	75%
	α_{21}	0.069	0.11	(-0.14;0.28)	0.02	72%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{220}	0.005	0.119	(-0.213;0.228)	0.06	85%
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	α_{240}	-0.038	0.118	(-0.277;0.197)	0.04	83%

E as estimativas, $\hat{\alpha}_1 = 0.00106$ e $\hat{\alpha}_2 = 0.00338$

Table 6.7 - Continuação do Resumo das Estimativas

	Parâmetro	Média	S.D.	95% Intervalo de Confiança	GW	Aceitação
Pop1	μ_{11}	0.001	0.0212	(-0.037;0.040)	0.025	-
	μ_{12}	0.001	0.022	(-0.040;0.043)	0.015	-
	σ_{11}^2	0.013	0.0012	(0.011;0.015)	0.00128	-
	σ_{12}^2	0.012	0.0011	(0.011;0.0149)	0.00218	-
	θ_{11}	0.489	0.0879	(0.328;0.6645)	0.0235	-
	β_{11}	0.15	0.0055	(0.13;0.16)	0.025	74%
	β_{12}	-0.51	0.012	(-0.54;-0.47)	0.0106	45%
	β_{13}	1.83	0.008	(1.82;1.85)	0.0012	36%
	β_{14}	0.327	0.01	(0.30;0.34)	0.0568	45%
	β_{15}	-2.19	0.07	(-2.32;-2.04)	0.049	37%
	β_{16}	-2.60	0.08	(-2.78;-2.44)	0.0415	46%
	β_{17}	-0.50	0.017	(-0.547;-0.477)	0.0312	44%
	β_{18}	-3.23	0.11	(-3.47;-2.99)	0.0112	61%
	β_{19}	-0.85	0.03	(-0.92;-0.79)	0.00639	33%
	β_{110}	-0.76	0.025	(-0.82;-0.71)	0.009	33%
	β_{111}	-1.78	0.066	(-1.94;-1.66)	0.0016	30%
	β_{112}	0.75	0.03	(0.725;0.780)	0.0226	76%
Pop2	β_{113}	-2.85	0.087	(-2.98;-2.65)	0.0158	53%
	β_{114}	-2.61	0.09	(-2.80;-2.44)	0.0219	47%
	β_{115}	-2.81	0.093	(-2.994;-2.632)	0.0146	50%
	β_{116}	-2.19	0.073	(-2.33;-2.05)	0.0836	37%
	β_{117}	-2.70	0.10	(-2.92;-2.49)	0.0828	48%
	μ_{21}	0.00165	0.020	(-0.0338;0.041)	0.0185	-
	μ_{22}	0.005	0.029	(-0.049;0.061)	0.025	-
	σ_{21}^2	0.013	0.0013	(0.01;0.015)	0.02128	-
	σ_{22}^2	0.0128	0.0012	(0.01;0.015)	0.0828	-
	ϕ_{21}	0.5	0.0844	(0.33;0.67)	0.0928	-
	β_{21}	0.96	0.025	(0.91;1.01)	0.026	54%
	β_{22}	-0.40	0.01	(-0.42;-0.38)	0.053	88%
	β_{23}	2.51	0.01	(2.48;2.53)	0.028	74%
	β_{24}	-0.61	0.037	(-0.68;-0.53)	0.0426	70%
	β_{25}	-2.20	0.12	(-2.42;-1.95)	0.0719	63%
	β_{26}	-1.38	0.085	(-1.55;-1.20)	0.0816	66%
	β_{27}	0.40	0.027	(0.34;0.45)	0.0636	62%
	β_{28}	-1.55	0.093	(-1.72;-1.37)	0.0724	70%
	β_{29}	-1.93	0.11	(-2.15;-1.74)	0.0289	63%
	β_{210}	-0.61	0.03	(-0.68;-0.55)	0.0101	69%
	β_{211}	-1.55	0.092	(-1.73;-1.36)	0.0121	69%
	β_{212}	2.94	0.013	(2.92;2.97)	0.0236	69%
	β_{213}	-2.20	0.12	(-2.44;-1.94)	0.0288	67%
	β_{214}	-1.93	0.111	(-2.135;-1.70)	0.0268	71%
	β_{215}	-2.20	0.13	(-2.45;-1.94)	0.0319	66%
	β_{216}	-2.20	0.13	(-2.46;-1.95)	0.0243	67%
	β_{217}	-1.97	0.11	(-2.17;-1.72)	0.0136	66%

Abaixo temos gráficos de convergência e densidades marginais a posteriori para alguns parâmetros das duas populações.

Figura 6.5: Convergência dos parâmetros (Pop1).

Figura 6.6: Densidades Marginais a Posteriori (Pop1).

Figura 6.7: Convergência dos parâmetros (Pop2).

Figura 6.8: Densidades Marginais a Posteriori (Pop2).

Para as duas populações temos bons resultados para o critério de convergência, percebe-se também um índice muito elevado na taxa de aceitação. O fato é que para um alto

número de parâmetros, fica muito difícil uma análise caso a caso, portanto as alterações nos hiperparâmetros são feitas de forma coletiva, o que pode levar a casos extremos de aceitação ou rejeição no algoritmo.

A tabela de classificação é dada abaixo,

Tabela 6.7:Tabela de Classificação

		Pela Regra Discriminante				
		Pop1	taxa	Pop2	taxa	valor real
Membro	Pop1	109	68.10	51	31.80	160
Verdadeiro	Pop2	11	27.50	29	72.50	40

Assim a taxa de erro aparente (*APER*) é igual a:

$$APER = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} = \frac{51 + 11}{160 + 40} = 0.31$$

Os resultados da classificação foram semelhantes ao procedimento anterior, onde consideramos independência entre as medidas para um mesmo indivíduo.

O modelo aqui proposto também não conseguiu detectar a correlação, ou seja, os efeitos aleatórios estimados foram nulos.

Capítulo 7

Conclusões Finais e Propostas Futuras

Nesta dissertação consideramos muitos tópicos isolados que devem ser discutidos individualmente.

Considerando o problema de classificação com dados transformados, ficou evidente a grande importância dos métodos de transformação no uso de procedimentos de classificação. Esse trabalho também nos forneceu uma experimentação prática onde conseguimos enxergar melhor o comportamento dos métodos tradicionais de classificação (F.D.L. e F.D.Q.) diante de dados sem transformação e transformados. O procedimento Bayesiano (TBox1) se mostrou viável dentro de aspectos teóricos e computacionais. Tivemos algumas dificuldades com o procedimento (TBox2), que podem ser abordadas em trabalhos futuros onde podemos tentar outras parametrizações para tal transformação.

O uso de misturas de distribuições normais para o problema de classificação se mostrou uma excelente opção, quando os dados apresentam características multimodais. Os problemas computacionais referentes a implementação e o tempo de processamento do algoritmo Gibbs Sampling foram completamente viabilizados com a utilização do Software "Ox". No entanto faltou tempo disponível para experimentação com dados reais. Futuramente podemos trabalhar com mistura de distribuições mais gerais como por exemplo a Distribuição t - de - Student Multivariada.

Considerando a classificação com dados binários independentes, verificamos um desempenho equivalente entre o método de classificação geral e a proposta bayesiana apre-

sentada. A incorporação da informação a priori é de grande importância dentro dessa metodologia, pois temos que conhecer bem as populações previamente para podemos classificar com eficiência novas observações. No exemplo apresentado, nos baseamos exclusivamente na amostra preliminar, talvez seja esse o motivo da equivalência de resultados. Acreditamos que com boas informações a priori adquiridas com o pesquisador possamos melhorar a taxa de classificação.

Quando tentamos incorporar o efeito aleatório em cada indivíduo, objetivando capturar a correlação entre as variáveis binárias do conjunto de dados proposto, não conseguimos melhorar os resultados da classificação. Uma das hipóteses é que este conjunto de dados não possui tais características, ou seja as variáveis para um mesmo indivíduo não são correlacionadas. Também entendemos que pode se tratar de um modelo não muito apropriado para esta finalidade. Considerando o efeito aleatório como uma mistura de normais, também não conseguimos melhorar os resultados. Uma proposta futura neste caso, seria utilizar o modelo de regressão logística para a classificação e incorporar o fator correlação entre as covariáveis, tomando como base o modelo proposto por Prentice(1988).

Apêndice A

ALGORITMO GIBBS SAMPLING

O algoritmo Gibbs sampling foi introduzido formalmente por Geman e Geman (1984), quando propuseram um esquema de amostragem de distribuições explorando as distribuições condicionais completas através de um algoritmo iterativo que define uma cadeia de Markov.

O algoritmo Gibbs sampling é essencialmente um esquema iterativo de amostragem de uma cadeia de Markov cujo núcleo de transição é formado pelas distribuições condicionais completas:

Descrição do método:

Suponha que a distribuição de interesse é $\pi(\theta)$ onde $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$. Considere ainda que as densidades condicionais completas a posteriori $\pi_i(\theta_i|\theta_{-i})$, $i = 1, \dots, p$ estão disponíveis sob forma padronizada. Podemos então gerar as amostras como segue:

(i) inicializemos o contador de iterações da cadeia $j = 1$ e arbitremos valores iniciais $\theta^{(0)} = \theta_1^{(0)}, \theta_2^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)}$.

(ii) obtemos um novo valor $\theta^{(j)} = \theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_p^{(j)}$ a partir de $\theta^{(j-1)}$ através de sucessivas gerações de valores

$$\begin{aligned}\theta_1^{(j)} &\sim \pi(\theta_1|\theta_2^{(j-1)}, \dots, \theta_p^{(j-1)}) \\ \theta_2^{(j)} &\sim \pi(\theta_2|\theta_1^{(j)}, \theta_3^{(j-1)}, \dots, \theta_p^{(j-1)}) \\ &\vdots \\ \theta_p^{(j)} &\sim \pi(\theta_p|\theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_{p-1}^{(j)})\end{aligned}$$

(iii) mudamos o contador j para $j + 1$ e retornamos a (ii) até a convergência.

Geman e Geman (1984) mostram que os valores gerados para θ_i , $i = 1, \dots, p$, convergem em distribuição para uma variável aleatória da distribuição $\pi(\theta)$ com $j \rightarrow \infty$.

Apêndice B

ALGORITMO

METROPOLIS-HASTINGS

Este algoritmo é usado quando as densidades condicionais não são dadas sob forma padronizada conhecida, como de uma Normal, Gama ou outras.

Para descrevermos este método consideremos uma distribuição π , com densidades condicionais não padronizadas, da qual desejamos gerar uma amostra através de uma cadeia de Markov. Nesse caso, devemos construir um núcleo de transição $p(\theta, \phi)$ de forma que π seja a distribuição de equilíbrio da cadeia.

Uma forma simples de fazermos isso é através de cadeias onde o núcleo p satisfaça a condição de reversibilidade $\pi(\theta)p(\theta, \phi) = \pi(\phi)p(\phi, \theta)$, $\forall(\theta, \phi)$, sendo a condição suficiente para que π seja a distribuição de equilíbrio da cadeia.

O núcleo $p(\theta, \phi)$ é constituído de dois elementos um núcleo de transição $q(\theta, \phi)$ e uma probabilidade $a(\theta, \phi)$ de forma que:

$$p(\theta, \phi) = q(\theta, \phi)a(\theta, \phi), \quad \text{se } \phi \neq \theta.$$

Portanto, o núcleo de transição define uma densidade $p(\theta, \cdot)$ para todos os valores diferentes de θ . Consequentemente, resta uma probabilidade positiva da cadeia ficar em θ dada por,

$$p(\theta, \theta) = 1 - \int q(\theta, \phi)a(\theta, \phi)d\phi.$$

Essas duas formas podem ser agrupadas na expressão geral:

$$p(\theta, A) = \int_A q(\theta, \phi)a(\theta, \phi)d\phi + I(\theta \in A) \left[1 - \int q(\theta, \phi)a(\theta, \phi)d\phi \right]. \quad (\text{B.1})$$

Logo, o núcleo de transição define uma distribuição mista para o novo estado ϕ da cadeia. Para $\phi \neq 0$, essa distribuição tem densidade e para $\phi = 0$, essa distribuição atribui uma probabilidade positiva.

A expressão mais comumente citada para a probabilidade de aceitação é

$$a(\theta, \phi) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(\phi)q(\phi, \theta)}{\pi(\theta)q(\theta, \phi)} \right\}. \quad (\text{B.2})$$

Assim, a simulação de uma amostra π usando a cadeia de Markov definida pela transição (B.1) pode ser esquematizada da seguinte forma:

- (i) inicializamos o contador de iterações da cadeia $j = 1$ e arbitremos o valor inicial $\theta^{(0)}$;
- (ii) movemos a cadeia para um novo valor ϕ gerado da densidade $q(\theta^{(j-1)}, \cdot)$;
- (iii) calculamos a probabilidade de aceitação do movimento $a(\theta^{(j-1)}, \phi)$ dada por (B.2).
Se o movimento for aceito $\theta^{(j)} = \phi$. Se não for aceito, $\theta^{(j)} = \theta^{(j-1)}$ e a cadeia não se move;
- (iv) mudamos o contador de j para $j + 1$ e retornamos a (ii) até a convergência.

Realizamos a etapa (iii) após a geração de uma quantidade uniforme u independentes de todas as outras variáveis. Se $u \leq a$, o movimento é aceito e se $u > a$ o movimento não é permitido. O núcleo de transição q define uma proposta de movimento que pode ou não ser confirmado por a . O sucesso do método depende de taxas de aceitação não muito baixas e de propostas fáceis de simular. O método substitui uma geração difícil de π por várias gerações propostas de q .

Apêndice C

O CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA DE GELMAN E RUBIN (1992)

Esta é uma forma simples de monitorar a convergência dos valores gerados para uma distribuição de equilíbrio.

O critério de convergência de Gelman e Rubin (1992) é baseado em técnicas de análise de variância. Para o algoritmo devemos considerar pelo menos duas cadeias paralelas com valores iniciais, diferentes, amostrados de uma distribuição bem comportada. Após as cadeias atingirem estacionariedade digamos na t -ésima iteração, consideramos as realizações $(\theta_j, \theta_{j+h}, \dots, \theta_{j+nh})$, $j \geq t$ como uma amostra aleatória da distribuição desejada. Devemos assumir h razoavelmente grande de tal forma que 2 valores sucessivos de θ sejam independentes.

Se cada sequência tem tamanho $2n$, descartamos as primeiras n iterações e consideramos as n restantes. Para cada parâmetro de interesse, calculamos:

- a variância entre as cadeias:

$$E = \frac{n}{m-1} \sum_{i=1}^m (\bar{\theta}_i - \bar{\theta})^2;$$

- a variância dentro das cadeias:

$$D = \frac{1}{m(n-1)} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (\theta_i^{(j)} - \bar{\theta}_i)^2$$

onde: $\bar{\theta}_i$ é a média das observações da i -ésima cadeia; e

$\bar{\theta}$ é a média dos $\bar{\theta}_i$ com $i = 1, 2, \dots, m$.

Então, a variância da distribuição desejada pode ser estimada por $\hat{\sigma}^2 = \frac{n-1}{n}D + \frac{1}{n}E$ e a média por $\hat{\mu} = \bar{\theta}$. Podemos melhorar na estimativa mais precisa da distribuição desejada, admitindo para a variabilidade amostral das estimativas, μ e $\hat{\sigma}^2$. O resultado é uma distribuição t de Student aproximada para θ com centro $\hat{\mu}$, escala $\sqrt{\hat{V}} = \sqrt{\hat{\sigma}^2 + E/mn}$ e graus de liberdade $df = 2\hat{V}^2 / \text{var}(\hat{V})$, onde

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{V}) = & \left(\frac{n-1}{n} \right)^2 \frac{1}{m} \text{var}(s_i^2) + \left(\frac{m+1}{mn} \right)^2 \frac{2}{m-1} E + \\ & + 2 \frac{(m+1)(n-1)}{mn^2} \frac{m}{n} [\text{cov}(s_i^2, \bar{\theta}_i^2) - 2\bar{\theta} \text{cov}(s_i^2, \bar{\theta}_i)], \end{aligned}$$

onde as variâncias e covariâncias estimadas são obtidas dos m valores amostrais de $\bar{\theta}_i$ e s_i^2 ; $df \rightarrow \infty$ quando $n \rightarrow \infty$.

Monitoramos a convergência da simulação iterativa, calculando o fator de redução potencial de escala estimado $\sqrt{\hat{R}} = \sqrt{(\hat{V}/D)df/(df-2)}$. À medida que n cresce ($n \rightarrow \infty$), R converge para 1. $\hat{R}$ é a razão do estimador da variância atual para a variância dentro da cadeia com um fator que avalia a variância adicional da distribuição t de Student'.

Desde que $\hat{R}$ esteja próximo de 1, admitimos que a convergência ocorreu e as amostras das iterações selecionadas são independentes e identicamente distribuídas (ver, Gelman & Rubin, 1992).

Apêndice D

O CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA DE GEWEKE (1992)

Este é critério mais simples de monitorar a convergência para uma distribuição de equilíbrio quando usamos uma única longa cadeia. Uma das grandes vantagens de se adotar uma única cadeia neste tipo de procedimento de simulação é que tal cadeia devido ao seu grande tamanho, fica mais “próxima” da distribuição de equilíbrio, pois médias ergódicas são tanto melhores quanto maior a amostra.

O algoritmo pode ser explicado considerando os seguintes passos:

- Assume-se que a cadeia foi simulada por $m + n$ iterações.
- Seja $\theta^{(j)} = \theta(X^{(j)})$, para $j = 1, \dots, n$; uma função real.
- A trajetória $\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots$; define uma série temporal e médias ergóticas para esta série podem ser calculadas.

As médias ergóticas são determinadas da seguinte forma:

$$\hat{\theta}_b = \frac{1}{n_b} \sum_{j=m+1}^{m+n_b} \theta^{(j)}$$

e

$$\hat{\theta}_a = \frac{1}{n_a} \sum_{j=m+n-n_a+1}^{m+n} \theta^{(j)}$$

onde $n_b + n_a < n$. Uma sugestão é tomar $n_a = 0.5n$ e $n_b = 0.1n$.

À medida que n cresce e as relações $\frac{n_a}{n}$ e $\frac{n_b}{n}$ são mantidas constantes, tem-se que :

$$Z_G = \frac{\hat{\theta}_a - \hat{\theta}_b}{\sqrt{\hat{Var}(\theta_a) + \hat{Var}(\theta_b)}} \rightarrow N(0, 1)$$

Assim, Z_G não deve ser grande (> 2) se a convergência foi alcançada.

Graficamente, tem-se

Apêndice E

UM PROGRAMA COMPUTACIONAL

Abaixo apresentamos um programa computacional em “Ox”, referente ao algoritmo de Mistura de Distribuições Normais Multivariadas com Distribuição a Priori Conjugada, citado no Capítulo 4.

```
#include<oxstd.h>
#include<oxfloat.h>
#include<oxprob.h> #import<maximize>
/*****
dnormmult(const n,const x,const mu,const sigma) { decl
aux,aux0,aux1,aux2,i,t;

aux0 = zeros(n,1);
aux1 = invertsym(sigma);
aux2 = (determinant(sigma))(-0.5);
t = sizec(x);
for(i=0 ;i<n ;i++)
{
aux0[i] = (x[i] -mu)*aux1*(x[i] -mu)';
aux0[i] = ((2*M_PI)(-t/2))*aux2*exp(-0.5*aux0[i]);
```

```

}
return(aux0); }

/*****/
zi(const x,const n,const k,const mu,const sigma,const p)
{
    decl aux,j,sigmae;
    aux = zeros(n,k);
    for (j=0;j<k;j++)
    {
        sigmae = reshape(sigma[][j],k,k);
        aux[][j] = p[j]*dnormmult(n,x,mu[j],sigmae);
    }
    aux = aux./sumr(aux);
    for(j=0;j<n;j++)
    {
        aux[j] = ranmultinomial(1,aux[j]);
    }
    return(aux);
}

/*****/
multnorm(const n, const mu, const sigma)

{
    return(mu+rann(n,rows(sigma))*choleski(sigma));
}

/*****/
/*****/
mwishart(const sigma,const n)
{
    decl p,z,zz,A,W;
    p = sizec(sigma);

```

```

        z = rann(n,p);
        zz = z'*z;
        A = choleski(sigma);
        W = A'*zz*A;
    return(W);
}

/*****/

Invwishart(const S,const n)
{
    decl p,w,IW;
    p = sizec(S);
    w = mwishart(invertsym(S),n-p-1);
    IW = invertsym(w);
    return(IW);
}

/*****/

main()
{
    decl fat1,fat2,fat3,t,n,vf1,k,mu,sigma,p,x,i,Z;aux,j,S,nada,l,a,b,
        u,S1,p0,sig0,mu0,k1,sig1,mu1,W1,me,file1,file2,file3,file4,file5,
        sif,si2,mi1,mi2;

    n      = 100;
    k      = 2;
    mu     = <1,6;10,20>;
    sigma  = <4,6;0.9,0.9;0.9,0.9;2,2>;
    p      = <0.5,0.5>;
    x      = reshape(loadmat("d:\\mistura\\pop1.dat",1),n,2);
    t      = 10000;

```

```

/*****Condições iniciais *****/
a=10;
b=10;
sig1 = <1,2;0.3,0.4;0.3,0.4;1.5,2,5>;
mu1 = <2.5,4.5;4,10>;
k1=<3,3>;
v11=<7,7>;

/*****/

file1 = fopen("d:\\mistura\\conju\\si1.dat","wa");
file2 = fopen("d:\\mistura\\conju\\si2.dat","wa");
file3 = fopen("d:\\mistura\\conju\\m1.dat","wa");
file4 = fopen("d:\\mistura\\conju\\m2.dat","wa");
file5 = fopen("d:\\mistura\\conju\\p1.dat","wa");

p0 = zeros(1,k);
mu0 = zeros(k,k);
sig0 = zeros(2*k,k);

for (i=0;i<t;i++)
{
    Z      = zi(x,n,k,mu,sigma,p);
    aux    = sumc(Z);
    p[0]   = ranbeta(1,1,(aux[0]+a),(aux[1]+b));
    p[1]   = 1-p[0];

    for(j=0;j<k;j++)

        {

```

```

fat1 = aux[j]/(aux[j]+k1[j]);
fat2 = k1[j]/(aux[j]+k1[j]);
fat3 = (k1[j]*aux[j])/(aux[j]+k1[j]);
me = sumc(Z[j].*x)/aux[j];

mu[j] = fat1 * me + fat2 * mu1[j];
mu[j] = multnorm(1,mu[j],reshape( sigma[j],k,k)
/(aux[j]+k1[j]) );
S = zeros(k,k);
for(l=0;l<n;l++)
{
    nada = (x[l]-mu[j]);
    S = S+Z[l].*(nada'*nada);
}
W1 = reshape(sig1[j],k,k)+ S + fat3 *(( me-mu1[j])*(
me-mu1[j]));

sigma[j] = reshape(Invwishart( W1,aux[j]+v1[j]),2*k,1);
}

si1 = reshape(sigma[0],1,2*k);
si2 = reshape(sigma[1],1,2*k);
mi1 = reshape(mu[0],1,k);
mi2 = reshape(mu[1],1,k);

p0 = p0+p;
mu0 = mu0+mu;
sig0 = sig0+sigma;

fprintf(file1,si1);
fprintf(file2,si2);
fprintf(file3,mi1);
fprintf(file4,mi2);

```

```
fprint(file5,p);
```


Referências Bibliográficas

- [1] Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Methods*. John Wiley, New York, 1984.
- [2] Box, G. E. P.; Cox, D. R. An analysis of transformations. *J. R. Statist. Soc., B*, n.2, v.26, pp. 211-252, 1964.
- [3] Box, G. E. P.; Tiao, G. T. *Bayesian Inference in Statistical Analysis*. Wiley Classics, New York, 1973.
- [4] Cacoullos, T. *Discriminate Analysis and Applications*. Academic Press, New York, 1973.
- [5] Doonik, J. A. *Object-Oriented Matrix Programming Using Ox*, 3rd ed. London: Timberlake Consultants Press and Oxford, 1999.
- [6] Fisher, R. A. The Use of Multiple Measurements in Taxonomic *Annals of Eugenics*, 7, p. 179-188, 1936.
- [7] Gelfand, A.; Smith, A. Sampling based approaches to calculating marginal densities. *Journal of the American Statistical Association*, n.410, v.85, pp. 398-409, 1990.
- [8] Gelman, A.; Rubin, D. B. Inference from iterative Simulation Using Multiple Sequences. *Statistical Science*, n.4, pp. 457-511, 1992.
- [9] Gelman, R.; Carlin, J. B.; Stern, H. S. & Rubin, D. B. *Bayesian Data Analysis*. Chapman and Hall. Gelman, 1995.
- [10] Geweke, J. Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculation of posterior moments. In: *Bayesian Statistics 4*, J. M. Bernardo, A. F. M. Smith, A.

- P. Dawid, and J. O. Berger (eds.)*, pp. 169-193. New York: Oxford University Press, 1992.
- [11] Goldstein, M.; Dillon, W. R. *Discriminant Analysis*. Wiley, New York, 1978.
 - [12] Hosmer, D. W.; Lemeshow, 1989 *Applied Logistic Regression*. Wiley, New York Wiley 1989.
 - [13] Huberty, C. J. Discriminant analysis. *Rev. Educ. Res.*, v.45, pp. 543-593, 1975.
 - [14] Johnson, R. A.; Wichern, D. W. *Applied Multivariate Statistical Analysis*. Prentice Hall, New Jersey, 1982.
 - [15] Krzanowski, W. J. Discrimination and classification using both binary and continuous variables. *Journal of the American Statistical Association*, n.352, v.70, pp. 782-790, 1975.
 - [16] Lachenbruch, P. A. *Discriminant Analysis*. Hafner, New York, 1975a.
 - [17] Lachenbruch, P. A.; Goldstein, M. Discriminant Analysis. *Biometrics*, v.35, pp.69-85, 1979.
 - [18] Lachenbruch, P. A.; Mickey, M. R. Estimation of Error Rates in Discriminant Analysis. *Technometrics*, n.1, v.10, pp.1-11, 1968.
 - [19] Lavine, M.; West, M. A Bayesian method for classification and discrimination. *The Canadian Journal of Statistics*, n.4, v.20, pp.451-461, 1992.
 - [20] Lee, E. T. *Statistical Methods for Survival Data Analysis*. Awiley-Interscience, New York, 1992.
 - [21] McLachlan, G. J.; Krishnan, T. *The EM Algorithm and Extensions*. Wiley, New York, 1997.
 - [22] Press, S. J. *Applied Multivariate Analysis*. Holt, Rinehart, and Winston, New York, 1972a.
 - [23] Prentice, R. L. Correlated Binary Regression with Covariate Specific to Each Binary Observation *Biometrics*, n.44, p1033-1048, 1988.

- [24] Robert, C. P. *Mixture of Distributions: Inference and Estimation, in Markov Chain Monte Carlo in Practice.*, Chapman and Hall, London, 1996. pp.441-464.
- [25] Seber, G. A. F. *Multivariate Observations.* Wiley, New York, 1983.
- [26] Smith, A. F. M.; Robert, G. O. Bayesian Computation via Gibbs Sampler and Related MCMC Methods. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, n.55, pp.3-24, 1993.
- [27] Tanner, M.; Wong, W The calculations of Posterior Distributions by Data Augmentation. *Journal of the American Statistical Association*, 82, p.528-550, 1987.
- [28] Titterton, D.M.; Smith, A.F.M.; Makov, U.V *Statistical Analysis of Finite Mixture Distributions.* New York: John Wiley, 1985.