SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito: 15.03.2001

Assinatura: _____

Variabilidade Extra-Binomial: Uso de Métodos Bayesianos

Juliano José Guimarães Junqueira

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
Março/2001

A Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Jorge Alberto Achcar

Prof. Dr. Heleno Bolfarine

Prof. Dr. Francisco Louzada Neto

Agradecimentos

Acima de tudo, agradeço a Deus por me conceder a vida até o presente momento.

Aos meus pais, José e Tânia, aos meus irmãos, Marcelo e Anamélia, e a todos os meus parentes, por acreditarem em mim e estarem sempre ao meu lado.

Ao Prof. Dr. Jorge Alberto Achcar, por conduzir este trabalho com admirável dedicação e por compartilhar comigo a sua “incontestável” experiência.

Ao Prof. Dr. Francisco Louzada Neto e a Profa. Dra. Maria Creusa Bretas Salles pelas valiosas sugestões dadas em meu exame de qualificação, que vieram a contribuir muito com esta dissertação.

Aos professores desta instituição: Prof. Dr. Marinho Gomes de Andrade Filho, Prof. Dr. Josemar Rodrigues e Prof. Dr. Dorival Leão Pinto Junior pela dedicação e empenho ao ensino.

À todos os meus amigos da USP de São Carlos, que direta ou indiretamente contribuíram para que este trabalho fosse realizado. Em especial agradeço a Cillene, Emerson, Guilherme, Juanita, Josenildo, Josmar, Juan, Leonilce, Lucimary, Manuel, Pio, Rubia, Sandra, Silvio, Ulisses, Valéria, Vanderly, Viviane e William.

À todos os funcionários do ICMC-USP.

À todos os meus colegas da UNESP de Presidente Prudente, pela convivência durante os 4 anos de graduação e pela grande amizade que se formou.

À todos os professores da UNESP de Presidente Prudente, pela dedicação ao ensino e por me incentivarem a fazer um curso de Pós-Graduação.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Enfim, gostaria de agradecer a todos que contribuíram para que este trabalho fosse realizado.

Abstract

The Binomial distribution is often used for counts y of successes in n repetitions of a random experiment where each result is a success or a failure.

However, in many applications, we can have a larger or smaller variability as expected with the Binomial supposition with parameters n and p . This variability is called extra-Binomial variability and it can be obtained from different sources.

Some different models are introduced in the literature to fit the extra-Binomial variability. Among these models, we have the Beta-Binomial model, the correlated Binomial model and the mixture of Binomial distributions. In this dissertation, we analyse these models under the Bayesian approach and use MCMC (Markov Chain Monte Carlo) methods to get the posterior summaries of interest. Other important point in this dissertation: the presence of covariates in the extra-Binomial variability. We illustrate the proposed methodology with some numerical examples. We also introduce some Bayesian discrimination procedures.

Resumo

A distribuição Binomial é frequentemente usada quando estamos interessados em ajustar dados de contagens de y sucessos em n ensaios de um mesmo experimento aleatório, onde cada ensaio admite duas respostas: sucesso ou fracasso.

Contudo, em muitas aplicações, podemos ter uma variabilidade observada dos dados maior ou menor do que a variabilidade esperada a partir de uma suposição Binomial com parâmetros n e p . Essa variabilidade superior ou inferior dos dados observados em relação a variabilidade do modelo Binomial é chamada variabilidade extra-Binomial e ela pode ser provocada por várias fontes.

Alguns modelos tem sido propostos na literatura para ajustar a variabilidade extra-Binomial. Entre eles se destacam os modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e Mistura de duas distribuições Binomiais. Nesta dissertação, analisamos esses modelos sob o enfoque Bayesiano utilizando os métodos de Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC). Em particular utilizamos os algoritmos Gibbs Sampling e Metropolis-Hastings para obter estimadores de Monte Carlo das quantidades a posteriori de interesse dos parâmetros. Outro importante objetivo do trabalho é o estudo da variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis. Apresentamos exemplos com dados reais assumindo os diferentes modelos propostos e uma discriminação dos modelos via Fator de Bayes.

Sumário

Capítulo 1: Introdução	1
1.1 – Alguns modelos para a variabilidade extra-Binomial	3
1.2 – Características dos métodos Bayesianos e alguns objetivos da dissertação.	4
1.3 – Organização da dissertação	6
 Capítulo 2: Análise do modelo Beta-Binomial	 7
2.1 – Características do modelo	7
2.2 – Análise Clássica do modelo	10
2.3 – Análise Bayesiana do modelo	14
 Capítulo 3: Análise do modelo Binomial Correlacionado	 16
3.1 – Características do modelo	16
3.2 – Análise Clássica do modelo	18
3.3 – Análise Bayesiana do modelo	20
 Capítulo 4: Análise do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais	 23
4.1 – Características do modelo	23
4.2 – Análise Clássica do modelo	24
4.3 – Introdução de variáveis latentes	27
4.4 – Análise Bayesiana e algoritmo de simulação	29
 Capítulo 5: Discriminação dos modelos	 32

5.1 – Discriminação Clássica dos modelos: AIC	32
5.2 – Discriminação Bayesiana dos modelos: verossimilhança marginal e fator de Bayes	33
5.2.1 – Estimação da verossimilhança marginal e aplicação nos modelos	35
5.2.1.1 – Aproximação de Monte Carlo	35
5.2.1.2 – Método de Laplace	37
5.2.2 – Aplicação do Fator de Bayes no teste de hipótese envolvendo os modelos Binomial e Beta-Binomial	38
Capítulo 6: Variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis	40
6.1 – Modelo de regressão logística	40
6.2 – Modelos para ajustar a variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis	42
6.3 – Análise estatística dos modelos	43
6.3.1 – Análise Clássica dos modelos	44
6.3.2 – Análise Bayesiana dos modelos	51
Capítulo 7: Aplicações Numéricas	55
7.1 – Primeira aplicação: dados genéticos	55
7.1.1 – Aplicação do modelo Binomial	56
7.1.2 – Aplicação do modelo Beta-Binomial	57
7.1.3 – Aplicação do modelo Binomial Correlacionado	59
7.1.4 – Aplicação do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais	61
7.1.5 – Comparação dos modelos	64
7.2 – Segunda aplicação: dados de um jogador de basquete	66
7.2.1 – Resultados da análise Clássica	67
7.2.2 – Resultados da análise Bayesiana	69
7.3 – Terceira aplicação: um exemplo com covariáveis	72
7.3.1 – Aplicação do modelo de Regressão Logística	74
7.3.2 – Aplicação do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas	76
7.3.3 – Aplicação do modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes	80

7.3.4 – Comparação dos modelos	81
Capítulo 8: Conclusões e Considerações Futuras	83
Apêndice A : Algoritmo Gibbs Sampling	84
Apêndice B : Algoritmo Metropolis-Hastings	86
Apêndice C : Critério de Convergência de Gelman e Rubin	88
Apêndice D : Análise Clássica e Bayesiana do modelo Binomial	90
Apêndice E : Programa Computacional para o modelo Beta-Binomial	94
Referências Bibliográficas	98

Capítulo 1: Introdução

Em diversas situações trabalhamos com experimentos onde as unidades observadas admitem apenas dois resultados possíveis, que são chamados de sucesso e fracasso. Experimentos com essa característica ocorrem em diferentes áreas de interesse. Alguns exemplos:

- em uma pesquisa política, o indivíduo diz se aprova ou não o governo do prefeito de sua cidade.
- num laboratório, um animal em teste pode morrer ao receber uma certa dose de veneno ou permanecer vivo.
- um míssil pode atingir ou não um alvo estabelecido.
- numa partida de basquete, um jogador ao arremessar a bola para a cesta pode acertar a cesta ou errar o arremesso.
- em um experimento agrônômico, podemos verificar se uma determinada semente germina ou não de acordo com algumas condições experimentais (temperatura, umidade, tipo de extrato de raiz, etc.).

Nesses exemplos as sucessivas repetições dos experimentos são conhecidas como provas ou ensaios. Definimos por X_i a variável aleatória para representar o resultado do i -ésimo ensaio. Como cada ensaio admite apenas duas respostas possíveis, sucesso ou fracasso, a variável X_i pode ser codificada pelos valores 0 ou 1. Frequentemente dizemos que ocorre sucesso quando a variável X_i assume o valor 1 e fracasso quando a variável X_i assume o valor 0 e as

probabilidades de sucesso e fracasso são dadas respectivamente por p_i e $1 - p_i$. Na prática é comum chamar de sucesso o resultado de interesse do pesquisador, mesmo que seja um evento pouco provável de ocorrer. A variável X_i que assume apenas os valores 0 ou 1, é conhecida como a variável aleatória com distribuição de Bernoulli, onde a função densidade de probabilidade, a média e a variância são dadas por,

$$\begin{aligned} P(X_i = x_i) &= p_i^{x_i} (1 - p_i)^{1-x_i}, \text{ onde } x_i = 0 \text{ ou } 1. \\ E(X_i) &= p_i \\ \text{Var}(X_i) &= p_i(1 - p_i) \end{aligned} \quad (1.1)$$

Muitas vezes estamos interessados em determinar o número de sucessos em n_i ensaios de um mesmo experimento aleatório, onde cada ensaio admite só duas respostas: sucesso ou fracasso. Definimos a variável aleatória $Y_i = X_{i1} + X_{i2} + \dots + X_{in_i}$, $i = 1, \dots, N$, para representar o número de sucessos nos n_i ensaios, onde X_{ij} ($i = 1, \dots, N$; $j = 1, \dots, n_i$) representa o resultado do j -ésimo ensaio referente a i -ésima contagem de sucessos.

A distribuição Binomial é freqüentemente usada para modelar dados dessa forma, onde o objetivo é a contagem de y_i sucessos num total de n_i ensaios. Essa distribuição assume que os n_i ensaios do experimento são independentes e que as probabilidades de sucesso e de fracasso são as mesmas para cada ensaio. Assim, assumindo uma distribuição Binomial com parâmetros n_i e p para a variável aleatória Y_i temos,

$$\begin{aligned} P(Y_i = y_i) &= \binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1 - p)^{n_i - y_i}, \text{ onde } y_i = 0, 1, \dots, n_i \text{ e } i = 1, \dots, N \\ E(Y_i) &= n_i p \\ \text{Var}(Y_i) &= n_i p(1 - p) \end{aligned} \quad (1.2)$$

Contudo, em muitas aplicações podemos ter uma variabilidade observada dos dados maior do que a variabilidade esperada se considerarmos a suposição ordinária de uma distribuição Binomial (n_i, p) para Y_i , $i = 1, \dots, N$. Ou seja, em alguns casos o modelo Binomial assumido pode não ser o melhor modelo para ajustar os dados, pois devido a grande

variabilidade dos dados observados seria arriscado assumir uma probabilidade constante de sucesso para todos os ensaios e uma independência entre os ensaios. Podemos também encontrar algumas situações onde a variabilidade observada dos dados é menor do que a variabilidade esperada assumindo a distribuição Binomial(n_i, p) para Y_i . Neste caso também o modelo Binomial não seria o mais correto no ajuste dos dados. Essa variabilidade superior ou inferior dos dados observados em relação a variabilidade do modelo Binomial é chamada de variabilidade extra-Binomial e ela pode ser provocada por várias fontes (ver Hsiao (1994)).

São muitos os problemas práticos em que aparecem conjuntos de dados com variabilidade extra-Binomial. Um exemplo analisado por vários autores (ver Skellam (1948), Altham (1978) e Ruldolfer (1990)) envolve dados genéticos, onde o objetivo é a associação secundária de cromossomos num tipo de couve-flor(Brassica). Este exemplo é discutido no capítulo 7 deste trabalho. Um outro exemplo interessante (ver Kupper & Haseman (1978)) considera um conjunto de dados num laboratório de animais onde são analisados mortes fetais em 3 grandes grupos de controle de ratos. Investigações prévias provam que o ajuste do modelo Binomial para estes conjuntos de dados não é muito bom, e isso motiva o desenvolvimento de outras estratégias de modelagem para ajustar a variabilidade extra-Binomial.

1.1 – Alguns modelos para a variabilidade extra-Binomial

Alguns modelos tem sido propostos na literatura para ajustar a variabilidade extra-Binomial. Entre eles se destacam os modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e misturas de distribuições Binomiais.

No modelo Beta-Binomial (ver Skellam (1948), Griffiths (1973) e Crowder (1978)) a variabilidade extra-Binomial é originada pela distribuição de probabilidade na probabilidade de sucesso p da distribuição Binomial. A distribuição Beta com parâmetros α e β é a distribuição escolhida para p e a função densidade de probabilidade para a variável Y_i (número de sucessos em n_i ensaios) dado n_i , α e β , é dada pela distribuição Beta-Binomial.

O modelo Binomial Correlacionado (ver Altham (1978) e Kupper & Haseman (1978)) assume que a fonte da variabilidade extra-Binomial é a correlação δ entre as variáveis binárias $X_{i1}, X_{i2}, \dots, X_{in_i}$ de Y_i . Kupper & Haseman (1978), utilizando testes da razão de verossimilhança, comparam os ajustes dos modelos Beta-Binomial e Binomial Correlacionado nos dados

envolvendo mortes fetais em 3 grupos de ratos e encontram pequenas diferenças nos ajustes dos dois modelos, ao passo que ambos os modelos se comportam melhor do que o modelo considerando a distribuição Binomial ordinária.

Uma terceira possibilidade de modelagem para ajustar a variabilidade extra-Binomial é considerar que a contagem de sucessos y_i é supostamente gerada por uma mistura finita de distribuições Binomiais (ver Hsiao, 1994). Ou seja, a observação y_i origina-se de uma entre J categorias mas a fonte exata é desconhecida.

Neste trabalho, esses modelos são analisados sob o enfoque Bayesiano que é uma área que esta cada vez mais ganhando seu espaço na literatura. A seção seguinte nos mostra as características dos métodos Bayesianos e alguns tópicos importantes considerados nesta dissertação.

1.2 – Características dos métodos Bayesianos e alguns objetivos da dissertação.

Métodos Bayesianos são métodos inferenciais alternativos ao métodos tradicionais que podem melhorar a precisão dos resultados. A principal diferença entre os métodos Clássicos e Bayesianos é que os métodos Bayesianos permitem incorporar ao modelo, informações prévias a respeito de um parâmetro de interesse para a análise. Ao contrário da inferência Clássica a inferência Bayesiana considera os parâmetros como variáveis aleatórias com distribuições de probabilidade chamadas de distribuições a priori, disponíveis para melhorar a precisão da inferência. Podemos determinar uma distribuição a priori de uma maneira subjetiva ou através do conhecimento prévio de um especialista da área de interesse. A escolha de uma distribuição a priori adequada é fundamental para garantir a qualidade da inferência Bayesiana.

Após estipular as distribuições a priori para os parâmetros do modelo, combinamos estas distribuições com a função de verossimilhança e através da fórmula de Bayes encontramos a distribuição a posteriori conjunta para os parâmetros. Na análise Bayesiana toda a inferência de interesse será baseada nesta distribuição.

Uma vantagem da inferência Bayesiana em relação à inferência Clássica, é que quando temos um grande número de parâmetros envolvidos num modelo, o uso de métodos clássicos torna-se intratável, pois é extremamente trabalhoso a obtenção de estimadores de máxima

verossimilhança e requer resoluções de equações que podem não ter solução analítica. Procedimentos Bayesianos evitam a necessidade dessas soluções numéricas através do uso dos métodos de Monte Carlo em cadeia de Markov (MCMC). Em particular, utilizamos neste trabalho os algoritmos Gibbs Sampling (ver por exemplo, Gelfand & Smith (1990)) e Metropolis-Hastings (ver por exemplo, Chib & Greenberg (1995) ou Smith & Roberts (1993)) para obter estimadores de Monte Carlo das quantidades a posteriori de interesse dos parâmetros.

O algoritmo Gibbs Sampling é um método de simulação via cadeias de Markov, que obtém amostras de uma distribuição de interesse, baseada nas distribuições condicionais a posteriori dos parâmetros (ver apêndice A). Esse algoritmo é utilizado quando as distribuições condicionais apresentam a forma de uma distribuição conhecida.

Em modelos mais complexos as distribuições condicionais a posteriori não são facilmente identificadas como tendo uma forma conhecida, impossibilitando a geração direta das amostras a partir dessas distribuições. Neste caso usamos o algoritmo Metropolis-Hastings para a geração das amostras (ver apêndice B).

Um tópico de grande importância que será analisado neste trabalho é o diagnóstico de convergência das cadeias de Markov. Existem vários métodos para verificação da convergência e um dos mais utilizados é o método de Gelman & Rubin (ver Gelman & Rubin, 1992). A idéia deste método é que iniciando com diferentes pontos iniciais, as trajetórias de várias cadeias devem ser similares se convergirem para uma distribuição estacionária. Gelman & Rubin (1992) formalizam essas idéias através do uso das técnicas de análise de variâncias (ver apêndice C). Neste trabalho, utilizamos este método para a verificação da convergência em todos os modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial.

Outro ponto importante do trabalho que abordamos na análise Bayesiana, é o estudo da variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis (ver Williams (1982)). Um modelo que é freqüentemente usado para dados de contagens de sucessos, quando trabalhamos com covariáveis, é o modelo de regressão logística. Contudo, em algumas situações, esse modelo pode não se ajustar bem aos dados e um dos motivos está relacionado a presença da variabilidade extra-Binomial. Neste caso, consideramos outras estratégias de modelagem e desenvolvemos uma análise Bayesiana para esses modelos baseada nos métodos MCMC.

Para alguns modelos realizamos uma análise clássica, através da determinação de estimadores de máxima verossimilhança para os parâmetros e comparamos os resultados com aqueles obtidos sob o enfoque Bayesiano.

Também, apresentamos exemplos com dados reais assumindo os diferentes modelos propostos e uma discriminação dos modelos seguindo alguns critérios que são discutidos no decorrer da dissertação.

1.3 – Organização da dissertação

Esta dissertação está dividida em 8 capítulos.

Neste capítulo inicial, discutimos o problema relacionado a variabilidade extra-Binomial, quando o nosso interesse é a contagem de sucessos dos ensaios de um experimento. Introduzimos alguns modelos usados para ajustar essa variabilidade e apresentamos as principais características dos métodos Bayesianos, utilizados no decorrer do trabalho.

Nos capítulos 2, 3 e 4, apresentamos uma análise estatística dos modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial, introduzidos na seção 1.1. Analisamos o modelo Beta-Binomial no capítulo 2, o modelo Binomial Correlacionado no capítulo 3 e o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais no capítulo 4.

Com o objetivo de verificar qual desses modelos é o mais apropriado para ajustar os dados e se o ajuste desses modelos é superior ao ajuste do modelo Binomial, apresentamos no capítulo 5 dois critérios usados para discriminar os modelos.

O capítulo 6 é dedicado ao estudo da variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis.

No capítulo 7, analisamos conjuntos de dados reais para ilustrar a metodologia proposta nos capítulos anteriores.

Para finalizar, no capítulo 8 apresentamos as conclusões do trabalho e sugerimos algumas considerações futuras.

Capítulo 2: Análise do modelo Beta-Binomial

Neste capítulo, apresentamos uma análise estatística detalhada do modelo Beta-Binomial, utilizando os métodos Clássicos e Bayesianos. Inicialmente, na seção 3.1, apresentamos algumas características do modelo, o desenvolvimento matemático para obter a expressão da densidade Beta-Binomial e comentamos sobre uma reparametrização (ξ, ω) que tem sido usada por alguns autores. Na análise Clássica do modelo descrita na seção 3.2, introduzimos o procedimento para encontrar os estimadores de máxima verossimilhança utilizando o método iterativo de Newton-Raphson. Na análise Bayesiana do modelo descrita na seção 3.3, assumimos diferentes distribuições a priori para os parâmetros e encontramos as distribuições condicionais necessárias para o uso dos métodos de Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC).

Continuando com a notação introduzida no capítulo 1, vamos considerar neste e nos demais capítulos a variável aleatória Y_i para representar o número de sucessos em n_i ensaios, onde cada ensaio admite duas respostas: sucesso ou fracasso.

2.1 – Características do modelo

Este modelo foi proposto por Skellam (1948) que apresenta expressões para os momentos fatoriais da distribuição Beta-Binomial e descreve a estimação dos parâmetros pelo método dos momentos e pelo método de máxima verossimilhança.

Consideremos a suposição usual dada no capítulo anterior onde,

$$Y_i / n_i, p \sim \text{Binomial}(n_i, p) \quad , \quad i = 1, \dots, N .$$

Uma possibilidade para ajustar os dados com variabilidade extra-Binomial é assumir uma distribuição de probabilidade sobre o parâmetro p da distribuição Binomial. No modelo Beta-Binomial assumimos uma distribuição Beta para p com parâmetros α e β . Essa distribuição

tem sido usada por muitos autores (ver por exemplo, Griffiths (1973) and Crowder (1978)) pela sua simplicidade matemática. Assim, temos,

$$f(p / \alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1} \quad , \quad 0 \leq p \leq 1 \quad , \quad \alpha > 0 \text{ e } \beta > 0 \quad (2.1)$$

Desta forma, a função densidade de probabilidade da variável Y_i , $i = 1, \dots, N$, dado os parâmetros n_i, α e β , pode ser calculada por,

$$\begin{aligned} f(y_i / n_i, \alpha, \beta) &= \int_0^1 f(y_i, p / n_i, \alpha, \beta) dp \\ &= \int_0^1 f(y_i / p, n_i, \alpha, \beta) f(p / n_i, \alpha, \beta) dp \\ &= \int_0^1 \binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i-y_i} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1} dp \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\text{Como, } \int_0^1 p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1} dp = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)} \quad (2.3)$$

temos,

$$\begin{aligned} f(y_i / n_i, \alpha, \beta) &= \binom{n_i}{y_i} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \frac{\Gamma(\alpha + y_i)\Gamma(\beta + n_i - y_i)}{\Gamma(\alpha + \beta + n_i)} \\ &= \binom{n_i}{y_i} \frac{B(\alpha + y_i, \beta + n_i - y_i)}{B(\alpha, \beta)} \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\text{onde: } B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)}$$

A função densidade da variável Y_i dada em (2.4), é conhecida como a densidade da distribuição Beta-Binomial. A esperança e a variância de Y_i , $i = 1, \dots, N$, são dadas por,

$$E(Y_i / n_i, \alpha, \beta) = \frac{n_i \alpha}{\alpha + \beta} \quad (2.5)$$

$$Var(Y_i / n_i, \alpha, \beta) = n_i \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right) \left(1 - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right) \left(\frac{n_i + \alpha + \beta}{1 + \alpha + \beta} \right)$$

Observando a expressão $Var(Y_i / n_i, \alpha, \beta)$ dada em (2.5), percebemos que o termo $\left(\frac{n_i + \alpha + \beta}{1 + \alpha + \beta} \right)$ é sempre maior ou igual do que 1, pois $\alpha > 0$, $\beta > 0$ e $n_i \geq 1$. Este fato torna a variância do modelo Beta-Binomial sempre maior ou igual do que a variância do modelo Binomial, o que permite ajustar dados com variabilidade superior a da distribuição Binomial ordinária (ver Rudolfer, 1990).

Uma parametrização usada por muitos autores (ver por exemplo, Williams (1982) e Tarone (1979)) considera:

$$\xi = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \quad (2.6)$$

$$\omega = \frac{1}{\alpha + \beta}$$

Com esta reparametrização (ξ, ω) , as expressões (2.4) e (2.5) podem ser reescritas como:

$$f(y_i / n_i, \alpha, \beta) = \binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} (\alpha + j) \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (\beta + j)}{\prod_{j=0}^{n_i-1} (\alpha + \beta + j)} = \binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} (\xi + \omega j) \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (1 - \xi + \omega j)}{\prod_{j=0}^{n_i-1} (1 + \omega j)}$$

$$E(Y_i / n_i, \xi) = n_i \xi \quad (2.7)$$

$$Var(Y_i / n_i, \xi, \omega) = n_i \xi (1 - \xi) \frac{n_i + \omega^{-1}}{1 + \omega^{-1}}$$

Uma vantagem de usar os parâmetros ξ e ω é que podemos verificar que a distribuição Beta-Binomial tende suavemente para a distribuição Binomial quando $\omega \rightarrow 0$. Assim, existe uma ligação entre os modelos Binomial e Beta-Binomial através do parâmetro ω e este parâmetro pode ser usado para selecionar qual o melhor modelo a partir do teste de hipótese,

$$\begin{aligned} H_0 : \omega &= 0 \quad (\text{distribuição Binomial}) \\ H_1 : \omega &> 0 \quad (\text{distribuição Beta-Binomial}) \end{aligned} \tag{2.8}$$

No capítulo 5, que é o capítulo dedicado à discriminação dos modelos, discutimos em detalhes esse teste de hipóteses.

2.2 – Análise Clássica do modelo

A abordagem clássica do modelo Beta-Binomial e de outros modelos é feita com base na função de verossimilhança que expressa toda a informação contida no conjunto de dados de tamanho N . Assumindo que as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$ são independentes, a função de verossimilhança para o modelo Beta-Binomial, utilizando a expressão (2.4), é dada por,

$$\begin{aligned} L(\alpha, \beta) &= \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \frac{\Gamma(\alpha + y_i)\Gamma(\beta + n_i - y_i)}{\Gamma(\alpha + \beta + n_i)} \right] \\ &= \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} (\alpha + j) \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (\beta + j)}{\prod_{j=0}^{n_i-1} (\alpha + \beta + j)} \right] \end{aligned} \tag{2.9}$$

O nosso objetivo é encontrar valores para os parâmetros α e β que maximizem a função de verossimilhança. Esses valores são conhecidos como estimadores de máxima

verossimilhança (EMV) de α e β e são os valores dos parâmetros mais prováveis de gerar os dados observados. Matematicamente é mais fácil trabalhar com o logaritmo da função de verossimilhança. O logaritmo da expressão (2.9) é dado por,

$$\begin{aligned}
l(\alpha, \beta) &= \log[L(\alpha, \beta)] \\
&= \log \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} (\alpha + j) \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (\beta + j)}{\prod_{j=0}^{n_i-1} (\alpha + \beta + j)} \right] \right\} \\
&= \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} (\alpha + j) \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (\beta + j)}{\prod_{j=0}^{n_i-1} (\alpha + \beta + j)} \right] \right\} \\
&= \sum_{i=1}^N \left[\log \binom{n_i}{y_i} \right] + \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\prod_{j=0}^{y_i-1} (\alpha + j) \right] \right\} + \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (\beta + j) \right] \right\} - \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\prod_{j=0}^{n_i-1} (\alpha + \beta + j) \right] \right\} \\
&= \sum_{i=1}^N \left[\log \binom{n_i}{y_i} \right] + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} [\log(\alpha + j)] + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-y_i-1} [\log(\beta + j)] - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} [\log(\alpha + \beta + j)] \quad (2.10)
\end{aligned}$$

Derivando o logaritmo da função de verossimilhança em relação aos parâmetros α e β temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial l(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + j} \right) - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right) \\
\frac{\partial l(\alpha, \beta)}{\partial \beta} &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-y_i-1} \left(\frac{1}{\beta + j} \right) - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right) \quad (2.11)
\end{aligned}$$

Os EMV de α e β podem ser determinados de (2.11), encontrando os valores de α e β que são soluções das equações:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + j} \right) - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right) &= 0 \\ \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-v_i-1} \left(\frac{1}{\beta + j} \right) - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Como as equações dadas em (2.12) não são lineares em relação aos parâmetros α e β , precisamos utilizar algum método numérico para encontrar suas soluções. Um método prático muito utilizado é o método de Newton-Raphson (ver por exemplo, Lee (1992)). Este método tem um procedimento iterativo, onde α_k e β_k denotam as estimativas de α e β na k-ésima iteração e os valores para a (k+1)-ésima iteração são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{(k+1)} \\ \hat{\beta}_{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{(k)} \\ \hat{\beta}_{(k)} \end{pmatrix} + \left(I \left(\hat{\alpha}_{(k)}, \hat{\beta}_{(k)} \right) \right)^{-1} U \left(\hat{\alpha}_{(k)}, \hat{\beta}_{(k)} \right) \quad (2.13)$$

onde: $U \left(\hat{\alpha}_{(k)}, \hat{\beta}_{(k)} \right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial l(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial l(\alpha, \beta)}{\partial \beta} \end{pmatrix}_{\left(\hat{\alpha}, \hat{\beta} \right)}$ é chamado de vetor escore

e $I \left(\hat{\alpha}_{(k)}, \hat{\beta}_{(k)} \right) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \alpha^2} & -\frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \alpha \partial \beta} \\ -\frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \beta \partial \alpha} & -\frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \beta^2} \end{pmatrix}_{\left(\hat{\alpha}, \hat{\beta} \right)}$ é a matriz de informação de Fisher.

As segundas derivadas do logaritmo da função de verossimilhança em relação aos parâmetros α e β são dadas por,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \alpha^2} &= -\sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{v_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + j} \right)^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right)^2 \\ \frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \beta^2} &= -\sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-v_i-1} \left(\frac{1}{\beta + j} \right)^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right)^2 \\ \frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \alpha \partial \beta} &= \frac{\partial^2 l(\alpha, \beta)}{\partial \beta \partial \alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-1} \left(\frac{1}{\alpha + \beta + j} \right)^2\end{aligned}\tag{2.14}$$

O processo iterativo termina quando as diferenças nos valores de α e β em duas iterações consecutivas for desprezível. É fundamental darmos estimativas iniciais adequadas para α e β , para garantir a convergência dos parâmetros em poucas iterações. Podemos ter problemas com a aplicação do método de Newton-Raphson em situações onde temos um grande número de parâmetros para serem estimados, o que poderá levar a uma sobrecarga computacional, dificultando a convergência.

No passo final das iterações, além de obtermos estimativas para os parâmetros α e β , conseguimos também uma estimativa da matriz de variância-covariância de α e β , utilizando a propriedade assintótica dos estimadores de máxima verossimilhança. Esta propriedade diz que: se $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ são EMV de α e β , então $\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} \overset{a}{\sim} N((\alpha, \beta), I^{-1})$, onde I é a matriz de informação de Fisher. Desta forma, podemos determinar intervalos de confiança assintóticos para os parâmetros.

2.3 – Análise Bayesiana do modelo

Nesta seção, analisamos o modelo Beta-Binomial sob o enfoque Bayesiano. Para isso consideramos os parâmetros α e β como variáveis aleatórias, ou seja assumimos distribuições de probabilidade a priori para esses parâmetros. Para encontrar amostras das distribuições a posteriori marginais de α e β , utilizamos os métodos de Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC), introduzidos no capítulo 1. Com essas amostras obtidas por simulação, podemos estimar várias características dos parâmetros como a média e o desvio padrão, além de encontrar intervalos de credibilidade para os mesmos.

Assumimos as seguintes distribuições a priori para os parâmetros:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \alpha \sim \Gamma(a_1, b_1); \quad a_1, b_1 \text{ conhecidos} \\ \text{(ii)} \quad & \beta \sim \Gamma(a_2, b_2); \quad a_2, b_2 \text{ conhecidos} \end{aligned} \tag{2.15}$$

onde $\Gamma(a, b)$ denota uma distribuição Gama com parâmetros a e b .

Considerando que as distribuições a priori para os parâmetros são independentes, a função densidade conjunta a priori para α e β é dada por,

$$\pi(\alpha, \beta) \propto \alpha^{a_1-1} e^{-b_1\alpha} \beta^{a_2-1} e^{-b_2\beta} \tag{2.16}$$

Combinando (2.16) com a função de verossimilhança do modelo Beta-Binomial dada em (2.9), encontramos a densidade a posteriori conjunta para α e β dada por,

$$\pi(\alpha, \beta / y, n) \propto \alpha^{a_1-1} e^{-b_1\alpha} \beta^{a_2-1} e^{-b_2\beta} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \right\}^N \prod_{i=1}^N \left[\frac{\Gamma(\alpha+y_i)\Gamma(\beta+n_i-y_i)}{\Gamma(\alpha+\beta+n_i)} \right] \tag{2.17}$$

onde: $y = (y_1, \dots, y_N)$ e $n = (n_1, \dots, n_N)$.

A partir de (2.17), encontramos as distribuições condicionais a posteriori de α e β , que são necessárias para o uso dos métodos MCMC. Essas distribuições são dadas por,

$$(i) \pi(\alpha / \beta, y, \underline{n}) \propto \alpha^{a_1-1} e^{-b_1 \alpha} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)} \right\}^N \prod_{i=1}^N \left[\frac{\Gamma(\alpha + y_i)}{\Gamma(\alpha + \beta + n_i)} \right]$$

$$\propto \alpha^{a_1-1} e^{-b_1 \alpha} \exp \left\{ N \log[\Gamma(\alpha + \beta)] - N \log[\Gamma(\alpha)] + \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\alpha + y_i)] - \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\alpha + \beta + n_i)] \right\}$$

$$\text{ou } \pi(\alpha / \beta, y, \underline{n}) \propto \Gamma(a_1, b_1) \psi_1(\alpha, \beta)$$

onde:

$$\psi_1(\alpha, \beta) = \exp \left\{ N \log[\Gamma(\alpha + \beta)] - N \log[\Gamma(\alpha)] + \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\alpha + y_i)] - \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\alpha + \beta + n_i)] \right\}$$

$$(ii) \pi(\beta / \alpha, y, \underline{n}) \propto \beta^{a_2-1} e^{-b_2 \beta} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\beta)} \right\}^N \prod_{i=1}^N \left[\frac{\Gamma(\beta + n_i - y_i)}{\Gamma(\alpha + \beta + n_i)} \right]$$

$$\propto \beta^{a_2-1} e^{-b_2 \beta} \exp \left\{ N \log[\Gamma(\alpha + \beta)] - N \log[\Gamma(\beta)] + \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\beta + n_i - y_i)] - \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\alpha + \beta + n_i)] \right\}$$

$$\text{ou } \pi(\beta / \alpha, y, \underline{n}) \propto \Gamma(a_2, b_2) \psi_2(\alpha, \beta)$$

onde:

$$\psi_2(\alpha, \beta) = \exp \left\{ N \log[\Gamma(\alpha + \beta)] - N \log[\Gamma(\beta)] + \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\beta + n_i - y_i)] - \sum_{i=1}^N \log[\Gamma(\alpha + \beta + n_i)] \right\}$$

(2.18)

Como as distribuições condicionais para α e β não apresentam formas de distribuições conhecidas, utilizamos o algoritmo Metropolis-Hastings para realizar a simulação dos parâmetros e fazer as inferências desejadas.

Capítulo 3: Análise do modelo

Binomial Correlacionado

Neste capítulo, analisamos o modelo Binomial Correlacionado introduzido por Altham (1978) e Kupper & Haseman (1978). Na seção 3.1, apresentamos as idéias básicas do modelo, as expressões da função densidade, da média e da variância e as diferenças desse modelo em relação ao modelo Beta-Binomial. Nas seções 3.2 e 3.3, analisamos o modelo Binomial Correlacionado através dos métodos Clássicos e Bayesianos, respectivamente, utilizando os mesmos procedimentos empregados na análise do modelo Beta-Binomial.

3.1 – Características do modelo

Como já comentamos no capítulo 1, umas das suposições necessárias ao assumir o modelo Binomial para a variável $Y_i = X_{i1} + X_{i2} + \dots + X_{in_i}$, que representa o número de sucessos em n_i ensaios, é considerar que os n_i ensaios são independentes, ou seja o resultado de um ensaio não tem influência no resultado de outro ensaio. Contudo, Altham (1978) e Kupper & Haseman (1978) trabalhando com experimentos toxicológicos em laboratórios de animais, analisam dados de contagem de sucessos onde o modelo Binomial não se ajusta muito bem. Para resolver este problema, eles propõem o modelo Binomial Correlacionado que assume uma correlação entre as variáveis binárias $X_{i1}, X_{i2}, \dots, X_{in_i}$ de Y_i . Neste caso, a variabilidade extra-Binomial é provocada por esta correlação. Este modelo surge como uma alternativa ao modelo Beta-Binomial, analisado no capítulo 2, que já existia na literatura.

Representamos por δ a correlação entre os pares de variáveis binárias de Y_i , $i = 1, \dots, N$. Esta correlação, chamada de correlação intra-classe, é suposta homogênea entre $Y_1, Y_2, \dots, Y_N$.

Como $X_{ij} \sim \text{Bernoulli}(p)$, temos,

$$\begin{aligned}\delta = \text{Corr}(X_{ij}, X_{ik}) &= \frac{\text{Cov}(X_{ij}, X_{ik})}{\sqrt{\text{Var}(X_{ij})\text{Var}(X_{ik})}} = \\ &= \frac{E(X_{ij}X_{ik}) - E(X_{ij})E(X_{ik})}{\sqrt{\text{Var}(X_{ij})\text{Var}(X_{ik})}} = \frac{P(X_{ij}=1, X_{ik}=1) - p^2}{p(1-p)}\end{aligned}\quad (3.1)$$

$$p/j \neq k, \quad j, k = 1, \dots, n_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

A função densidade de probabilidade da variável Y_i , $i = 1, \dots, N$, dado n_i , δ e p , é dada por,

$$f(y_i / n_i, \delta, p) = \binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\} \quad (3.2)$$

A esperança e a variância de Y_i , $i = 1, \dots, N$, são dadas por,

$$E(Y_i / n_i, \delta, p) = n_i p \quad (3.3)$$

$$\text{Var}(Y_i / n_i, \delta, p) = n_i p(1-p)[1 + (n_i - 1)\delta] \Rightarrow \frac{-1}{n_i - 1} < \delta \leq 1$$

Uma propriedade do modelo Binomial Correlacionado que não é apresentada pelo modelo Beta-Binomial, é que além de ajustar conjuntos de dados com uma variabilidade superior a variabilidade do modelo Binomial, permite também ajustar dados com uma dispersão inferior a da distribuição Binomial ordinária. Este fato é possível pois a correlação δ pode assumir valores negativos, o que faz com que o termo $[1 + (n_i - 1)\delta]$ de $\text{Var}(Y_i)$, dado em (3.3), assumam valores entre 0 e 1. Quando isto ocorre, a variância do modelo Binomial Correlacionado é menor do que a variância do modelo Binomial (ver Prentice, 1986). Todavia, conjuntos de dados com essa dispersão inferior não são muito comuns e na maioria dos problemas envolvendo variabilidade extra-Binomial predominam a alta dispersão dos dados.

3.2 – Análise Clássica do modelo

Nesta seção, analisamos o modelo Binomial Correlacionado sob o ponto de vista clássico, apresentando as expressões necessárias para a obtenção dos estimadores de máxima verossimilhança dos parâmetros δ e p .

Considerando independentes as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$, a função de verossimilhança para o modelo Binomial Correlacionado, utilizando a expressão (3.2), é dada por,

$$\begin{aligned} L(\delta, p) &= \prod_{i=1}^N f(y_i / n_i, \delta, p) = \\ &= \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.4)$$

Aplicando o logaritmo na expressão (3.4) temos,

$$\begin{aligned} l(\delta, p) &= \log[L(\delta, p)] \\ &= \log \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\} \right] \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\} \right] \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left[\log \binom{n_i}{y_i} \right] + \log(p) \sum_{i=1}^N y_i + \log(1-p) \sum_{i=1}^N (n_i - y_i) \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^N \left[\log \binom{n_i}{y_i} \right] + \log(p) \sum_{i=1}^N y_i + \log(1-p) \sum_{i=1}^N (n_i - y_i) \\
&+ \sum_{i=1}^N \left\{ \log[2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2]] \right\} - \sum_{i=1}^N \{ \log[2p(1-p)] \}
\end{aligned} \tag{3.5}$$

As derivadas de primeira ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação aos parâmetros δ e p são dadas por,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial l(\delta, p)}{\partial \delta} &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2}{2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2]} \right] \\
\frac{\partial l(\delta, p)}{\partial p} &= \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{p} - \frac{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)}{1-p} \\
&+ \sum_{i=1}^N \left[\frac{2(1-2p) + \delta[-2n_i(y_i - n_i p) + 2y_i - 2n_i p]}{2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2]} \right] - \sum_{i=1}^N \left(\frac{1-2p}{p(1-p)} \right)
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Igualando as expressões dadas em (3.6) a 0 e resolvendo o sistema de equações, determinamos os EMV de δ e p . Como estas equações não são lineares em relação aos parâmetros, utilizamos também neste modelo o método iterativo de Newton-Raphson para encontrar suas soluções, seguindo o mesmo procedimento descrito no capítulo anterior.

As derivadas de segunda ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação a δ e p , necessárias para o método de Newton-Raphson, são dadas por,

$$\frac{\partial^2 l(\delta, p)}{\partial \delta^2} = - \sum_{i=1}^N \left[\frac{(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2}{2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2]} \right]^2$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 l(\delta, p)}{\partial p^2} &= -\frac{\sum_{i=1}^N y_i}{p^2} + \frac{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)}{(1-p)^2} \\
&+ \sum_{i=1}^N \left[\frac{(-4 + \delta[2n_i^2 - 2n_i])}{2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2]} \right] \\
&- \sum_{i=1}^N \left[\frac{(2(1-2p) + \delta[-2n_i(y_i - n_i p) + 2(y_i - n_i p)])^2}{(2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2])^2} \right] - \sum_{i=1}^N \left(\frac{-2p(1-p) - (1-2p)^2}{[p(1-p)]^2} \right) \\
\\
\frac{\partial^2 l(\delta, p)}{\partial \delta \partial p} &= \frac{\partial^2 l(\delta, p)}{\partial p \partial \delta} \\
&= \sum_{i=1}^N \left[\frac{-2n_i(y_i - n_i p) + 2(y_i - n_i p)}{2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2]} \right] \\
&- \sum_{i=1}^N \left[\frac{(2(1-2p) + \delta(-2n_i(y_i - n_i p) + 2(y_i - n_i p)))((y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2)}{(2p(1-p) + \delta[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2])^2} \right]
\end{aligned} \tag{3.7}$$

3.3 – Análise Bayesiana do modelo

Realizamos uma análise Bayesiana para o modelo Binomial Correlacionado com base na escolha das distribuições a priori para os parâmetros δ e p . Consideramos 2 possibilidades: começamos assumindo uma distribuição a priori informativa para a probabilidade de sucesso p e uma distribuição a priori não informativa para a correlação δ . Posteriormente, assumimos distribuições a priori não informativas para os dois parâmetros. Em ambas as situações encontramos as distribuições condicionais a posteriori para δ e p , necessárias para o uso dos métodos MCMC.

Considerando a primeira estratégia, as distribuições a priori escolhidas para os parâmetros são dadas por,

- (i) $\delta \sim U(a, b)$; a, b conhecidos (3.8)
- (ii) $p \sim \text{Beta}(c, d)$; c, d conhecidos

Assumindo independência a priori para os parâmetros, a função densidade conjunta a priori para δ e p é dada por,

$$\pi(\delta, p) \propto p^{c-1} (1-p)^{d-1} \quad (3.9)$$

Combinando as expressões (3.4) e (3.9), encontramos a densidade a posteriori conjunta para δ e p dada por,

$$\pi(\delta, p / \underline{y}, \underline{n}) \propto p^{c + \sum_{i=1}^N y_i - 1} (1-p)^{d + \sum_{i=1}^N (n_i - y_i) - 1} \prod_{i=1}^N \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\} \quad (3.10)$$

onde: $\underline{y} = (y_1, \dots, y_N)$ e $\underline{n} = (n_1, \dots, n_N)$.

Portanto, as distribuições condicionais a posteriori para os parâmetros δ e p são dadas por,

$$(i) \quad \pi(\delta / p, \underline{y}, \underline{n}) \propto \prod_{i=1}^N \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\}$$

$$\text{ou } \pi(\delta / p, \underline{y}, \underline{n}) \propto U(a, b) \psi(\delta, p)$$

(ii)

$$\pi(p / \delta, \underline{y}, \underline{n}) \propto p^{c + \sum_{i=1}^N y_i - 1} (1-p)^{d + \sum_{i=1}^N (n_i - y_i) - 1} \prod_{i=1}^N \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\}$$

$$\text{ou } \pi(p / \delta, \underline{y}, \underline{n}) \propto \text{Beta}\left(c + \sum_{i=1}^N y_i, d + \sum_{i=1}^N (n_i - y_i)\right) \psi(\delta, p)$$

$$\text{onde: } \psi(\delta, p) \propto \prod_{i=1}^N \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} [(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2] \right\} \quad (3.11)$$

Considerando a segunda estratégia, assumimos as seguintes distribuições a priori não informativas para os parâmetros:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \delta \sim U(a, b) \ ; \ a, b \text{ conhecidos} \\ \text{(ii)} \quad & p \sim U(c, d) \ ; \ c, d \text{ conhecidos} \end{aligned} \tag{3.12}$$

Assumindo que as distribuições a priori para os parâmetros são independentes, temos que a função densidade conjunta a priori é uma constante em relação a δ e p . Desta forma a distribuição a posteriori conjunta para δ e p é proporcional a função de verossimilhança dada em (3.4), ou seja:

$$\pi(\delta, p / y, n) \propto p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} \prod_{i=1}^N \left[\left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} \left[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2 \right] \right\} \right] \tag{3.13}$$

Desta forma, encontramos as distribuições condicionais a posteriori para os parâmetros δ e p . Para δ a distribuição condicional é a mesma expressão dada em (3.11) e para o parâmetro p a distribuição condicional é dada por,

$$\begin{aligned} \pi(p / \delta, y, n) & \propto p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} \prod_{i=1}^N \left\{ 1 + \frac{\delta}{2p(1-p)} \left[(y_i - n_i p)^2 + y_i(2p-1) - n_i p^2 \right] \right\} \\ \text{ou} \quad \pi(p / \delta, y, n) & \propto \text{Beta} \left(\sum_{i=1}^N y_i + 1, \sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1 \right) \psi(\delta, p) \end{aligned}$$

onde: $\psi(\delta, p)$ é dado em (3.11). (3.14)

Observamos que as distribuições condicionais a posteriori para os parâmetros dadas em (3.11) e (3.14) não apresentam formas de distribuições conhecidas. Portanto, em ambos os casos utilizamos o algoritmo Metropolis-Hastings para realizar a simulação dos parâmetros e fazer as inferências desejadas.

Capítulo 4: Análise do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais

Os modelos baseados em distribuições mistas, formam uma classe de modelos estatísticos que são naturalmente aplicados quando as observações amostrais são obtidas em diferentes situações, isto é quando temos uma população heterogênea (ver Titterington et.al. (1985)). A análise Bayesiana desses modelos está sendo recentemente utilizada em diversas áreas com grande sucesso, devido a formulação de novos algoritmos computacionais que facilitam a estimação dos parâmetros.

Este capítulo apresenta uma análise Clássica e Bayesiana para o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais. Na seção 4.1, definimos o modelo geral de mistura de J distribuições Binomiais e o caso particular considerando mistura de duas Binomiais. Na seção 4.2, apresentamos uma análise Clássica para o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais. Na seção 4.3, introduzimos variáveis latentes para simplificar a função de verossimilhança desse modelo. Utilizando esta função de verossimilhança simplificada, desenvolvemos na seção 4.4 uma análise Bayesiana para o modelo, encontrando as distribuições condicionais necessárias para os métodos MCMC, e apresentamos o algoritmo de simulação baseado na introdução das variáveis latentes.

4.1 – Características do modelo

A distribuição Beta-Binomial discutida no capítulo 2, assume uma distribuição contínua $F_p()$ sobre o parâmetro p , a probabilidade Binomial. Uma outra possibilidade para ajustar a variabilidade extra-Binomial, é considerar F degenerada num número finito de pontos. Em outras palavras, consideramos que a observação y_i é supostamente gerada por uma mistura finita de J distribuições Binomiais com probabilidades de sucesso diferentes dadas por $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_J$. Neste caso, a função densidade de probabilidade para a variável Y_i , ($i = 1, \dots, N$), é dada por,

$$f(y_i / n_i, \theta_1, \dots, \theta_J, \pi_1, \dots, \pi_J) = \sum_{j=1}^J \pi_j \binom{n_i}{y_i} \theta_j^{y_i} (1 - \theta_j)^{n_i - y_i} \quad (4.1)$$

onde $\pi_j, (j = 1, \dots, J)$, denota a probabilidade de que a observação y_i foi gerada da j -ésima distribuição Binomial e $\sum_{j=1}^J \pi_j = 1$.

Desta forma, y_i é originada de uma entre J categorias, mas a fonte exata é desconhecida.

Considerando o caso especial de mistura de duas distribuições Binomiais, onde $J = 2$, a distribuição de $Y_i, (i = 1, \dots, N)$, é dada por,

$$Y_i / n_i, \theta_1, \theta_2, \pi \sim \pi \text{Binomial}(n_i, \theta_1) + (1 - \pi) \text{Binomial}(n_i, \theta_2) \quad (4.2)$$

$$\Rightarrow f(y_i / n_i, \theta_1, \theta_2, \pi) = \pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}$$

onde π denota a probabilidade de que y_i foi gerada da primeira distribuição Binomial com probabilidade de sucesso θ_1 e $1 - \pi$ denota a probabilidade de que y_i foi gerada da segunda distribuição Binomial com probabilidade de sucesso θ_2 .

4.2 – Análise Clássica do modelo

Nesta seção, analisamos o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais sob o ponto de vista clássico, apresentando as expressões necessárias para a obtenção dos estimadores de máxima verossimilhança dos parâmetros θ_1, θ_2 e π .

Assumindo que as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$ são independentes, a função de verossimilhança para o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais, utilizando a expressão (4.2), é dada por,

$$L(\theta_1, \theta_2, \pi) = \prod_{i=1}^N \left\{ \pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i} \right\} \quad (4.3)$$

Aplicando o logaritmo na expressão (4.3), temos:

$$\begin{aligned} l(\theta_1, \theta_2, \pi) &= \log[L(\theta_1, \theta_2, \pi)] \\ &= \log \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i} \right] \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.4)$$

As derivadas de primeira ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação aos parâmetros θ_1 , θ_2 e π são dadas por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_1} &= \sum_{i=1}^N \pi \left[\frac{y_i \theta_1^{y_i-1} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} - (n_i - y_i) \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i - 1}}{\pi \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}} \right] \\ \frac{\partial l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_2} &= \sum_{i=1}^N (1 - \pi) \left[\frac{y_i \theta_2^{y_i-1} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i} - (n_i - y_i) \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i - 1}}{\pi \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}} \right] \\ \frac{\partial l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \pi} &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{\theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} - \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}}{\pi \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}} \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

Igualando as expressões dadas em (4.5) a 0 e resolvendo o sistema de equações, determinamos os EMV de θ_1 , θ_2 e π . Como estas equações não são lineares em relação aos

parâmetros, utilizamos também neste modelo o método iterativo de Newton-Raphson para encontrar suas soluções, seguindo o mesmo procedimento descrito no capítulo 2.

As derivadas de segunda ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação a θ_1 , θ_2 e π , necessárias para o método de Newton-Raphson, são dadas por,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_1^2} &= \sum_{i=1}^N \pi \left[\frac{y_i(y_i-1)\theta_1^{y_i-2}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - 2y_i(n_i-y_i)\theta_1^{y_i-1}(1-\theta_1)^{n_i-y_i-1} + (n_i-y_i)(n_i-y_i-1)\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i-2}}{\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right] \\
&\quad - \sum_{i=1}^N \pi \left[\left(\frac{y_i\theta_1^{y_i-1}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - (n_i-y_i)\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i-1}}{\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right)^2 \right] \\
\frac{\partial^2 l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_2^2} &= \sum_{i=1}^N (1-\pi) \left[\frac{y_i(y_i-1)\theta_2^{y_i-2}(1-\theta_2)^{n_i-y_i} - 2y_i(n_i-y_i)\theta_2^{y_i-1}(1-\theta_2)^{n_i-y_i-1} + (n_i-y_i)(n_i-y_i-1)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i-2}}{\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right] \\
&\quad - \sum_{i=1}^N (1-\pi) \left[\left(\frac{y_i\theta_2^{y_i-1}(1-\theta_2)^{n_i-y_i} - (n_i-y_i)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i-1}}{\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right)^2 \right] \\
\frac{\partial^2 l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \pi^2} &= - \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - \theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i}}{\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right)^2 \right] \\
\frac{\partial^2 l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_1 \partial \theta_2} &= - \sum_{i=1}^N \pi(1-\pi) \left[\frac{(y_i\theta_1^{y_i-1}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - (n_i-y_i)\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i-1})(y_i\theta_2^{y_i-1}(1-\theta_2)^{n_i-y_i} - (n_i-y_i)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i-1})}{(\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i})^2} \right] \\
\frac{\partial^2 l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_1 \partial \pi} &= - \sum_{i=1}^N \pi \left[\frac{(y_i\theta_1^{y_i-1}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - (n_i-y_i)\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i-1})(\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - \theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i})}{(\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i})^2} \right] \\
\frac{\partial^2 l(\theta_1, \theta_2, \pi)}{\partial \theta_2 \partial \pi} &= - \sum_{i=1}^N (1-\pi) \left[\frac{(y_i\theta_2^{y_i-1}(1-\theta_2)^{n_i-y_i} - (n_i-y_i)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i-1})(\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} - \theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i})}{(\pi\theta_1^{y_i}(1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi)\theta_2^{y_i}(1-\theta_2)^{n_i-y_i})^2} \right]
\end{aligned} \tag{4.6}$$

4.3– Introdução de variáveis latentes

Como podemos observar, a função de verossimilhança dada em (4.3), apesar de englobar uma mistura de apenas duas distribuições Binomiais, é uma expressão bastante complexa pois envolve somas de termos. Este fato, na análise Bayesiana, acaba dificultando o trabalho computacional quando utilizamos os métodos MCMC, independente da escolha das distribuições a priori. Para simplificar este problema, introduzimos no modelo variáveis não observáveis Z_i , ($i = 1, \dots, N$), também chamadas de variáveis latentes, que acabam simplificando o algoritmo de simulação dos métodos MCMC (ver por exemplo, Tanner & Wong (1987)).

A variável latente Z_i , ($i = 1, \dots, N$), é definida como:

$$Z_i = \begin{cases} 1 & \text{se a } i\text{-ésima observação foi gerada da primeira distribuição Binomial} \\ 0 & \text{se a } i\text{-ésima observação foi gerada da segunda distribuição Binomial} \end{cases}$$

ou seja, Z_i tem uma distribuição de Bernoulli com probabilidade de sucesso dada por,

$$h_i = P(Z_i = 1 / y_i, n_i, \theta_1, \theta_2, \pi) = \frac{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}} \quad (4.7)$$

Desta forma, temos,

$$f(z_i / y_i, n_i, \theta_1, \theta_2, \pi) = h_i^{z_i} (1 - h_i)^{1 - z_i}$$

$$= \left(\frac{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}} \right)^{z_i} \left(1 - \frac{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1 - \theta_1)^{n_i - y_i} + (1 - \pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1 - \theta_2)^{n_i - y_i}} \right)^{1 - z_i}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right)^{z_i} \left(\frac{(1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right)^{1-z_i} \\
&= \frac{\left(\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right)^{z_i} \left((1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right)^{1-z_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i}}
\end{aligned}$$

Isto é,

$$\begin{aligned}
\pi(\underline{z}/\underline{n}, \underline{y}, \theta_1, \theta_2, \pi) &= \prod_{i=1}^N f(z_i / y_i, n_i, \theta_1, \theta_2, \pi) \\
&= \prod_{i=1}^N \left[\frac{\left(\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right)^{z_i} \left((1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right)^{1-z_i}}{\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i}} \right] \\
&= \frac{\prod_{i=1}^N \left[\left(\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right)^{z_i} \left((1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right)^{1-z_i} \right]}{\prod_{i=1}^N \left[\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right]}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

onde: $\underline{z} = (z_1, \dots, z_N)$, $\underline{y} = (y_1, \dots, y_N)$ e $\underline{n} = (n_1, \dots, n_N)$

Portanto, a função de verossimilhança ampliada com a introdução das variáveis latentes $(Z_i, i = 1, \dots, N)$ é dada por,

$$\begin{aligned}
L(n, \theta_1, \theta_2, \pi / y, z) &= L(n, \theta_1, \theta_2, \pi / y) \pi(n, y, \theta_1, \theta_2, \pi / z) \\
&= \frac{\prod_{i=1}^N \left[\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right] \prod_{i=1}^N \left[\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right]^{z_i} \left[(1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right]^{1-z_i}}{\prod_{i=1}^N \left[\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} + (1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right]} \\
&= \prod_{i=1}^N \left[\left(\pi \binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right)^{z_i} \left((1-\pi) \binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right)^{1-z_i} \right] \\
&= \pi^{\sum_{i=1}^N z_i} (1-\pi)^{N-\sum_{i=1}^N z_i} \prod_{i=1}^N \left[\left(\binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right)^{z_i} \left(\binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right)^{1-z_i} \right] \quad (4.9)
\end{aligned}$$

Observar que esta expressão apresenta uma grande simplificação em relação a expressão dada em 4.3 que nos mostra a função de verossimilhança antes de introduzir as variáveis latentes. Este fato irá facilitar o trabalho computacional na análise Bayesiana descrita na próxima seção.

4.3 – Análise Bayesiana e algoritmo de simulação

Desenvolvemos uma análise Bayesiana para o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais, assumindo as seguintes distribuições a priori para os parâmetros:

- (i) $\theta_1 \sim \text{Beta}(a_1, b_1)$
 - (ii) $\theta_2 \sim \text{Beta}(a_2, b_2)$
 - (iii) $\pi \sim \text{Beta}(c, d)$
- (4.10)

Assumindo que as distribuições a priori para os parâmetros θ_1 , θ_2 e π são independentes, a função densidade a priori conjunta para esses parâmetros é dada por,

$$g(\theta_1, \theta_2, \pi) \propto \theta_1^{a_1-1} (1-\theta_1)^{b_1-1} \theta_2^{a_2-1} (1-\theta_2)^{b_2-1} \pi^{c-1} (1-\pi)^{d-1} \quad (4.11)$$

Combinando a expressão (4.11) com a função de verossimilhança simplificada por variáveis latentes dada em (4.9), encontramos a densidade a posteriori conjunta para θ_1 , θ_2 e π , dada por,

$$\begin{aligned} g(\theta_1, \theta_2, \pi / n, y, z) &\propto \theta_1^{a_1-1} (1-\theta_1)^{b_1-1} \theta_2^{a_2-1} (1-\theta_2)^{b_2-1} \pi^{c-1} (1-\pi)^{d-1} \pi^{\sum_{i=1}^N z_i} (1-\pi)^{N-\sum_{i=1}^N z_i} \\ &\prod_{i=1}^N \left[\left(\binom{n_i}{y_i} \theta_1^{y_i} (1-\theta_1)^{n_i-y_i} \right)^{z_i} \left(\binom{n_i}{y_i} \theta_2^{y_i} (1-\theta_2)^{n_i-y_i} \right)^{1-z_i} \right] \\ &\propto \theta_1^{a_1 + \sum_{i=1}^N y_i z_i - 1} (1-\theta_1)^{b_1 + \sum_{i=1}^N z_i (n_i - y_i) - 1} \theta_2^{a_2 + \sum_{i=1}^N (1-z_i) y_i - 1} (1-\theta_2)^{b_2 + \sum_{i=1}^N (1-z_i) (n_i - y_i) - 1} \pi^{c + \sum_{i=1}^N z_i - 1} (1-\pi)^{d + N - \sum_{i=1}^N z_i - 1} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Portanto, as distribuições condicionais necessárias para o uso dos métodos MCMC são dadas por,

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad g(\theta_1 / \theta_2, \pi, n, z, y) &\propto \theta_1^{a_1 + \sum_{i=1}^N y_i z_i - 1} (1-\theta_1)^{b_1 + \sum_{i=1}^N z_i (n_i - y_i) - 1} \\ \text{(ii)} \quad g(\theta_2 / \theta_1, \pi, n, z, y) &\propto \theta_2^{a_2 + \sum_{i=1}^N (1-z_i) y_i - 1} (1-\theta_2)^{b_2 + \sum_{i=1}^N (1-z_i) (n_i - y_i) - 1} \\ \text{(iii)} \quad g(\pi / \theta_1, \theta_2, n, z, y) &\propto \pi^{c + \sum_{i=1}^N z_i - 1} (1-\pi)^{d + N - \sum_{i=1}^N z_i - 1} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Como as distribuições condicionais para os parâmetros θ_1 , θ_2 e π apresentam formas de distribuições Beta, utilizamos o algoritmo Gibbs Sampling para realizar a simulação dos parâmetros e fazer as inferências desejadas.

O algoritmo computacional para gerar amostras dos parâmetros θ_1 , θ_2 e π baseado na introdução de variáveis latentes é dado pelas seguintes etapas:

(i) Dados os valores iniciais $\theta_1^{(0)}$, $\theta_2^{(0)}$ e $\pi^{(0)}$, gerar uma amostra $(z_1, z_2, \dots, z_N)$ a partir da distribuição de Bernoulli p/ z_i com probabilidade de sucesso,

$$h_i = \frac{\pi^{(0)} \binom{n_i}{y_i} (\theta_1^{(0)})^{y_i} (1 - \theta_1^{(0)})^{n_i - y_i}}{\pi^{(0)} \binom{n_i}{y_i} (\theta_1^{(0)})^{y_i} (1 - \theta_1^{(0)})^{n_i - y_i} + (1 - \pi^{(0)}) \binom{n_i}{y_i} (\theta_2^{(0)})^{y_i} (1 - \theta_2^{(0)})^{n_i - y_i}}, \quad i = 1, \dots, N.$$

(ii) Gerar $\theta_1^{(1)}$ a partir da distribuição $\text{Beta}\left(a_1 + \sum_{i=1}^N y_i z_i, b_1 + \sum_{i=1}^N z_i (n_i - y_i)\right)$

(iii) Gerar $\theta_2^{(1)}$ a partir da distribuição $\text{Beta}\left(a_2 + \sum_{i=1}^N y_i (1 - z_i), b_2 + \sum_{i=1}^N (1 - z_i) (n_i - y_i)\right)$

(iv) Gerar $\pi^{(1)}$ a partir da distribuição $\text{Beta}\left(c + \sum_{i=1}^N z_i, d + N - \sum_{i=1}^N z_i\right)$

Repetir (i)-(iv) até gerar uma amostra de tamanho S .

Capítulo 5: Discriminação dos modelos

Nos capítulos 2, 3 e 4 desse trabalho, apresentamos a análise estatística dos modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, que são modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial. Frequentemente, precisamos decidir qual desses modelos se ajusta melhor em relação a determinados conjuntos de dados, e se o ajuste desses modelos é superior ao ajuste do modelo considerando a distribuição Binomial ordinária. Para isto, descrevemos neste capítulo dois métodos usados para discriminar os modelos.

O primeiro método, discutido na seção 5.1, é o critério de mínima informação (AIC), que é um critério clássico de comparação dos modelos.

O segundo método, de origem Bayesiana, é o fator de Bayes que é a razão das verossimilhanças marginais de dois modelos concorrentes. Discutimos este método em detalhes na seção 5.2, apresentando sua interpretação, alguns estimadores da verossimilhança marginal e comentamos sobre quais desses estimadores iremos considerar em cada modelo. Também nesta seção, utilizamos o fator de Bayes para resolver o teste de hipótese introduzido no capítulo 2, que compara os modelos Binomial e Beta-Binomial.

5.1 – Discriminação Clássica dos modelos: AIC

Uma forma de selecionar modelos na análise Clássica é o uso do critério de mínima informação, conhecido como AIC, proposto por Akaike (ver Box et al., 1994). Esse critério é muito utilizado para discriminar os modelos na área de Séries Temporais, mas com alguns ajustes pode ser utilizado na seleção dos modelos de outras áreas (ver por exemplo, Klein & Moeschberger, 1997).

Para modelos de Séries Temporais temos,

$$AIC = \frac{-2l(\text{ver. max.}) + 2r}{n} \quad (5.1)$$

onde $l(\text{ver. max.})$ denota o logaritmo da função de verossimilhança maximizada, n é o tamanho da série e $r = p + q + 1$ denota o número de parâmetros estimados pelo modelo, onde p é a ordem da parte dos modelos auto-regressivos e q é a ordem da parte dos modelos de médias móveis.

Para outras áreas, o critério de mínima informação é dado por,

$$\text{AIC} = -2l(\text{ver. max.}) + 2(p) \quad (5.2)$$

onde $l(\text{ver. max.})$ denota o logaritmo da função de verossimilhança maximizada e p denota o número de parâmetros estimados pelo modelo.

Os modelos que apresentam menores valores do AIC são os preferidos para ajustar os dados.

É interessante observar que esse critério é extremamente fácil de ser utilizado, pois o “software” SAS nos fornece o logaritmo da função de verossimilhança na análise Clássica dos modelos.

5.2 – Discriminação Bayesiana dos modelos: verossimilhança marginal e fator de Bayes.

A verossimilhança marginal é uma ferramenta de grande importância numa análise Bayesiana quando estamos interessados na construção de testes de hipóteses e na discriminação dos modelos. Para um determinado modelo representado por M , a verossimilhança marginal é definida da seguinte da seguinte forma,

$$p(\underline{y}/M) = \int L(\underline{\theta}_M, M) \pi(\underline{\theta}_M / M) p_{\sim M} \quad (5.3)$$

onde: $L(\underline{\theta}_M, M)$ é a função de verossimilhança para o modelo M ,

$\pi(\underline{\theta}_M / M)$ é a distribuição a priori conjunta para os parâmetros do modelo M ,

e $\underline{\theta}_{\sim M}$ é o vetor de parâmetros do modelo M .

Quando nosso objetivo é a comparação de dois modelos M_1 e M_2 , utilizamos o fator de Bayes B_{12} , que é definido como a razão das verossimilhanças marginais desses modelos, ou seja:

$$B_{12} = \frac{P(y/M_1)}{P(y/M_2)} \quad (5.4)$$

Desta forma, o fator de Bayes é um valor numérico baseado nos dados, que está a favor de um determinado modelo estatístico e contra um outro modelo. Uma interpretação do fator de Bayes sugerido por Kass and Raftery (1995), é dado pela tabela a seguir.

Tabela 5.1: Interpretação do fator de Bayes.

B_{12}	$2\log B_{12}$	Evidência a favor de M_1
< 1	< 0	Negativa (apoia M_2)
$1 \mapsto 3$	$0 \mapsto 2$	Vale ser mencionada
$3 \mapsto 20$	$2 \mapsto 6$	Postiva
$20 \mapsto 150$	$6 \mapsto 10$	Forte
>150	>10	muito forte

Pela tabela 5.1, concluímos que quando a verossimilhança marginal do modelo M_1 for maior que a verossimilhança marginal do modelo M_2 , ou seja quando $B_{12} > 1$, o modelo M_1 apresenta um melhor ajuste dos dados.

Para o caso de r modelos, $M_1, M_2, \dots, M_r$, escolhemos aquele modelo que apresentar a maior verossimilhança marginal.

5.2.1 – Estimação da verossimilhança marginal e aplicação nos modelos

Em algumas situações elementares envolvendo modelos simples, a verossimilhança marginal dada em (5.3) pode ser calculada analiticamente. Contudo, freqüentemente ela é intratável devido a complexidade no cálculo das integrais, independente de qual distribuição a priori está sendo usada para o modelo em questão. Desta forma, precisamos utilizar algum método de aproximação para encontrar um estimador da verossimilhança marginal. Nesta dissertação, consideramos dois métodos de estimação: a aproximação de Monte Carlo e o método de Laplace, descritos respectivamente nas seções 5.2.1.1 e 5.2.1.2. Nestas seções, utilizamos estes métodos para apresentar as expressões dos estimadores das verossimilhanças marginais dos modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, discutidos nos capítulos 2, 3 e 4 desta dissertação.

5.2.1.1 – Aproximação de Monte Carlo

Como já comentamos nos capítulos anteriores, neste trabalho a análise Bayesiana dos modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial é baseada nos métodos de Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC). Utilizando esses métodos geramos uma amostra $(\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots, \theta^{(S)})$ a partir da distribuição a priori $p(\theta)$ e com esta amostra podemos calcular um estimador da verossimilhança marginal (5.3), conhecido como estimador de Monte Carlo, dado por,

$$\hat{p}\left(\underline{y}/M\right) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S L\left(\theta^{(s)}, M\right) \quad (5.5)$$

onde S é o tamanho da amostra obtida por simulação.

Utilizamos a aproximação de Monte Carlo para estimar a verossimilhança marginal em todos os modelos da dissertação, exceto no modelo Binomial onde podemos obter o valor exato da verossimilhança marginal. Na seção 5.2.2, onde construímos um teste de hipóteses para comparar os modelos Binomial e Beta-Binomial, apresentamos a verossimilhança marginal exata do modelo Binomial, que será representado por M_1 . Para os modelos Beta-Binomial, Binomial

Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, representados respectivamente por M_7 , M_8 e M_9 , os estimadores de Monte Carlo da verossimilhança marginal são dados por,

1) Modelo Beta-Binomial

$$p\left(\underline{y}/M_7\right) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\Gamma(\alpha^{(s)} + \beta^{(s)}) \Gamma(\alpha^{(s)} + y_i) \Gamma(n_i + \beta^{(s)} - y_i)}{\Gamma(\alpha^{(s)}) \Gamma(\beta^{(s)}) \Gamma(\alpha^{(s)} + \beta^{(s)} + n_i)} \right] \right\} \quad (5.6)$$

2) Modelo Binomial Correlacionado

$$p\left(\underline{y}/M_8\right) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} (p^{(s)})^{y_i} (1-p^{(s)})^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta^{(s)}}{2p^{(s)}(1-p^{(s)})} \left[(y_i - n_i p^{(s)})^2 + y_i (2p^{(s)} - 1) - n_i (p^{(s)})^2 \right] \right\} \right] \right\} \quad (5.7)$$

3) Modelo de mistura de duas distribuições Binomiais

$$\hat{p}\left(\underline{y}/M_9\right) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\pi^{(s)} \binom{n_i}{y_i} (\theta_1^{(s)})^{y_i} (1-\theta_1^{(s)})^{n_i-y_i} + (1-\pi^{(s)}) \binom{n_i}{y_i} (\theta_2^{(s)})^{y_i} (1-\theta_2^{(s)})^{n_i-y_i} \right] \right\} \quad (5.8)$$

É importante salientar, que para o modelo Binomial Correlacionado (M_8), como estamos trabalhando com duas estratégias diferentes na análise Bayesiana, vamos encontrar duas estimativas da verossimilhança marginal. Assumindo as distribuições a priori dadas em (3.8), a estimativa de Monte Carlo da verossimilhança marginal será representada por $\hat{p}\left(\underline{y}/M_{31}\right)$, ao passo que assumindo as distribuições a priori dadas em (3.12), a estimativa de Monte Carlo da verossimilhança marginal será representada por $\hat{p}\left(\underline{y}/M_{32}\right)$.

5.2.1.2 – Método de Laplace

A aproximação de Laplace (ver Tierney & Kadane, 1986) é uma técnica numérica muito utilizada na inferência Bayesiana para resolver integrais. Este método de aproximação pode ser utilizado satisfazendo certas condições de regularidade e a aproximação é bem razoável para tamanhos amostrais grandes.

Representamos por I a verossimilhança marginal dada em (5.3). A aproximação de Laplace para I é dada por,

$$\hat{I} = (2\pi)^{d/2} \hat{\sigma} L\left(\hat{\theta}\right) \pi\left(\hat{\theta}\right) \quad (5.9)$$

onde: d é a dimensão do vetor de parâmetros θ .

$$\hat{\sigma} = \left\{ -\partial^2 \log \left[L\left(\hat{\theta}\right) \pi\left(\hat{\theta}\right) \right] \right\}^{-1/2}$$

e $\hat{\theta}$ é o vetor de estimadores de máxima verossimilhança de θ .

Como o nosso objetivo na análise Bayesiana dos modelos é voltado para o uso dos métodos MCMC, onde a discriminação dos modelos é baseada nos estimadores de Monte Carlo, não utilizamos o método de Laplace para estimar a verossimilhança marginal de todos os modelos discutidos até aqui. Escolhemos apenas o modelo Beta-Binomial para encontrar uma estimativa de Laplace da verossimilhança marginal e comparamos este valor com a estimativa de Monte Carlo do modelo. Utilizando a expressão (5.9), o estimador de Laplace da verossimilhança marginal para o modelo Beta-Binomial é dado por,

$$\begin{aligned}
I_{M_2} = & 2\pi + \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\alpha+j} \right)^2 \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\beta+j} \right)^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\alpha+\beta+j} \right)^2 + \frac{a_2-1}{\beta} \right] \right. \\
& + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\alpha+\beta+j} \right)^2 \left[- \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\beta+j} \right)^2 - \frac{a_2-1}{\beta} \right] \\
& \left. + \frac{(a_1-1)}{\alpha} \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\beta+j} \right)^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\alpha+\beta+j} \right)^2 + \frac{a_2-1}{\beta} \right] \right]^{1/2} \\
& \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} \binom{\alpha+j}{\alpha} \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} \binom{\beta+j}{\beta}}{\prod_{j=0}^{n_i-1} \binom{\alpha+\beta+j}{\alpha+\beta}} \right] \frac{b_1^{a_1} \alpha^{a_1-1} e^{-b_1 \alpha}}{\Gamma(a_1)} \frac{b_2^{a_2} \beta^{a_2-1} e^{-b_2 \beta}}{\Gamma(a_2)}
\end{aligned} \tag{5.10}$$

5.2.2 – Aplicação do Fator de Bayes no teste de hipóteses envolvendo os modelos Binomial e Beta-Binomial.

Como já comentamos no capítulo 2, quando utilizamos a reparametrização (ξ, ω) dada em (2.6), o modelo Beta-Binomial tende suavemente para o modelo Binomial quando o parâmetro $\omega \rightarrow 0$. Este fato permite a construção do teste de hipótese dado em (2.8), que compara os modelos Binomial e Beta-Binomial através do parâmetro ω .

Para resolver este teste de hipótese, podemos utilizar o fator de Bayes, que neste caso é dado por,

$$B(\omega) = \frac{P(y/H_0)}{P(y/H_1)} = \frac{\int_0^1 L(p, M_1) \pi(p/M_1) dp}{\int_0^1 \int_0^1 L(\xi, \omega, M_2) \pi(\xi, \omega/M_2) d\xi d\omega} \tag{5.11}$$

onde $\pi(p/M_1)$ e $\pi(\xi, \omega/M_2)$ são as distribuições a priori associadas aos modelos Binomial(M_1) e Beta-Binomial(M_2) e $L(p, M_1)$ e $L(\xi, \omega, M_2)$ são as funções de verossimilhança desses modelos.

Para calcular a verossimilhança marginal do numerador do fator de Bayes, que está associada a hipótese H_0 favorável ao modelo Binomial, assumimos uma distribuição a priori Uniforme(0,1) para o parâmetro p . Desta forma, podemos determinar o valor exato de $P(y/H_0)$ pelo uso da função Beta, ou seja,

$$P(y/H_0) = P(y/M_1) = \int_0^1 \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i-y_i} \right] dp = k \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right) \Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)} \quad (5.12)$$

$$\text{onde } k = \left[\prod_{i=1}^N \binom{n_i}{y_i} \right].$$

Com relação ao denominador $P(y/H_1)$ não podemos determinar o valor exato e devemos utilizar algum método de aproximação para estimar a verossimilhança marginal. O método escolhido foi o método de Laplace descrito na seção 5.2.1.2. Para o parâmetro ξ , assumimos a mesma distribuição a priori Uniforme(0,1) que assumimos para o parâmetro p do modelo Binomial. Com relação ao parâmetro ω , não vamos especificar nenhuma distribuição a priori e vamos calcular o fator de Bayes considerando diferentes valores de ω .

O estimador de Laplace para $P(y/H_1)$ é dado por,

$$\hat{I}_{H_1} = (2\pi)^{1/2} \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{y_i-1} \left(\frac{1}{\hat{\xi} + \omega j} \right)^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{n_i-y_i-1} \left(\frac{1}{1 - \hat{\xi} + \omega j} \right)^2 \right]^{-1/2} \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{\prod_{j=0}^{y_i-1} (\hat{\xi} + \omega j) \prod_{j=0}^{n_i-y_i-1} (1 - \hat{\xi} + \omega j)}{\prod_{j=0}^{n_i-1} (1 + \omega j)} \right] \quad (5.13)$$

Portanto, para vários valores de ω , encontramos $\hat{I}_{H_1}$ e calculamos estimativas do fator de Bayes. A interpretação do fator de Bayes e a conclusão do teste de hipóteses são feitos com base na tabela 5.1, que apresentamos no início da seção 5.2.

Capítulo 6: Variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis

Nos capítulos anteriores da dissertação, o nosso estudo esteve voltado para os modelos usados para ajustar dados de contagens de sucessos, que apresentam uma variabilidade superior ou inferior a variabilidade do modelo Binomial. Neste capítulo, o nosso interesse continua sendo a análise de modelos para dados de contagens de sucessos, mas considerando a presença de covariáveis, ou seja analisamos situações onde temos variáveis explanatórias associadas às observações.

Em muitas aplicações encontramos conjuntos de dados dessa forma. Por exemplo, em estudos toxicológicos, a unidade experimental pode ser ninhadas de animais e a variável resposta é o número de animais com alguma anormalidade. A incidência dessa anormalidade pode variar entre as ninhadas devido a influências genéticas ou ambientais e o uso de covariáveis torna-se necessário. Um modelo que é muito utilizado para ajustar dados com essas características é o modelo de regressão logística, discutido na seção 6.1. Contudo, em algumas situações, quando todas as variáveis explanatórias do modelo forem ajustadas, a variabilidade observada dos dados pode ser maior do que a variabilidade esperada assumindo o modelo de regressão logística. Neste caso, para melhorar o ajuste, temos duas possibilidades: adicionar outras variáveis explanatórias no modelo ou introduzir no modelo uma fonte da variabilidade extra-Binomial. Frequentemente, a segunda opção tem sido escolhida (ver Williams, 1982) e na seção 6.2 apresentamos dois modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis. Na seção 6.3, apresentamos a análise estatística dos modelos discutidos nas seções 6.1 e 6.2 e comentamos sobre a discriminação dos modelos na presença de covariáveis.

6.1 – Modelo de regressão logística

Em determinados experimentos, utilizamos as técnicas de análise de regressão quando estamos interessados em investigar como as mudanças ocorridas em uma ou mais variáveis

explicativas, também chamadas de variáveis independentes ou covariáveis, afetam uma outra variável, denominada variável resposta ou dependente. Essas técnicas permitem verificar se existe realmente uma relação significativa entre essas variáveis, qual o tipo de relação, além de obter a predição das variáveis respostas a partir das variáveis explicativas.

O exemplo mais comum de modelagem na análise de regressão é o modelo de regressão linear. Consideramos que m covariáveis, $W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{im}$, estão associadas a uma variável resposta V_i . No modelo de regressão linear podemos expressar o valor médio da variável resposta como uma equação linear das variáveis explicativas, ou seja,

$$E(V_i / W_{i1}, \dots, W_{im}) = \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij} \quad (6.1)$$

onde: $w_{i0} = 1$, $i = 1, \dots, N$ e $E(V_i / W_{i1}, \dots, W_{im})$ é contínua e pode assumir qualquer valor entre $-\infty$ e ∞ .

No caso da variável resposta ser binária ou dicotômica, utilizamos o modelo de regressão logística, que surgiu da necessidade de modelos mais satisfatórios para dados qualitativos e pela inadequação ao aplicar regressão linear para variáveis dependentes qualitativas. Considerando como binária a variável resposta V_i e representando por p_i a média da variável resposta $E(V_i / W_{i1}, \dots, W_{im})$, o modelo de regressão logística é definido por,

$$p_i = \frac{e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}} \quad (6.2)$$

Uma transformação de p_i , denominada transformação logito, é dada por,

$$\lambda_i = \log\left(\frac{p_i}{1 - p_i}\right) = \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij} \quad (6.3)$$

A importância dessa transformação é que λ_i tem muitas das propriedades desejáveis de um modelo de regressão linear. O logito λ_i , é linear em seus parâmetros, pode ser contínuo e pode estar entre $-\infty$ e ∞ , dependendo do limite das variáveis explicativas.

Nesse trabalho, como nosso interesse é voltado para o número de sucessos em n_i ensaios, consideramos que a i -ésima resposta, $(1 \leq i \leq N)$, é uma contagem de y_i sucessos e $n_i - y_i$ fracassos. Associado a cada resposta, existem os valores de m covariáveis $W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{im}$, onde a matriz $W(N \times m)$ é de posto m . Neste caso, assumindo o modelo de regressão logística temos,

$$Y_i \sim \text{Binomial}(n_i, p_i) \quad (6.4)$$

onde p_i é dado em (6.2).

Como já discutimos anteriormente, quando temos covariáveis associadas às observações, o modelo de regressão logística pode não ser o melhor para ajustar os dados devido a presença da variabilidade extra-Binomial. Para resolver este problema, apresentamos na seção 6.2 dois modelos alternativos que englobam no modelo de regressão logística uma fonte da variabilidade extra-Binomial.

6.2 – Modelos para ajustar a variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis

Para modelar a variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis, assumimos para a variável aleatória Y_i , que representa o número de sucessos em n_i ensaios, o modelo Binomial Correlacionado dado pela expressão (3.2) e discutido no capítulo 3. Este modelo como já comentamos, assume que a fonte da variabilidade extra-Binomial é a correlação entre as variáveis binárias $U_{i1}, U_{i2}, \dots, U_{in_i}$ de $Y_i = \sum_{j=1}^{n_i} U_{ij}$. A diferença é que no capítulo 3, analisamos esse modelo sem a presença de covariáveis e assim, assumimos uma mesma probabilidade de sucesso p para todos os ensaios do experimento. Quando temos a presença das covariáveis $W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{im}$, $i = 1, \dots, N$, associadas as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$, as probabilidades de sucesso e de fracasso dos ensaios referentes a essas contagens de sucessos, podem ser diferentes, pois elas dependem dos valores das covariáveis. Assim, o modelo Binomial Correlacionado para Y_i , $i = 1, \dots, N$, na presença de covariáveis é dado por,

$$f(y_i / n_i, \delta, \beta, W_i) = \binom{n_i}{y_i} p_i^{y_i} (1 - p_i)^{n_i - y_i} A_i(y_i, n_i, \delta, \beta, W_i) \quad (6.5)$$

$$\text{onde: } A_i(y_i, n_i, \delta, \beta, W_i) = 1 + \frac{\delta}{2p_i(1-p_i)} [(y_i - n_i p_i)^2 + y_i(2p_i - 1) - n_i p_i^2],$$

$$p_i \text{ é dado em (6.2), } \beta' = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m) \text{ e } W_i = (W_{i1}, \dots, W_{im})$$

Observamos que neste modelo, a correlação intra-classe δ entre as variáveis binárias $U_{i1}, U_{i2}, \dots, U_{im}$ de Y_i , ao contrário das probabilidades de sucesso $p_1, p_2, \dots, p_N$, é homogênea e independente dos valores das covariáveis $W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{im}$, $i = 1, \dots, N$.

Uma outra possibilidade de modelagem é considerar correlações intra-classes diferentes para cada variável Y_i , com covariáveis $W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{im}$, $i = 1, \dots, N$. Neste caso, a função densidade de Y_i , $i = 1, \dots, N$, é dada por,

$$f(y_i / n_i, \delta_i, \beta, W_i) = \binom{n_i}{y_i} p_i^{y_i} (1 - p_i)^{n_i - y_i} A_i(y_i, n_i, \delta_i, \beta, W_i) \quad (6.6)$$

$$\text{onde: } A_i(y_i, n_i, \delta_i, \beta, W_i) = 1 + \frac{\delta_i}{2p_i(1-p_i)} [(y_i - n_i p_i)^2 + y_i(2p_i - 1) - n_i p_i^2]$$

Desta forma, consideramos esses dois modelos, o Binomial Correlacionado com correlações homogêneas e o Binomial Correlacionado com correlações diferentes, para ajustar a variabilidade extra-Binomial na presença de covariáveis. Na análise de dados reais, descrita no capítulo 7, comparamos o ajuste desses modelos com o ajuste do modelo de regressão logística, para verificar se a variabilidade extra-Binomial está presente nos dados.

6.3 – Análise estatística dos modelos

Nesta seção, analisamos os modelos discutidos nas seções 6.1 e 6.2, utilizando os métodos Clássicos e Bayesianos, seguindo os mesmos procedimentos dos capítulos anteriores quando não utilizamos covariáveis. Na seção 6.3.1, apresentamos a análise Clássica dos modelos

de regressão logística e Binomial Correlacionado com correlações homogêneas na presença de covariáveis. Omitimos a análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes, devido ao grande número de parâmetros presentes neste modelo, que acabam dificultando a obtenção dos EMV pelo método de Newton Raphson. Na seção 6.3.2, apresentamos a análise Bayesiana dos três modelos usados para ajustar os dados na presença de covariáveis.

6.3.1 – Análise Clássica dos modelos

Considerando independentes as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$, a função de verossimilhança para o modelo de regressão logística, dado em (6.4), é dada por,

$$L(\beta, W_i) = \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \left(\frac{e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}} \right)^{y_i} \left(\frac{1}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}} \right)^{n_i - y_i} \right]$$

$$= \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{e^{y_i \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{\left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right)^{n_i}} \right] \quad (6.7)$$

onde: $\beta' = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m)$ e $W_i = (W_{i1}, \dots, W_{im})$

Aplicando o logaritmo na expressão (6.7) temos:

$$l(\beta, W_i) = \log \left[L(\beta, W_i) \right] =$$

$$= \log \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{e^{y_i \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{\left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right)^{n_i}} \right] \right\} = \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{e^{y_i \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{\left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right)^{n_i}} \right] \right\}$$

$$= \sum_{i=1}^N \log \binom{n_i}{y_i} + \beta_0 \sum_{i=1}^N y_i + \sum_{i=1}^N \left[y_i \sum_{j=1}^m \beta_j W_{ij} \right] - \sum_{i=1}^N [n_i \log(1 + u_i)] \quad (6.8)$$

onde: $u_i = e^{\beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j W_{ij}}$

Derivando o logaritmo da função de verossimilhança em relação aos parâmetros β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, temos:

$$\frac{\partial l(\beta, W_i)}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N \left[n_i \left(\frac{u_i}{1 + u_i} \right) \right] \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial l(\beta, W_i)}{\partial \beta_j} = \sum_{i=1}^N y_i W_{ij} - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_{ij} \left(\frac{u_i}{1 + u_i} \right) \right]$$

Igualando estas expressões a 0, observamos que as equações não são lineares em relação aos parâmetros $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m$. Assim, utilizamos o método iterativo de Newton Raphson, descrito no capítulo 2, para encontrar os EMV desses parâmetros.

As derivadas de segunda ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação a β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, necessárias para o método de Newton-Raphson são dadas por,

$$\frac{\partial^2 l(\beta, W_i)}{\partial \beta_0^2} = - \sum_{i=1}^N \left[n_i \left(\frac{u_i(1 + u_i) - u_i^2}{(1 + u_i)^2} \right) \right]$$

$$\frac{\partial^2 l(\beta, W_i)}{\partial \beta_j^2} = - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_{ij}^2 \left(\frac{u_i(1 + u_i) - u_i^2}{(1 + u_i)^2} \right) \right]$$

$$\frac{\partial^2 l(\beta, W_i)}{\partial \beta_0 \partial \beta_j} = - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_{ij} \left(\frac{u_i(1 + u_i) - u_i^2}{(1 + u_i)^2} \right) \right]$$

$$\frac{\partial^2 I(\underline{\beta}, \underline{W}_i)}{\partial \beta_j \partial \beta_k} = - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_{ij} W_{ik} \left(\frac{u_i(1+u_i) - u_i^2}{(1+u_i)^2} \right) \right] \quad \text{onde } j \neq k \quad (6.10)$$

Assumindo o modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas na presença de covariáveis, dado em (6.5), e considerando independentes as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$, temos,

$$L(\underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i) = \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \left(\frac{e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}} \right)^{y_i} \left(\frac{1}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}} \right)^{n_i - y_i} A_i(n_i, y_i, \underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i) \right] \quad (6.11)$$

$$= \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} \frac{e^{y_i \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}}{\left(1 + e^{y_i \sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right)^{n_i}} A_i(n_i, y_i, \underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i) \right]$$

onde: $\underline{\beta}$ e $\underline{W}_i$ são dados em (6.7) e $A_i(n_i, y_i, \underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i)$ é dado em (6.5).

Aplicando o logaritmo na expressão (6.11) e desenvolvendo de maneira similar à expressão (6.8), temos,

$$l(\underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i) = \log \left[L(\underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i) \right] =$$

$$= \sum_{i=1}^N \log \binom{n_i}{y_i} + \beta_0 \sum_{i=1}^N y_i + \sum_{i=1}^N \left[y_i \sum_{j=1}^m \beta_j W_{ij} \right] - \sum_{i=1}^N [n_i \log(1+u_i)] + \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[A_i(n_i, y_i, \underline{\delta}, \underline{\beta}, \underline{W}_i) \right] \right\}$$

onde: u_i é dado em (6.8)

$$\begin{aligned}
& e \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left[A_i \left(n_i, y_i, \delta, \beta, W_i \right) \right] \right\} = \\
& = \sum_{i=1}^N \log \left\{ 1 + \frac{\delta(1+u_i)}{2u_i} \left[\left(y_i - n_i \frac{u_i}{1+u_i} \right)^2 + y_i \left(2 \frac{u_i}{1+u_i} - 1 \right) - n_i \left(\frac{u_i}{1+u_i} \right)^2 \right] \right\} \\
& = \sum_{i=1}^N \log \left\{ 1 + \frac{\delta y_i (y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i (1 - n_i) (1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i (n_i - 1)}{2} \right\}
\end{aligned} \tag{6.12}$$

As derivadas de primeira ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação aos parâmetros δ , β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, são dadas por,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \delta} &= \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(y_i - n_i p_i)^2 + y_i (2p_i - 1) - n_i p_i^2}{2p_i (1 - p_i) + \delta [(y_i - n_i p_i)^2 + y_i (2p_i - 1) - n_i p_i^2]} \right\} \\
\frac{\partial l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_0} &= \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N \left[n_i \left(\frac{u_i}{1+u_i} \right) \right] \\
&+ \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\frac{\delta y_i (y_i - 1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i (1 - n_i) + \frac{\delta n_i (n_i - 1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i (y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i (1 - n_i) (1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i (n_i - 1)}{2}} \right\} \\
\frac{\partial l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_j} &= \sum_{i=1}^N y_i W_{ij} - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_{ij} \left(\frac{u_i}{1+u_i} \right) \right] \\
&+ \sum_{i=1}^N \left\{ W_{ij} \frac{\frac{\delta y_i (y_i - 1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i (1 - n_i) + \frac{\delta n_i (n_i - 1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i (y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i (1 - n_i) (1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i (n_i - 1)}{2}} \right\}
\end{aligned} \tag{6.13}$$

Como as expressões dadas em (6.13) não são lineares em relação aos parâmetros, utilizamos também neste modelo o método iterativo de Newton Raphson para encontrar os EMV de δ , β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$.

Neste modelo, as derivadas de segunda ordem são dadas por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \delta^2} &= - \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{(y_i - n_i p_i)^2 + y_i(2p_i - 1) - n_i p_i^2}{2p_i(1 - p_i) + \delta[(y_i - n_i p_i)^2 + y_i(2p_i - 1) - n_i p_i^2]} \right]^2 \right\} \\ \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_0^2} &= - \sum_{i=1}^N \left[n_i \left(\frac{u_i(1 + u_i) - u_i^2}{(1 + u_i)^2} \right) \right] \\ &+ \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[-2 + \frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1 - n_i) + \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1 - n_i)(1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2}} \right\} \\ &- \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{\frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[2(1 + u_i) - \frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1 - n_i) + \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1 - n_i)(1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2}} \right]^2 \right\} \\ \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_j^2} &= - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_{ij}^2 \left(\frac{u_i(1 + u_i) - u_i^2}{(1 + u_i)^2} \right) \right] \\ &+ \sum_{i=1}^N \left\{ W_{ij}^2 \frac{\frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[-2 + \frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1 - n_i) + \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1 - n_i)(1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2}} \right\} \\ &- \sum_{i=1}^N \left\{ W_{ij}^2 \left[\frac{\frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[2(1 + u_i) - \frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1 - n_i) + \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i - 1)}{2} \left[\frac{(1 + u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1 - n_i)(1 + u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i - 1)}{2}} \right]^2 \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_0 \partial \beta_j} = \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_j \partial \beta_0} \\
& = - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_y \left(\frac{u_i(1+u_i) - u_i^2}{(1+u_i)^2} \right) \right] \\
& + \sum_{i=1}^N \left\{ W_y \frac{\frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[-2 + \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1-n_i) + \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2}} \right\} \\
& - \sum_{i=1}^N \left\{ W_y \left[\frac{\frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1-n_i) + \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2}} \right]^2 \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_j \partial \beta_k} = \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_k \partial \beta_j} \\
& = - \sum_{i=1}^N \left[n_i W_y W_{ik} \left(\frac{u_i(1+u_i) - u_i^2}{(1+u_i)^2} \right) \right] \\
& + \sum_{i=1}^N \left\{ W_y W_{ik} \frac{\frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[-2 + \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1-n_i) + \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2}} \right\} \\
& - \sum_{i=1}^N \left\{ W_y W_{ik} \left[\frac{\frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[\delta y_i(1-n_i) + \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2}} \right]^2 \right\}
\end{aligned}$$

onde: $j \neq k$.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \delta \partial \beta_0} = \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_0 \partial \delta} \\
& = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\frac{y_i(y_i-1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[y_i(1-n_i) + \frac{n_i(n_i-1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2}} \right\} \\
& - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\delta \left[\frac{y_i(y_i-1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[y_i(1-n_i) + \frac{n_i(n_i-1)}{2} \right] \right] \left[\frac{y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{n_i(n_i-1)}{2} \right]}{\left[1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2} \right]^2} \right\} \\
& \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \delta \partial \beta_j} = \frac{\partial^2 l(\delta, \beta, W_i)}{\partial \beta_j \partial \delta} \\
& = \sum_{i=1}^N \left\{ W_y \frac{\frac{y_i(y_i-1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[y_i(1-n_i) + \frac{n_i(n_i-1)}{2} \right]}{1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2}} \right\} \\
& - \sum_{i=1}^N \left\{ W_y \frac{\delta \left[\frac{y_i(y_i-1)}{2} \left[2(1+u_i) - \frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + u_i \left[y_i(1-n_i) + \frac{n_i(n_i-1)}{2} \right] \right] \left[\frac{y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{n_i(n_i-1)}{2} \right]}{\left[1 + \frac{\delta y_i(y_i-1)}{2} \left[\frac{(1+u_i)^2}{u_i} \right] + \delta y_i(1-n_i)(1+u_i) + u_i \frac{\delta n_i(n_i-1)}{2} \right]^2} \right\}
\end{aligned}$$

(6.14)

Utilizamos o critério de mínima informação (AIC) , discutido no capítulo 5, para uma discriminação Clássica dos modelos na presença de covariáveis.

6.3.2 – Análise Bayesiana dos modelos

Para o modelo de regressão logística, dado em 6.4, assumimos as seguintes distribuições a priori para os parâmetros:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \beta_0 \sim N(\mu_0, \sigma_0^2); \quad \mu_0, \sigma_0^2 \text{ conhecidos} \\ \text{(ii)} \quad & \beta_j \sim N(\mu_j, \sigma_j^2); \quad \mu_j, \sigma_j^2 \text{ conhecidos} \end{aligned} \tag{6.15}$$

onde: $j = 1, \dots, m$

Considerando que as distribuições a priori para os parâmetros são independentes, a função densidade conjunta a priori para $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m$ é dada por,

$$\pi(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\beta_0 - \mu_0)^2\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_1^2}(\beta_1 - \mu_1)^2\right\} \dots \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_m^2}(\beta_m - \mu_m)^2\right\} \tag{6.16}$$

Combinando as expressões dadas em (6.7) e (6.16), encontramos a distribuição a posteriori conjunta para $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m$, dada por,

$$\begin{aligned} \pi(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m / W_i, y, n) & \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\beta_0 - \mu_0)^2\right\} \dots \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_m^2}(\beta_m - \mu_m)^2\right\} \\ & \exp\left\{\beta_0 \sum_{i=1}^N y_i + \sum_{i=1}^N \left[y_i \sum_{j=1}^m \beta_j W_{ij} \right] - \sum_{i=1}^N \left[n_i \log \left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right) \right] \right\} \end{aligned} \tag{6.17}$$

onde: $W_i = (W_{i1}, \dots, W_{im})$, $y = (y_1, \dots, y_N)$ e $n = (n_1, \dots, n_N)$.

Logo, as distribuições condicionais a posteriori para β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, necessárias para o uso dos métodos MCMC, são dadas por,

$$\pi\left(\beta_0 / \beta_1, \dots, \beta_m, W_i, y, n\right) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\beta_0 - \mu_0)^2\right\} \exp\left\{\beta_0 \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N \left[n_i \log \left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right) \right]\right\}$$

$$\pi\left(\beta_j / \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{j-1}, \beta_{j+1}, \dots, \beta_m, W_i, y, n\right) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_j^2}(\beta_j - \mu_j)^2\right\} \exp\left\{\beta_j \sum_{i=1}^N y_i W_{ij} - \sum_{i=1}^N \left[n_i \log \left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right) \right]\right\}$$

(6.18)

Para o modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas, dado em (6.5), assumimos para os parâmetros β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, as mesmas distribuições a priori dadas em (6.15). Com relação ao parâmetro de correlação δ , assumimos uma distribuição a priori Uniforme(a, b), onde a e b são conhecidos.

Assumindo independência a priori para os parâmetros δ , β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, temos que a função densidade conjunta a priori do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas é proporcional a do modelo de regressão logística, dada em (6.16). Assim, combinando as expressões (6.11) e (6.16), encontramos a distribuição a posteriori conjunta para δ , β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, dada por,

$$\pi\left(\delta, \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m / W_i, y, n\right) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\beta_0 - \mu_0)^2\right\} \dots \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_m^2}(\beta_m - \mu_m)^2\right\}$$

$$\exp\left\{\beta_0 \sum_{i=1}^N y_i + \sum_{i=1}^N \left[y_i \sum_{j=1}^m \beta_j W_{ij} \right] - \sum_{i=1}^N \left[n_i \log \left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}} \right) \right] + \sum_{i=1}^N \left[\log \left(A_i \left(n_i, y_i, \delta, \beta, W_i \right) \right) \right]\right\}$$

(6.19)

onde: $W_i = (W_{i1}, \dots, W_{im})$, $y = (y_1, \dots, y_N)$ e $n = (n_1, \dots, n_N)$.

A partir de (6.19), encontramos as distribuições condicionais a posteriori para δ , β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, que são dadas por,

$$\begin{aligned}
& \pi\left(\delta / \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m, \underset{\sim}{W}_i, \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) \propto \exp\left\{\sum_{i=1}^N \left[\log\left(A_i\left(n_i, y_i, \delta, \underset{\sim}{\beta}, \underset{\sim}{W}_i\right)\right)\right]\right\} \\
& \pi\left(\beta_0 / \delta, \beta_1, \dots, \beta_m, \underset{\sim}{W}_i, \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\beta_0 - \mu_0)^2\right\} \\
& \exp\left\{\beta_0 \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N n_i \log\left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}\right) + \sum_{i=1}^N \left[\log\left(A_i\left(n_i, y_i, \delta, \underset{\sim}{\beta}, \underset{\sim}{W}_i\right)\right)\right]\right\} \\
& \pi\left(\beta_j / \delta, \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{j-1}, \beta_{j+1}, \dots, \beta_m, \underset{\sim}{W}_i, \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_j^2}(\beta_j - \mu_j)^2\right\} \\
& \exp\left\{\beta_j \sum_{i=1}^N y_i W_{ij} - \sum_{i=1}^N n_i \log\left(1 + e^{\sum_{j=0}^m \beta_j W_{ij}}\right) + \sum_{i=1}^N \left[\log\left(A_i\left(n_i, y_i, \delta, \underset{\sim}{\beta}, \underset{\sim}{W}_i\right)\right)\right]\right\}
\end{aligned} \tag{6.20}$$

Para o modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes, dado em (6.6), assumimos para os parâmetros β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$, as mesmas distribuições a priori dadas em (6.15) e consideramos distribuições a priori Uniforme(a, b), com a e b conhecidos, para δ_i , $i = 1, \dots, N$.

Desenvolvendo uma análise Bayesiana para este modelo seguindo o mesmo procedimento usado nos modelos anteriores, encontramos as distribuições condicionais a posteriori para os parâmetros δ_i , $i = 1, \dots, N$, β_0 e β_j , $j = 1, \dots, m$. Para β_0 e β_j , as distribuições condicionais são as mesmas dadas em (6.20), apenas substituindo δ por δ_i . Com relação a δ_i , $i = 1, \dots, N$, a distribuição condicional é dada por,

$$\pi\left(\delta_i / \delta_1, \dots, \delta_{i-1}, \delta_{i+1}, \dots, \delta_N, \beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m, \underset{\sim}{W}_i, \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) \propto \exp\left\{\log\left[A_i\left(n_i, y_i, \delta, \underset{\sim}{\beta}, \underset{\sim}{W}_i\right)\right]\right\} \tag{6.21}$$

Observando as distribuições condicionais dadas em (6.18), (6.20) e (6.21), verificamos que todas elas não apresentam a formas de distribuições conhecidas. Portanto, utilizamos o algoritmo Metropolis Hastings para realizar a simulação dos parâmetros em todos os modelos considerados neste trabalho na presença de covariáveis.

Utilizamos o fator de Bayes, discutido no capítulo 5, para uma discriminação Bayesiana dos modelos na presença de covariáveis. Escolhemos a aproximação de Monte Carlo, dada em (5.5), para estimar a verossimilhança marginal dos modelos. Para os modelos de regressão logística, Binomial Correlacionado com correlações homogêneas e Binomial Correlacionado com correlações diferentes, representados respectivamente por M_5 , M_6 e M_7 , as estimativas de Monte Carlo da verossimilhança marginal são dadas por,

1) Modelo de regressão logística

$$\hat{p}(y/M_5) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} (p_i^{(s)})^{y_i} (1-p_i^{(s)})^{n_i-y_i} \right] \right\} \quad (6.22)$$

2) Modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas

$$\hat{p}(y/M_6) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} (p_i^{(s)})^{y_i} (1-p_i^{(s)})^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta_i^{(s)}}{2p_i^{(s)}(1-p_i^{(s)})} \left[(y_i - n_i p_i^{(s)})^2 + y_i(2p_i^{(s)} - 1) - n_i(p_i^{(s)})^2 \right] \right\} \right] \right\} \quad (6.23)$$

3) Modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes

$$\hat{p}(y/M_7) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left\{ \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} (p_i^{(s)})^{y_i} (1-p_i^{(s)})^{n_i-y_i} \left\{ 1 + \frac{\delta_i^{(s)}}{2p_i^{(s)}(1-p_i^{(s)})} \left[(y_i - n_i p_i^{(s)})^2 + y_i(2p_i^{(s)} - 1) - n_i(p_i^{(s)})^2 \right] \right\} \right] \right\} \quad (6.24)$$

onde S é o tamanho da amostra obtida por simulação.

Capítulo 7: Aplicações Numéricas

Neste capítulo, apresentamos três exemplos numéricos para ilustrar a metodologia proposta nos capítulos anteriores desta dissertação.

Nas seções 7.1 e 7.2, analisamos dois conjuntos de dados de contagens de sucessos, onde não temos a presença de covariáveis. Assim, para verificar se a variabilidade extra-Binomial está presente nos dados, utilizamos nesses exemplos os modelos discutidos nos capítulos 2, 3 e 4 deste trabalho. Na primeira aplicação, descrita na seção 7.1, analisamos dados de genética, e na segunda aplicação, descrita na seção 7.2, analisamos dados de um jogador da liga americana de basquete.

Na seção 7.3, apresentamos um exemplo onde covariáveis estão associadas às observações. Os dados analisados se originam de um experimento agrônomico e a metodologia proposta no capítulo 6 é utilizada.

Os resultados Clássicos foram obtidos utilizando o “software” Sas e os resultados Bayesianos utilizando o “software” Matlab.

7.1 – Primeira aplicação: dados genéticos

Nesta aplicação, consideramos os dados genéticos introduzidos por Skellam (1948), onde o objetivo é a associação secundária de cromossomos numa espécie de couve flor e repolho, chamada Brassica.

As unidades observadas são 337 núcleos, sendo que em cada núcleo existem 3 pares de cromossomos durante a meiose. Cada par pode ou não mostrar uma associação entre esses cromossomos, ou seja em cada núcleo podemos ter 0, 1, 2 ou 3 pares de cromossomos associados. As frequências observadas com 0, 1, 2 e 3 pares associados nesses núcleos são dadas por 32, 103, 122 e 80, respectivamente.

Observamos que neste exemplo, a variável Y_i representa o número de pares de cromossomos associados no i -ésimo núcleo, $i = 1, \dots, 337$. Assumimos para Y_i os modelos

Binomial, Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais e apresentamos os resultados obtidos na seções 7.1.1, 7.1.2, 7.1.3 e 7.1.4, respectivamente. A seção 7.1.5 é dedicada a uma comparação de todos os modelos com base nos critérios discutidos no capítulo 5.

7.1.1 – Aplicação do modelo Binomial

No apêndice D, descrevemos uma análise estatística para o modelo Binomial, utilizando os métodos Clássicos e Bayesianos. Com base nessas análises, aplicamos o modelo Binomial para os dados genéticos e nesta seção apresentamos os resultados obtidos.

Assumindo uma distribuição Binomial($3, p$) para Y_i , $i = 1, \dots, 337$, estamos considerando que a probabilidade de associação dos cromossomos é constante para qualquer par em algum núcleo.

A tabela 7.1 apresenta os resultados da análise Clássica, onde temos a estimativa de máxima verossimilhança do parâmetro p e seu respectivo intervalo de confiança obtido por aproximação assintótica.

Tabela 7.1 – Resultados da análise Clássica do modelo Binomial para os dados genéticos

Parâmetro	EMV	Int. Conf. (95%)
p	0,5806	(0,5502 ; 0,6110)

A partir de EMV do parâmetro p , dado na tabela 7.1, encontramos a variabilidade esperada para os dados genéticos assumindo o modelo Binomial, dada por $n_i \hat{p}(1 - \hat{p}) = 0,7305$.

Contudo, essa variabilidade esperada apresenta um valor menor do que a variabilidade

observada, dada por $\sum_{i=1}^N \frac{(y_i - n_i \hat{p})^2}{N} = 0,8588$. Este fato motiva o uso de outros modelos para

ajustar os dados genéticos.

Na tabela 7.2 encontramos as quantidades a posteriori de interesse (média, desvio padrão e intervalo de credibilidade(95%)) para o parâmetro p obtidos na análise Bayesiana.

Tabela 7.2 – Sumários a posteriori do modelo Binomial para os dados genéticos

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)
p	0,5805	0,0155	(0,5501 ; 0,6108)

Comparando os resultados Clássicos e Bayesianos do modelo Binomial, descritos nas tabelas 7.1 e 7.2, respectivamente, observamos que as estimativas pontuais e por intervalo do parâmetro p praticamente coincidiram.

7.1.2 – Aplicação do modelo Beta-Binomial

Na tabela 7.3 apresentamos os resultados da análise Clássica do modelo Beta-Binomial, considerando os dados genéticos. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta na seção 2.2 deste trabalho.

Tabela 7.3 – Resultados da análise Clássica do modelo Beta-Binomial para os dados genéticos.

Parâmetro	EMV	Int. Conf. (95%)
α	6,1198	(0,9563 ; 11,2833)
β	4,4186	(0,6945 ; 8,1427)

Na análise Bayesiana do modelo Beta-Binomial para os dados genéticos, assumimos as distribuições a priori dadas em (2.15) com $a_1 = 90$, $b_1 = 15$, $a_2 = 70$ e $b_2 = 16$.

Baseado nas distribuições condicionais a posteriori dadas em (2.18), utilizamos o algoritmo Metropolis-Hastings para a simulação dos parâmetros. Visando diminuir a autocorrelação das amostras geradas por esse algoritmo, geramos várias cadeias com grande quantidade de pontos e selecionamos sistematicamente valores dentro de cada cadeia, formando novas amostras. Foram geradas 5 cadeias de 8000 pontos para cada parâmetro. Para cada cadeia

desprezamos os 4000 valores iniciais e selecionamos dos restantes, 1 em cada 20 valores, formando 5 amostras com 200 valores.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros α e β :

$$\alpha = [4,5 \quad 5,0 \quad 5,5 \quad 6,0 \quad 6,5]$$

$$\beta = [3 \quad 3,5 \quad 4 \quad 4,5 \quad 5]$$

A tabela 7.4 nos mostra os resumos a posteriori dos parâmetros α e β . Apresentamos para cada parâmetro, a média, o desvio padrão, o intervalo de credibilidade(95%), o fator de redução e escala (GR) do critério de convergência de Gelman & Rubin e a porcentagem de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings.

Tabela 7.4 – Sumários a posteriori do modelo Beta-Binomial para os dados genéticos.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
α	6,0275	0,4865	(5,0826 ; 6,9582)	1,0001	54,38
β	4,3629	0,3788	(3,6652 ; 5,1431)	1,0001	51,65

Comparando os resultados das tabelas 7.3 e 7.4, observamos que as médias a posteriori de α e β ficaram bem próximas dos EMV desses parâmetros, ao passo que os intervalos de credibilidade de α e β apresentaram uma precisão maior que os intervalos de confiança, obtidos por aproximação assintótica.

Para ambos os parâmetros tivemos uma razoável taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Outra forma de verificarmos a convergência dos parâmetros, é através dos gráficos dados a seguir que nos mostram as trajetórias das cadeias ao longo das iterações.

Figura 3.1 - Iterações para α

Figura 3.2 - Iterações para β

Observando as figuras 3.1 e 3.2, verificamos que após um período inicial as diferentes cadeias se aproximam de um ponto de equilíbrio.

A seguir apresentamos as figuras 3.3 e 3.4, que são histogramas referentes aos 1000 valores obtidos após a seleção das amostras dos parâmetros α e β . Esses histogramas representam aproximações das densidades a posteriori marginais desses parâmetros.

Figura 3.3 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de α

Figura 3.4 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β

7.1.3 – Aplicação do modelo Binomial Correlacionado

Na tabela 7.5 apresentamos os resultados da análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado, para os dados genéticos. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta na seção 3.2 deste trabalho.

Tabela 7.5 – Resultados da análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado para os dados genéticos.

Parâmetro	EMV	Int. Conf. (95%)
p	0,5809	(0,5480 ; 0,6139)
δ	0,0883	(0,0214 ; 0,1553)

Na análise Bayesiana do modelo Binomial Correlacionado para os dados genéticos, assumimos inicialmente as distribuições a priori dadas em (3.8) com $a = 0$, $b = 0,15$, $c = 30$ e

$d = 22$. Posteriormente, assumimos as distribuições a priori dadas em (3.12) com $a = 0$, $b = 0,15$, $c = 0$ e $d = 1$.

Para a simulação dos parâmetros, utilizamos as distribuições condicionais a posteriori dadas em (3.11) e (3.14). Em ambos os casos geramos 4 cadeias de 10000 pontos para cada parâmetro, através do algoritmo Metropolis-Hastings. Para cada cadeia descartamos os 5000 valores iniciais e consideramos as iterações 5010.^a, 5020.^a, ..., 10000.^a, totalizando assim uma amostra final de 2000 pontos.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros δ e p :

$$p = [0,5 \quad 0,54 \quad 0,58 \quad 0,62]$$

$$\delta = [0,1 \quad 0,2 \quad 0,3 \quad 0,4]$$

Apresentamos nas tabelas 7.6 e 7.7 os resultados obtidos na análise Bayesiana do modelo Binomial Correlacionado, considerando as duas estratégias descritas na seção 3.3.

Tabela 7.6 – Sumários a posteriori do modelo Binomial Correlacionado para os dados genéticos, considerando a primeira estratégia.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
p	0,5810	0,0159	(0,5496 ; 0,6112)	1,0001	95,21
δ	0,0865	0,0313	(0,0246 ; 0,142)	1,0000	65,86

Tabela 7.7 – Sumários a posteriori do modelo Binomial Correlacionado para os dados genéticos, considerando a segunda estratégia.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
p	0,5813	0,0167	(0,5472 ; 0,6133)	1,0000	94,82
δ	0,0872	0,0311	(0,024 ; 0,141)	1,0000	65,37

Observamos que as tabelas 7.6 e 7.7 apresentam resultados bem parecidos, indicando que não existe diferenças significativas entre as duas estratégias de distribuições a priori para os parâmetros δ e p , quando utilizamos os dados genéticos. Comparando os resultados das tabelas 7.6 e 7.7 com os resultados da análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado dados na tabela 7.5, observamos que as estimativas pontuais e por intervalo ficaram bem próximas. Outra característica interessante é que tanto o intervalo de confiança como os dois intervalos de

credibilidade obtidos para o parâmetro δ , não contém o número 0, o que é uma forte evidência que existe uma correlação positiva entre as variáveis binárias de Y_i .

Para os parâmetros δ e p tivemos uma excelente taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Nas figuras 3.5 e 3.6 apresentamos as trajetórias das cadeias ao longo das iterações dos parâmetros e nas figuras 3.7 e 3.8 apresentamos aproximações das densidades a posteriori marginais de δ e p , considerando a primeira estratégia.

Figura 3.5 – Iterações para δ

Figura 3.6 – Iterações para p

Figura 3.7 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de δ

Figura 3.8 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de p

7.1.4 – Aplicação do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais

Na tabela 7.8 apresentamos os resultados da análise Clássica do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais, considerando os dados genéticos. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta na seção 4.2 deste trabalho.

Tabela 7.8 – Resultados da análise Clássica do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais para os dados genéticos.

Parâmetro	EMV	Int. Conf. (95%)
θ_1	0,5138	(0,3738 ; 0,6538)
θ_2	0,8941	(0,3644 ; 1)
π	0,8242	(0,2911 ; 1)

Na análise Bayesiana do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais para os dados genéticos, assumimos as distribuições a priori dadas em (4.10) com $a_1 = 30$, $b_1 = 30$, $a_2 = 20$, $b_2 = 2$, $c = 18$ e $d = 4$.

Baseados nas distribuições condicionais a posteriori dadas em (4.13), utilizamos o algoritmo Gibbs Sampling para a simulação dos parâmetros. Para cada parâmetro geramos 5 cadeias de 10000 pontos, sendo que para cada cadeia descartamos as primeiras 5000 iterações e consideramos as iterações 5040.^a, 5080.^a, ..., 10000.^a, totalizando assim uma amostra final de 625 pontos.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros θ_1 , θ_2 e π :

$$\theta_1 = [0,1 \quad 0,3 \quad 0,5 \quad 0,7 \quad 0,9]$$

$$\theta_2 = [0,1 \quad 0,3 \quad 0,5 \quad 0,7 \quad 0,9]$$

$$\pi = [0,1 \quad 0,3 \quad 0,5 \quad 0,7 \quad 0,9]$$

Apresentamos nas tabela 7.9 os resultados obtidos na análise Bayesiana do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais.

Tabela 7.9 – Sumários a posteriori do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais para os dados genéticos.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR
θ_1	0,5162	0,0237	(0,4675 ; 0,5611)	1,0005
θ_2	0,9053	0,0486	(0,7996 ; 0,9825)	1,0002
π	0,8341	0,0526	(0,7097 ; 0,9236)	1,0012

Comparando os resultados Clássicos e Bayesianos dados nas tabelas 7.8 e 7.9, respectivamente, observamos que as estimativas pontuais de θ_1 , θ_2 e π ficaram bem próximas,

ao passo que os intervalos de credibilidade desses parâmetros apresentaram uma precisão maior que os intervalos de confiança, obtidos por aproximação assintótica.

Para os parâmetros θ_1 , θ_2 e π a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Nas figuras 3.9, 3.10 e 3.11 apresentamos as trajetórias das cadeias ao longo das iterações dos parâmetros e nas figuras 3.12, 3.13 e 3.14 apresentamos aproximações das densidades a posteriori marginais de θ_1 , θ_2 e π .

Figura 3.9 – Iterações para θ_1

Figura 3.10 – Iterações para θ_2

Figura 3.11 – Iterações para π

Figura 3.12 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de θ_1

Figura 3.13 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de θ_2

Figura 3.14 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de π

7.1.5 – Comparação dos modelos

Para uma discriminação Clássica dos modelos Binomial, Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, utilizamos o critério de mínima informação (AIC), discutido na seção 5.1.

Apresentamos na tabela 7.10 os resultados do AIC obtidos com os dados genéticos.

Tabela 7.10 – Discriminação Clássica dos modelos para os dados genéticos

Modelo	AIC
Binomial	882,7731
Beta-Binomial	877,6259
Binomial Correlacionado	877,4859
Mistura de 2 distribuições Binomiais	878,8692

Observamos que não existe diferenças significativas entre os valores do critério de mínima informação dos modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, ao passo que esses valores foram inferiores ao AIC obtido considerando o modelo Binomial. Assim, na análise Clássica, os modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais tiveram um melhor ajuste dos dados genéticos do que o modelo Binomial, indicando a presença da variabilidade extra-Binomial nesse conjunto de dados.

A discriminação Bayesiana dos modelos usados para ajustar os dados genéticos foi baseada na metodologia proposta na seção 5.2 deste trabalho, que se refere a verossimilhança marginal e ao fator de Bayes.

Para o modelo Binomial, determinamos o valor exato da verossimilhança marginal utilizando a expressão dada em (5.12). O valor encontrado foi $P\left(\frac{y}{M_1}\right) = 0,2149 \times 10^{-192}$.

Com relação ao modelo Beta-Binomial, aproximamos a verossimilhança marginal utilizando o estimador de Monte Carlo dado na expressão (5.6) e o estimador de Laplace dado na expressão (5.10). As estimativas encontradas foram: $\hat{P}\left(\frac{y}{M_2}\right) = 1,4361 \times 10^{-190}$ (Monte Carlo) e $\hat{I}_{M_2} = 0,7628 \times 10^{-190}$ (Laplace).

Encontramos estimativas de Monte Carlo para a verossimilhança marginal do modelo Binomial Correlacionado, considerando as duas estratégias discutidas na seção 3.3. Os resultados obtidos utilizando a expressão dada em (5.7) foram: $\hat{P}\left(y/M_{31}\right) = 1,1058 \times 10^{-190}$ (primeira estratégia) e $\hat{P}\left(y/M_{32}\right) = 1,0839 \times 10^{-190}$ (segunda estratégia).

Para o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais, encontramos uma estimativa de Monte Carlo da verossimilhança marginal utilizando a expressão dada em (5.8). O valor encontrado foi $\hat{P}\left(y/M_4\right) = 1,6122 \times 10^{-190}$.

Comparando as estimativas da verossimilhança marginal encontradas para os modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, verificamos que todas elas ficaram bem próximas, indicando que na análise Bayesiana esses modelos tiveram um comportamento semelhante no ajuste dos dados genéticos.

Utilizamos o fator de Bayes dado em (5.4), para comparar cada uma dessas estimativas da verossimilhança marginal com o valor da verossimilhança marginal exata do modelo Binomial. Na tabela 7.11 apresentamos os resultados obtidos, considerando em todos os casos a verossimilhança marginal exata do modelo Binomial como o denominador do fator de Bayes.

Tabela 7.11 – Discriminação Bayesiana dos modelos para os dados genéticos

Modelo Comparados	Fator de Bayes
Beta-Binomial (MCMC) x Binomial	668,26
Beta-Binomial (Laplace) x Binomial	354,95
Binomial Correl. (Estratégia 1) x Binomial	514,56
Binomial Correl. (Estratégia 2) x Binomial	504,37
Mistura de 2 dist. Binomiais x Binomial	750,21

Observamos que em todos os casos, o fator de Bayes apresentou valores maiores que 300. Assim, de acordo com a tabela 5.1 (interpretação do fator de Bayes), temos fortes evidências contra o modelo Binomial no ajuste dos dados genéticos.

Aplicamos também para este conjunto de dados o teste de hipótese descrito no capítulo 5, que compara os modelo Binomial e Beta Binomial via fator de Bayes.

Apresentamos na tabela 7.12, para vários valores do parâmetro ω , as respectivas estimativas do parâmetro ξ , da verossimilhança marginal dada em 5.13, do fator de Bayes dado em 5.11 e do inverso do fator de Bayes.

Tabela 7.12 – Fator de Bayes considerando vários valores de ω para os dados genéticos.

ω	$\hat{\xi}$	I_{n_i}	$B(\omega)$	$B(\omega)^{-1}$
0,05	0,5809	$4,0425 \times 10^{-192}$	0,0532	18,811
0,1	0,5807	$8,263 \times 10^{-192}$	0,0260	38,451
0,15	0,5801	$3,843 \times 10^{-192}$	0,0559	17,883
0,2	0,5793	$6,432 \times 10^{-193}$	0,3341	2,9929
0,25	0,5784	$5,2302 \times 10^{-194}$	4,1088	0,2434
0,3	0,5774	$2,5357 \times 10^{-195}$	84,748	0,0118

Observamos que para $\omega=0,1$ temos $B(\omega)^{-1}$ igual à 38,454, o que sugere uma forte evidência contra o modelo Binomial. Para todos os valores de ω testados entre 0,05 e 0,2, tivemos valores de $B(\omega)^{-1}$ maiores do que 3, obtendo assim evidências favoráveis ao modelo Beta-Binomial. Somente quando ω é maior do que 0,3, a hipótese alternativa do modelo Beta-Binomial torna-se menos favorável que a distribuição Binomial. Contudo, no geral, concluímos que a probabilidade de associação entre os pares de cromossomos parece variar de núcleo para núcleo, ou seja há evidências para se rejeitar a hipótese $H_0 : \omega = 0$ (distribuição Binomial).

7.2 – Segunda aplicação: dados de um jogador de basquete

Estes dados, analisados por Hsiao (1994), se referem ao número de acertos y_i num total de n_i tentativas durante o i -ésimo jogo do jogador Vinnie Johnson da liga americana de basquete. Temos os dados de 380 jogos do jogador, que foram partidas disputadas entre as temporadas de 1985 e 1989.

Numa análise prévia dos dados, observamos que Vinnie Johnson parece ter maior sucesso em alguns jogos do que em outros, o que sugere uma probabilidade de acerto não homogênea de jogo para jogo. Neste caso, um modelo Binomial com uma mesma probabilidade de sucesso, não seria o modelo mais correto para ajustar a variabilidade de jogo para jogo.

Para verificar se a variabilidade extra-Binomial está de fato presente nos dados, assumimos para a variável Y_i (número de acertos em n_i tentativas durante o i -ésimo jogo), $i = 1, \dots, 380$, os modelos Binomial, Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas

distribuições Binomiais. Os resultados Clássicos e Bayesianos obtidos para cada um desses modelos são dados nas seções 7.2.1 e 7.2.2, respectivamente.

Apresentamos na tabela 7.13 os dados dos 380 jogos do Vinnie Johnson, onde temos o número de arremessos por jogo (n_i), o número de acertos por jogo (y_i) e a frequência que cada par de observação (n_i, y_i) ocorre. Por exemplo, o primeiro par de observação, $n_i = 1$ e $y_i = 0$, aparece com frequência 1, indicando que dos 380 jogos em apenas 1 tivemos $n_i = 1$ e $y_i = 0$.

Tabela 7.13 – Dados do jogador de basquete Vinnie Johnson.

n_i	1	3	3	3	4	4	4	5	5	5	6	6	6	6	6	7	7
y_i	0	0	1	2	0	1	2	0	1	2	0	1	2	3	4	1	2
Freq	1	3	2	1	3	3	1	3	6	2	1	3	2	1	1	3	5
n_i	7	7	8	8	8	8	8	8	9	9	9	9	9	9	9	10	10
y_i	3	4	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	2	3	4
Freq	6	2	1	8	5	5	1	1	2	4	7	1	4	1	3	10	9
n_i	10	10	10	10	10	11	11	11	11	11	11	11	11	11	12	12	12
y_i	5	6	7	8	9	1	2	3	4	5	6	7	8	3	4	5	6
Freq	7	3	2	1	1	1	1	6	7	6	6	3	1	3	6	7	5
n_i	12	13	13	13	13	13	13	13	14	14	14	14	14	14	14	14	15
y_i	7	3	4	5	6	7	8	9	3	4	5	6	7	8	9	5	6
Freq	8	2	4	8	7	7	4	3	1	4	2	10	7	5	2	1	2
n_i	15	15	15	15	16	16	16	16	16	16	16	16	16	16	16	17	17
y_i	7	8	9	10	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	6	7	8
Freq	10	2	5	1	1	1	2	4	6	7	9	6	3	1	2	3	5
n_i	17	17	17	17	18	18	18	18	18	19	19	19	19	19	19	20	20
y_i	9	10	11	6	7	8	9	10	12	8	10	11	12	13	9	10	12
Freq	3	5	1	1	3	2	4	3	1	1	2	1	2	1	5	3	2
n_i	21	21	21	21	21	21	22	22	22	22	23	23	24	25	25		
y_i	7	8	9	10	11	13	1	2	1	1	2	1	1	1	1		
Freq	1	1	1	1	1	2	1	2	1	1	2	1	1	1	1		

7.2.1 – Resultados da análise Clássica

Na tabela 7.14 apresentamos os resultados das análises Clássicas dos modelos Binomial, Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, considerando os dados do jogador Vinnie Johnson. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta no decorrer da dissertação.

Tabela 7.14 – Resultados das análises Clássicas dos modelos para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Modelo	Parâmetro	EMV	IC (95%)
Binomial	p	0,4342	(0,4201 ; 0,4482)
Beta	α	12,1002	(6,7261 ; 17,4743)
Binomial	β	15,9106	(8,9067 ; 22,9145)
Binomial	δ	0,0179	(0,0067 ; 0,0292)
Correlacionado	p	0,4282	(0,4120 ; 0,4445)
Mistura de 2	θ_1	0,073	(0,0366 ; 0,1093)
Distribuições	θ_2	0,4594	(0,4444 ; 0,4744)
Binomiais	π	0,0517	(0,0231 ; 0,0803)

Para discriminar os modelos na análise Clássica, considerando os dados do jogador Vinnie Johnson, utilizamos o critério de mínima informação (AIC), dado na seção 5.1, e apresentamos os resultados obtidos na tabela 7.15.

Tabela 7.15 – Discriminação Clássica dos modelos para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Modelo	AIC
Binomial	1621
Beta-Binomial	1586,9
Binomial Correlacionado	1606,3
Mistura de 2 distribuições Binomiais	1519

De acordo com a tabela 7.15, observamos que os modelos Beta Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais apresentaram AIC inferiores ao do modelo Binomial, comprovando a presença da variabilidade extra-Binomial nos dados do jogador Vinnie Johnson. Por ter apresentado o menor AIC e com diferenças significativas para os AIC's dos modelos Beta-Binomial e Binomial Correlacionado, o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais foi escolhido como o melhor modelo para ajustar esses dados na análise Clássica.

7.2.2 – Resultados da análise Bayesiana

Na tabela 7.16 apresentamos os resultados da análise Bayesiana do modelo Binomial, considerando os dados do jogador Vinnie Johnson. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta no apêndice 4 deste trabalho.

Tabela 7.16 – Sumários a posteriori do modelo Binomial para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)
p	0,4342	0,007152	(0,4202 ; 0,4482)

Comparando os resultados da tabela 7.16 com os resultados Clássicos do modelo Binomial dados na tabela 7.14, observamos que as estimativas pontuais e por intervalo do parâmetro p praticamente coincidiram.

Na análise Bayesiana do modelo Beta-Binomial para os dados do jogador Vinnie Johnson, assumimos as distribuições a priori dadas em (2.15) com $\alpha_1 = 140$, $b_1 = 12$, $\alpha_2 = 130$ e $b_2 = 8$.

Baseados nas distribuições condicionais a posteriori dadas em (2.18), utilizamos o algoritmo Metropolis-Hastings para a simulação dos parâmetros. Para cada parâmetro geramos 5 cadeias de 12000 pontos, sendo que para cada cadeia descartamos as primeiras 6000 iterações e consideramos as iterações 6080.^a, 6160.^a, ..., 12000.^a, totalizando assim uma amostra final de 375 pontos.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros α e β :

$$\alpha = [8 \quad 10 \quad 12 \quad 14 \quad 16]$$

$$\beta = [7 \quad 11 \quad 15 \quad 19 \quad 23]$$

A tabela 7.17 apresenta os resumos a posteriori dos parâmetros α e β .

Tabela 7.17 – Sumários a posteriori do modelo Beta-Binomial para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
α	11,9534	0,7141	(10,564 ; 13,4898)	1,0003	37,66
β	15,7918	0,9263	(13,7115 ; 17,6235)	1,0003	37,05

Comparando os resultados da tabela 7.17 com os resultados Clássicos do modelo Beta-Binomial dados na tabela 7.14, observamos que as médias a posteriori de α e β ficaram bem próximas dos EMV desses parâmetros, ao passo que os intervalos de credibilidade de α e β apresentaram uma precisão maior que os intervalos de confiança, obtidos por aproximação assintótica.

Para ambos os parâmetros tivemos uma razoável taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Na análise Bayesiana do modelo Binomial Correlacionado para os dados do jogador Vinnie Johnson, assumimos as distribuições a priori dadas em (3.8) com $a = 0$, $b = 0,03$, $c = 12$ e $d = 15$.

Para a simulação dos parâmetros, utilizamos as distribuições condicionais a posteriori dadas em (3.11). Geramos 5 cadeias de 8000 pontos para cada parâmetro, através do algoritmo Metropolis-Hastings. Para cada cadeia descartamos os 4000 valores iniciais e consideramos as iterações 4040.^a, 4080.^a, ..., 8000.^a, totalizando assim uma amostra final de 500 pontos.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros δ e p :

$$p = [0,4 \quad 0,42 \quad 0,44 \quad 0,46 \quad 0,48]$$

$$\delta = [0,01 \quad 0,02 \quad 0,03 \quad 0,04 \quad 0,05]$$

A tabela 7.18 apresenta os resumos a posteriori dos parâmetros p e δ .

Tabela 7.18 – Sumários a posteriori do modelo Binomial Correlacionado para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
p	0,4277	0,0079	(0,4120 ; 0,4434)	1,0013	65,10
δ	0,0184	0,0051	(0,0085 ; 0,028)	1,0000	63,35

Comparando os resultados da tabela 7.18 com os resultados Clássicos do modelo Binomial Correlacionado dados na tabela 7.14, observamos que os estimadores pontuais e por intervalo ficaram bem próximos. Outra característica interessante é que apesar do EMV e da média posteriori do parâmetro δ apresentarem valores próximos de 0, os intervalos de confiança e de credibilidade para este parâmetro não contém o número 0, o que é uma forte evidência que existe uma correlação positiva entre as variáveis binárias de Y_i .

Para os parâmetros δ e p tivemos uma excelente taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Na análise Bayesiana do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais para os dados do jogador Vinnie Johnson, assumimos as distribuições a priori dadas em (4.10) com $a_1 = 2$, $b_1 = 28$, $a_2 = 30$, $b_2 = 35$, $c = 1$ e $d = 20$.

Baseados nas distribuições condicionais a posteriori dadas em (4.13), utilizamos o algoritmo Gibbs Sampling para a simulação dos parâmetros. Para cada parâmetro geramos 5 cadeias de 10000 pontos, sendo que para cada cadeia descartamos as primeiras 5000 iterações e consideramos as iterações 5050.^a, 5100.^a, ..., 10000.^a, totalizando assim uma amostra final de 500 pontos.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros θ_1 , θ_2 e π :

$$\theta_1 = [0,1 \quad 0,3 \quad 0,5 \quad 0,7 \quad 0,9]$$

$$\theta_2 = [0,1 \quad 0,3 \quad 0,5 \quad 0,7 \quad 0,9]$$

$$\pi = [0,1 \quad 0,3 \quad 0,5 \quad 0,7 \quad 0,9]$$

A tabela 7.19 apresenta os resumos a posteriori dos parâmetros θ_1 , θ_2 e π .

Tabela 7.19 – Sumários a posteriori do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR
θ_1	0,0717	0,0173	(0,0439 ; 0,1085)	1,0031
θ_2	0,459	0,0076	(0,4443 ; 0,4738)	1,0018
π	0,0515	0,0144	(0,0288 ; 0,0831)	1,0044

Comparando os resultados da tabela 7.19 com os resultados Clássicos do modelo de mistura de duas distribuições Binomiais dados na tabela 7.14, observamos que os estimadores pontuais e por intervalo de θ_1 , θ_2 e π ficaram bem próximos.

Para os parâmetros θ_1 , θ_2 e π a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Para discriminar os modelos na análise Bayesiana considerando os dados do jogador Vinnie Johnson, encontramos o valor exato da verossimilhança marginal do modelo Binomial e estimativas de Monte Carlo das verossimilhanças marginais dos modelos Beta-Binomial, Binomial Correlacionado e mistura de duas distribuições Binomiais, utilizando a metodologia proposta na seção 5.2 desta dissertação. Apresentamos os resultados obtidos na tabela 7.20.

Tabela 7.20 – Discriminação Bayesiana dos modelos para os dados do jogador Vinnie Johnson.

Modelo	Estimativa da Ver. Marginal
Binomial	$4,836 \times 10^{-354}$
Beta-Binomial	$1,291 \times 10^{-344}$
Binomial Correlacionado	$6,316 \times 10^{-349}$
Mistura de 2 distribuições Binomiais	$1,028 \times 10^{-329}$

Observando a tabela 7.20, verificamos que na análise Bayesiana o modelo de mistura de duas distribuições Binomiais foi o que melhor se ajustou aos dados do jogador Vinnie Johnson, comprovando os resultados Clássicos. O modelo Binomial, como no exemplo anterior, foi o modelo menos eficiente no ajuste dos dados, o que reforça a importância de utilizar em algumas aplicações modelos que possam ajustar a variação extra-Binomial.

7.3 – Terceira aplicação: um exemplo com covariáveis

Consideramos o experimento analisado por Crowder (1978), onde uma quantidade de sementes é colocada numa placa coberta com um extrato numa dada diluição. Os números de sementes que germinaram e não germinaram são anotados. Foram considerados dois tipos de

sementes (O. Aegyptiaca 75 e O. Aegyptiaca 73), dois tipos de extratos (feijão e vagem) e algumas réplicas para as combinações.

Apresentamos os dados desse experimento na tabela 7.21. Para cada réplica, temos o número total de sementes (n_i), o número de sementes que germinaram (y_i) e a proporção de sementes que germinaram (y_i / n_i).

Tabela 7.21 – Dados (Cowder (1978))

(I) O. Aegyptiaca 75						(II) O. Aegyptiaca 73					
Feijão			Vagem			Feijão			Vagem		
n_i	y_i	y_i / n_i	n_i	y_i	y_i / n_i	n_i	y_i	y_i / n_i	n_i	y_i	y_i / n_i
39	10	0,26	6	5	0,83	16	8	0,50	12	3	0,25
62	23	0,37	74	53	0,72	30	10	0,33	41	22	0,54
81	23	0,28	72	55	0,76	28	8	0,29	30	15	0,50
51	26	0,51	51	32	0,63	45	23	0,51	51	32	0,63
39	17	0,44	79	46	0,58	4	0	0	7	3	0,43
			13	10	0,77						

Numa inspeção dos dados da tabela 7.21, observamos uma significativa heterogeneidade entre as proporções das réplicas e consideramos na análise dos dados a presença de duas covariáveis W_{1i} e W_{2i} . Definimos que W_{1i} assume os valores -1 para o tipo O. Aegyptiaca 75 e 1 para o tipo O. Aegyptiaca 73 e W_{2i} assume os valores -1 para o extrato de feijão e 1 para o extrato de vagem.

Assumimos para a variável Y_i (número de sementes que germinaram em n_i sementes), os modelos discutidos no capítulo 6 desta dissertação onde,

$$p_i = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 W_{1i} + \beta_2 W_{2i} + \beta_3 W_{1i} W_{2i}}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 W_{1i} + \beta_2 W_{2i} + \beta_3 W_{1i} W_{2i}}}, \text{ para } i = 1, \dots, 21 \quad (7.1)$$

Os resultados obtidos assumindo os modelos de Regressão Logística, Binomial Correlacionado com correlações homogêneas e Binomial Correlacionado com correlações diferentes, são dados nas seções 7.3.1, 7.3.2 e 7.3.3, respectivamente. Na seção 7.3.4 apresentamos uma discriminação dos modelos, com base nos critérios discutidos no capítulo 5 deste trabalho.

7.3.1 – Aplicação do modelo de Regressão Logística

Na tabela 7.22 apresentamos os resultados da análise Clássica do modelo de regressão Logística, para os dados da tabela 7.21. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta na seção 6.3.1 deste trabalho.

Tabela 7.22 – Resultados da análise Clássica do modelo de Regressão Logística para os dados da tabela 7.21.

Parâmetro	EMV	Int. Conf. (95%)
β_0	-0,0206	(-0,1708 ; 0,1296)
β_1	-0,1216	(-0,2718 ; 0,0286)
β_2	0,4646	(0,3144 ; 0,6148)
β_3	-0,1945	(-0,3447 ; -0,0443)

Na análise Bayesiana do modelo de regressão Logística para os dados da tabela 7.21, assumimos as distribuições a priori dadas em (6.15), com $\mu_0 = 0,05$, $\sigma_0^2 = 0,2$, $\mu_1 = -0,2$, $\sigma_1^2 = 0,2$, $\mu_2 = 0,3$, $\sigma_2^2 = 0,2$, $\mu_3 = -0,3$ e $\sigma_3^2 = 0,2$.

Para a simulação dos parâmetros, utilizamos as distribuições condicionais a posteriori dadas em (6.18). Geramos 5 cadeias de 8000 pontos para cada parâmetro, através do algoritmo Metropolis-Hastings. Para cada cadeia descartamos os 4000 valores iniciais e consideramos as iterações 4020.^a, 4040.^a, ..., 8000.^a, totalizando assim uma amostra final de 1000 pontos.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros β_0 , β_1 , β_2 e

β_3 :

$$\beta_0 = [0,2 \quad 0,4 \quad 0,6 \quad 0,8 \quad 1,0]$$

$$\beta_1 = [0,2 \quad 0,4 \quad 0,6 \quad 0,8 \quad 1,0]$$

$$\beta_2 = [0,2 \quad 0,4 \quad 0,6 \quad 0,8 \quad 1,0]$$

$$\beta_3 = [0,2 \quad 0,4 \quad 0,6 \quad 0,8 \quad 1,0]$$

Apresentamos na tabela 7.23 os resultados obtidos na análise Bayesiana do modelo de Regressão Logística.

Tabela 7.23 – Sumários a posteriori do modelo de Regressão Logística para os dados da tabela 7.21.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
β_0	-0,0123	0,0726	(-0,1603 ; 0,1208)	1,0001	39,37
β_1	-0,1321	0,0725	(-0,2780 ; 0,0178)	1,0002	38,76
β_2	0,4409	0,0701	(0,3039 ; 0,5845)	1,0002	32,13
β_3	-0,2156	0,0725	(-0,3556 ; -0,0783)	1,0001	37,78

Comparando os resultados da tabela 7.23 com os resultados da análise Clássica do modelo de Regressão Logística dados na tabela 7.22 , verificamos que não existe diferenças significativas entre as estimativas pontuais e por intervalo dos parâmetros β_0 , β_1 , β_2 e β_3 .

Observamos que os intervalos de credibilidade para os parâmetros β_2 e β_3 não contém o número 0. Assim, na análise Bayesiana a covariável W_{2i} (tipo de extrato) e a interação $W_{1i} W_{2i}$ (tipo de semente x tipo de extrato) tem efeitos significativos na contagem das sementes germinadas.

Para os parâmetros β_0 , β_1 , β_2 e β_3 tivemos uma razoável taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Nas figuras 3.15, 3.16, 3.17 e 3.18 apresentamos as trajetórias das cadeias ao longo das iterações dos parâmetros e nas figuras 3.19, 3.20, 3.21 e 3.22 apresentamos aproximações das densidades a posteriori marginais de β_0 , β_1 , β_2 e β_3 .

Figura 3.15 - Iterações para β_0

Figura 3.16 - Iterações para β_1

Figura 3.17 - Iterações para β_2

Figura 3.18 - Iterações para β_3

Figura 3.19 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_0

Figura 3.20 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_1

Figura 3.21 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_2

Figura 3.22 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_3

7.3.2 – Aplicação do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas

Na tabela 7.24 apresentamos os resultados da análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas, para os dados da tabela 7.21. Esses resultados foram obtidos utilizando a metodologia proposta na seção 6.3.1 deste trabalho.

Tabela 7.24 – Resultados da análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas para os dados da tabela 7.21.

Parâmetro	EMV	Int. Conf. (95%)
β_0	-0,0562	(-0,2410 ; 0,1286)
β_1	-0,1557	(-0,3422 ; 0,0307)
β_2	0,4214	(0,2279 ; 0,6150)
β_3	-0,2003	(-0,3843 ; -0,0163)
δ	0,02085	(0,0033 ; 0,0384)

Na análise Bayesiana do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas para os dados da tabela 7.21, assumimos as distribuições a priori dadas na seção 6.3.2 com $\mu_0 = -0,1$, $\sigma_0^2 = 0,2$, $\mu_1 = -0,3$, $\sigma_1^2 = 0,2$, $\mu_2 = 0,45$, $\sigma_2^2 = 0,2$, $\mu_3 = -0,1$, $\sigma_3^2 = 0,2$, $a = 0,01$ e $b = 0,03$.

Baseado nas distribuições condicionais a posteriori dadas na seção 6.3.2, utilizamos o algoritmo Metropolis-Hastings para a simulação dos parâmetros. O processo de seleção das amostras foi o mesmo utilizado para o modelo de regressão Logística, descrito na seção anterior.

Consideramos os seguintes valores iniciais para as cadeias dos parâmetros β_0 , β_1 , β_2 , β_3 e δ :

$$\beta_0 = [-0,5 \quad -0,3 \quad -0,1 \quad 0,1 \quad 0,3]$$

$$\beta_1 = [-0,5 \quad -0,3 \quad -0,1 \quad 0,1 \quad 0,3]$$

$$\beta_2 = [0,2 \quad 0,4 \quad 0,6 \quad 0,8 \quad 1,0]$$

$$\beta_3 = [-0,6 \quad -0,4 \quad -0,2 \quad 0 \quad 0,2]$$

$$\delta = [0 \quad 0,01 \quad 0,02 \quad 0,03 \quad 0,04]$$

Apresentamos na tabela 7.25 os resultados obtidos na análise Bayesiana do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas.

Tabela 7.25 – Sumários a posteriori do modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas para os dados da tabela 7.21.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
β_0	-0,0618	0,0726	(-0,2172 ; 0,0854)	1,0008	41,85
β_1	-0,1754	0,0801	(-0,3359 ; -0,0144)	1,0007	35,51
β_2	0,4395	0,0802	(0,2848 ; 0,6034)	1,0000	42,68
β_3	-0,1788	0,0789	(-0,329 ; -0,0320)	1,0001	39,84
δ	0,0203	0,0053	(0,0109 ; 0,0293)	1,0000	82,94

Comparando os resultados da tabela 7.25 com os resultados da análise Clássica do modelo Binomial Correlacionado dados na tabela 7.24, observamos que não existe diferenças significativas entre as estimativas pontuais e por intervalo dos parâmetros β_0 , β_1 , β_2 , β_3 e δ .

Observamos que os intervalos de credibilidade para os parâmetros β_1 , β_2 , β_3 e δ não contém o número 0. Assim, na análise Bayesiana as covariáveis W_{1i} (tipo de semente) e W_{2i} (tipo de extrato), a interação $W_{1i} W_{2i}$ (tipo de semente x tipo de extrato) e a correlação δ tem efeitos significativos na contagem das sementes germinadas.

Para os parâmetros β_0 , β_1 , β_2 , β_3 e δ tivemos uma razoável taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

Nas figuras 3.23, 3.24, 3.25, 3.26 e 3.27 apresentamos as trajetórias das cadeias ao longo das iterações dos parâmetros e nas figuras 3.28, 3.29, 3.30, 3.31 e 3.32 apresentamos aproximações das densidades a posteriori marginais de β_0 , β_1 , β_2 , β_3 e δ .

Figura 3.23 - Iterações para β_0

Figura 3.24 - Iterações para β_1

Figura 3.25 - Iterações para β_2

Figura 3.26 - Iterações para β_3

Figura 3.27 - Iterações para δ

Figura 3.28 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_0

Figura 3.29 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_1

Figura 3.30 – Aproximação de densidade a posteriori marginal de β_2

Figura 3.31 – Aproximação da densidade a posteriori marginal de β_3

Figura 3.32 – Aproximação de densidade a posteriori marginal de δ

7.3.3 – Aplicação do modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes

A análise Bayesiana do modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes para os dados da tabela 7.21, foi feita de maneira similar a que apresentamos na seção anterior para o modelo Binomial Correlacionado com correlações homogêneas, considerando os mesmos valores para $\mu_0, \sigma_0^2, \mu_1, \sigma_1^2, \mu_2, \sigma_2^2, \mu_3, \sigma_3^2, a$ e b , as mesmas condições iniciais para as cadeias dos parâmetros e o mesmo processo de seleção das amostras geradas.

Na tabela 7.26 apresentamos os resumos a posteriori para os parâmetros $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ e $\delta_i, i = 1, \dots, 21$.

Tabela 7.26 – Sumários a posteriori do modelo Binomial Correlacionado com correlações diferentes para os dados da tabela 7.21.

Parâmetro	Média	DP	Int. Cred. (95%)	GR	Tac
β_0	-0,0620	0,0815	(-0,2151 ; 0,0926)	1,0003	0,4285
β_1	-0,1748	0,0798	(-0,3304 ; -0,0204)	0,9989	0,3634
β_2	0,4405	0,0791	(0,2819 ; 0,5888)	1,0035	0,4328
β_3	-0,1724	0,0793	(-0,3277 ; -0,0169)	1,0009	0,3996
δ_1	0,0203	0,0054	(0,0106 ; 0,0294)	0,9990	0,8433
δ_2	0,0201	0,0055	(0,0106 ; 0,0296)	0,9995	0,8343
δ_3	0,0203	0,0053	(0,0107 ; 0,0293)	0,9983	0,8400
δ_4	0,0200	0,0052	(0,0107 ; 0,0289)	0,9985	0,8394
δ_5	0,0201	0,0053	(0,0108 ; 0,0290)	0,9989	0,8371
δ_6	0,0202	0,0051	(0,0110 ; 0,0293)	0,9995	0,8387
δ_7	0,0198	0,0053	(0,0105 ; 0,0293)	0,9997	0,8299
δ_8	0,0201	0,0054	(0,0107 ; 0,0296)	0,9995	0,8365
δ_9	0,0200	0,0050	(0,0108 ; 0,0292)	0,9989	0,8404
δ_{10}	0,0200	0,0054	(0,0106 ; 0,0293)	0,9986	0,8389
δ_{11}	0,0200	0,0053	(0,0106 ; 0,0292)	0,9982	0,8372
δ_{12}	0,0202	0,0052	(0,0107 ; 0,0292)	1,0027	0,8401
δ_{13}	0,0200	0,0052	(0,0107 ; 0,0291)	0,9980	0,8348
δ_{14}	0,0202	0,0053	(0,0109 ; 0,0293)	1,0004	0,8401
δ_{15}	0,0203	0,0053	(0,0107 ; 0,0293)	0,9991	0,8383
δ_{16}	0,0202	0,0052	(0,0111 ; 0,0292)	0,9987	0,8402
δ_{17}	0,0202	0,0053	(0,0108 ; 0,0294)	0,9985	0,8376
δ_{18}	0,0200	0,0052	(0,0111 ; 0,0292)	1,0032	0,8385
δ_{19}	0,0201	0,0052	(0,0108 ; 0,0292)	0,9981	0,8409
δ_{20}	0,0205	0,0052	(0,0107 ; 0,0293)	0,9987	0,8380
δ_{21}	0,0200	0,0054	(0,0107 ; 0,0291)	0,9999	0,8397

Observamos que as estimativas Bayesianas para os parâmetros $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ dadas na tabela 7.26, se aproximaram das estimativas dadas na tabela 7.25, referentes ao modelo com correlações homogêneas e as correlações $\delta_i, i = 1, \dots, 21$, apresentaram médias e intervalos de credibilidade bem próximas das estimativas de δ dadas na tabela 7.25.

Para todos os parâmetros tivemos uma razoável taxa de aceitação dos valores gerados pelo algoritmo Metropolis-Hastings e a convergência foi atingida pelo critério de Gelman & Rubin, pois os valores do fator de redução e escala se aproximaram de 1.

7.3.4 – Comparação dos modelos

Para uma discriminação Clássica dos modelos de regressão Logística e Binomial Correlacionado com correlações homogêneas, utilizamos o critério de mínima informação (AIC), discutido na seção 5.1.

Apresentamos na tabela 7.27 os resultados do AIC obtidos com os dados da tabela 7.21.

Tabela 7.27 – Discriminação Clássica dos modelos para os dados da tabela 7.21.

Modelo	AIC
Regressão Logística	117,874
Binomial Correlacionado	114,851

Observamos que o AIC do modelo de Binomial Correlacionado é menor que o AIC do modelo de Regressão Logística, indicando que a correlação δ entre as variáveis binárias de Y_i é um importante fator para melhorar o ajuste dos dados da tabela 7.21, quando trabalhamos com covariáveis.

Para discriminar os modelos na análise Bayesiana considerando os dados da tabela 7.21, encontramos estimativas de Monte Carlo das verossimilhanças marginais dos modelos de Regressão Logística, Binomial Correlacionado com correlações homogêneas e Binomial Correlacionado com correlações diferentes, utilizando as expressões dadas em (6.22), (6.23) e (6.24), respectivamente. Na tabela 7.28 apresentamos os resultados obtidos.

Tabela 7.28 – Discriminação Bayesiana dos modelos para os dados da tabela 7.21

Modelo	Estimativa da Ver. Marginal
Regressão Logística	$4,0612 \times 10^{-25}$
Binomial Correlacionado com correl. Homog.	$4,3538 \times 10^{-24}$
Binomial Correlacionado com correl. Difer.	$4,8834 \times 10^{-24}$

Observamos que as estimativas de Monte Carlo da verossimilhança para os dois modelos que englobam com correlação, ficaram bem próximas e ambas superaram a estimativa do modelo de regressão Logística. Portanto, concluímos que os dados analisados por Crowder (1978), apresentam uma variabilidade extra-Binomial significativa.

Capítulo 8: Conclusões e Considerações Futuras

Nesta dissertação, comprovamos através dos exemplos numéricos analisados, que os modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial são fundamentais em muitas aplicações onde temos dados de contagens de sucessos dos ensaios de um experimento. Nos três exemplos discutidos no capítulo 7, a suposição Binomial usual produz um ajuste ineficiente dos dados, e o uso de modelos para explicar a variação extra-Binomial torna-se necessário, para os dados com ou sem a presença de covariáveis.

O uso do modelo de misturas de distribuições Binomiais com a introdução das variáveis não observáveis (latentes), é uma alternativa eficiente para ajustar dados de contagens de sucessos em diversos experimentos.

A análise Bayesiana dos modelos usados para ajustar a variabilidade extra-Binomial, permite incorporar aos modelos, informações prévias a respeito dos parâmetros, e isso muitas vezes produz inferências mais precisas. As técnicas de simulação de Monte Carlo em Cadeias de Markov (MCMC), são apropriadas para a obtenção de sumários a posteriori de interesse dos parâmetros, pois possuem fácil implementação e não exigem um conhecimento computacional avançado.

Em relação as propostas futuras, podemos considerar a análise Bayesiana de modelos mais complexos, como modelos de misturas de várias (> 2) distribuições Binomiais, e estudar modelos para super dispersão envolvendo não apenas a variabilidade extra-Binomial, mais a super dispersão de outros modelos, como por exemplo os modelos de Poisson.

Apêndice A

Algoritmo Gibbs Sampling

O algoritmo Gibbs Sampling foi introduzido formalmente por Geman e Geman (1984), que 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 $\pi(\underline{\theta})$ onde $\underline{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$ e que as distribuições condicionais completas a posteriori $\pi(\theta_i / \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_p)$, $i = 1, \dots, p$, estão disponíveis sob a forma padronizada. Podemos então gerar amostras através do seguinte procedimento:

Passo 1 : iniciar o contador das iterações, $j=1$, e atribuir valores iniciais $\underline{\theta}^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \theta_2^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)})$.

Passo 2: obter um novo valor $\underline{\theta}^{(j)} = (\theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_p^{(j)})$ através de sucessivas geração de valores:

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

Passo 3: 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

Quando as distribuições condicionais a posteriori $\pi(\theta_i / \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_p)$, $i = 1, \dots, p$, não apresentam formas de distribuições conhecidas (Normal, Beta, etc.), uma alternativa é o uso do algoritmo Metropolis-Hastings.

A idéia básica é escrever a distribuição condicional a posteriori como o produto de duas funções:

$$\pi(\theta_i / \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_p) \propto \psi(\theta_i) \pi(\theta_i)$$

onde $\pi(\theta_i)$ será usada como núcleo de transição para gerar as amostras de θ_i e tem a forma de uma distribuição padrão. A função $\psi(\theta_i)$ é utilizada no teste de aceitação e rejeição dos valores gerados.

Descrição do método:

Passo 1 : iniciar o contador das iterações, $j = 1$, e atribuir valores iniciais $\theta^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \theta_2^{(0)}, \dots, \theta_p^{(0)})$.

Passo 2: obter os novos valores θ_i^j a partir da função de transição $\pi(\theta_i^j)$.

Passo3: calcular a probabilidade de aceitação do novo valor onde:

$$\alpha(\theta_i^j) = \begin{cases} \min \left\{ 1, \frac{\psi(\theta_i^j)}{\psi(\theta_i^{j-1})} \right\} & , \text{ se } \psi(\theta_i^j) > 0 \\ 1, & \text{ caso contrário} \end{cases}$$

Passo 4: gerar o valor u a partir de uma distribuição Uniforme(0,1) e fazer:

$$\theta_i^j = \begin{cases} \theta_i^j & \text{se } u \leq \alpha(\theta_i^j) \\ \theta_i^{j+1} & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Passo 5: mudamos o contador j para $j + 1$ e retornamos a (ii) até a convergência.

Apêndice C

Critério de convergência de Gelman e Rubin

Uma forma simples de verificar convergência é a utilização de várias cadeias em paralelo começando com diferentes pontos iniciais. Com isso, evita-se que as cadeias se concentrem em regiões em torno de modas locais.

A inspeção visual de similaridade entre as trajetórias das várias cadeias após um certo número de iterações é um forte indicio de convergência. Gelman & Rubin (1992) formalizaram essa idéia, de que as trajetórias das cadeias devem ser a mesma depois de convergirem, através do uso de técnicas de análise de variância. A idéia geral é testar se a dispersão intra-cadeias é maior do que a dispersão inter-cadeias. Isto equivale a dizer que: o histograma das cadeias como um todo deve ser similar aos histogramas das cadeias tomadas individualmente.

Considerando m cadeias que evoluem em paralelo e uma função real $t(\theta)$, tem-se m trajetórias $\{t_i^{(1)}, t_i^{(2)}, \dots, t_i^{(n)}\}$, $i = 1, \dots, m$, para t . Portanto, podem ser obtidas a variância entre as cadeias, B , e a variância dentro das cadeias, W . As fórmulas correspondentes são dadas por:

$$B = \frac{n}{m-1} \sum_{i=1}^m (\bar{t}_i - \bar{t})^2 \quad \text{e} \quad W = \frac{1}{m(n-1)} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (t_i^{(j)} - \bar{t}_i)^2$$

onde $\bar{t}_i$ é a média das observações da cadeia i e $\bar{t}$ é a média dessas médias, $i = 1, \dots, m$.

A variância de t pode ser estimada de forma não viciada por:

$$\hat{V}(t(\theta)) = \left(1 - \frac{1}{n}\right)W + \left(\frac{1}{n}\right)B$$

Se as cadeias ainda não estiverem convergindo, então essa estimativa é maior que $V(t(\theta))$ pois os valores iniciais ainda estão sendo influenciados pelos valores dos outros parâmetros da cadeia, de forma que a distribuição de equilíbrio ainda não foi atingida, indicando que eles foram

escolhidos com dispersão maior que a da distribuição de equilíbrio. Por outro lado, W fornece estimativas menores que $V(t(\theta))$, pois a cadeia não terá coberto toda a variabilidade de $t(\theta)$.

Um indicador de convergência é dado pela chamada redução potencial estimada da escala $\hat{R} = \sqrt{\hat{V}(t(\theta)) / W}$. À medida que n cresce, ambos os estimadores acabarão convergindo para $V(t(\theta))$ e R convergirá para 1. Assim, $\hat{R}$ pode ser usado como indicador de convergência pela avaliação de sua proximidade a 1. Gelman (1995) sugere aceitar como garantia de convergência valores de $\hat{R} \leq 1,1$.

Referências Bibliográficas

- 1) ALTHAM, P.M.E. Two Generalizations of the Binomial Distribution. *Applied Statistics*, n.27, p.162-167, 1978.
- 2) BOX, G.E.P.; JENKINS, G.M.; REINSEL, G.C. Time Series Analysis: Forecasting and Control, third edition, 1994.
- 3) CHIB, S.; GREENBERG, E. Understanding the Metropolis-Hastings. *The American Statistician*, n.49, p.327-335, 1995.
- 4) CROWDER, M.J. Beta-Binomial Anova for Proportions. *Applied Statistics*, n.27, p.34-37, 1978.
- 5) GELFAND, A.E.; SMITH, A.F.M. Sampling Based Approaches to Calculating Marginal Densities. *Journal of the American Statistical Association*, n.85, p.398 – 409, 1990.
- 6) GELMAN, A.E.; GELMAN, D. Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions and the Bayesian Restoration of Images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, n.6, p. 721-741, 1984.
- 7) GELMAN, A.E.; RUBIN, D. Inference from Iterative Simulation Using Multiple Sequences. *Statistical Sciences*, n.7, p.457-472, 1992.
- 8) GRIFFITHS, D.A. Maximum Likelihood Estimation for the Beta-Binomial Distribution and an Application to the Household Distribution of the Total Number of Cases of a Disease. *Biometrics*, n.29, p.637-648, 1973.
- 9) HSIAO, C.K. Bayesian Tests of Extra-Binomial Variability with Emphasis on the Boundary Case, *PhD thesis*, Carnegie-Mellon University, U.S.A., 1994.

Apêndice D

Análise Clássica e Bayesiana do modelo Binomial

Considerando independentes as contagens de sucessos $y_1, y_2, \dots, y_N$, a função de verossimilhança para o modelo Binomial, utilizando a expressão (1.1), é dada por,

$$L(p) = \prod_{i=1}^N \left[\binom{n_i}{y_i} p^{y_i} (1-p)^{n_i - y_i} \right] = \left[\prod_{i=1}^N \binom{n_i}{y_i} \right] p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)}$$

Aplicando o logaritmo na expressão acima temos,

$$\begin{aligned} l(p) &= \log[L(p)] = \log \left\{ \left[\prod_{i=1}^N \binom{n_i}{y_i} \right] p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left[\log \binom{n_i}{y_i} \right] + \log(p) \sum_{i=1}^N y_i + \log(1-p) \sum_{i=1}^N (n_i - y_i) \end{aligned}$$

A derivada de primeira ordem do logaritmo da função de verossimilhança em relação ao parâmetro p é dada por,

$$\frac{\partial l(p)}{\partial p} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{p} - \frac{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)}{1-p}$$

Ao contrário dos outros modelos discutidos nesta dissertação, no modelo Binomial temos

que $\frac{\partial l(p)}{\partial p} = 0$ é uma equação linear em relação a p . Assim, determinamos o valor exato do EMV para p , dado por,

$$\hat{p} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{\sum_{i=1}^N n_i}$$

Na análise Bayesiana do modelo Binomial, assumimos para a probabilidade de sucesso p uma distribuição a priori Uniforme(0,1). Essa distribuição foi usada no capítulo 5 para encontrar a verossimilhança marginal exata do modelo. Utilizando esta verossimilhança marginal, podemos encontrar a densidade a posteriori exata para o parâmetro p , dada por,

$$\begin{aligned} \pi(p / y, n) &= \frac{\pi(p)L(p)}{\int_0^1 \pi(p)L(p)dp} = \frac{\left[\prod_{i=1}^N \binom{n_i}{y_i} \right] p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)}}{\int_0^1 \left[\prod_{i=1}^N \binom{n_i}{y_i} \right] p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} dp} \\ &= \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right) \Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)} p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} \end{aligned}$$

Algumas características do parâmetro p podem ser determinadas a partir da expressão acima, sem o uso de métodos numéricos ou computacionais. A seguir apresentamos o desenvolvimento matemático para obter a esperança e a variância a posteriori de p .

1) Esperança:

$$\begin{aligned}
 E\left(\underset{\sim}{p} / \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) &= \int_0^1 p \pi\left(\underset{\sim}{p} / \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) \hat{c} p \\
 &= \int_0^1 p \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right) \Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)} p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} \hat{c} p \\
 &= \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right) \Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)} \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 2\right) \Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 3\right)} \\
 &= \frac{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 1\right)! \left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)!}{\left(\sum_{i=1}^N y_i\right)! \left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)!} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i + 1}{\sum_{i=1}^N n_i + 2}
 \end{aligned}$$

2) Variância:

$$\begin{aligned}
 \left[E\left(\underset{\sim}{p} / \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right)\right]^2 &= \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)^2}{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)^2} \\
 E\left[\left(\underset{\sim}{p} / \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right)^2\right] &= \int_0^1 p^2 \pi\left(\underset{\sim}{p} / \underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{n}\right) \hat{c} p
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^1 p^2 \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)\Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)} p^{\sum_{i=1}^N y_i} (1-p)^{\sum_{i=1}^N (n_i - y_i)} dp \\
&= \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)\Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)} \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N y_i + 3\right)\Gamma\left(\sum_{i=1}^N (n_i - y_i) + 1\right)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^N n_i + 4\right)} \\
&= \frac{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 1\right)! \left(\sum_{i=1}^N y_i + 2\right)!}{\left(\sum_{i=1}^N y_i\right)! \left(\sum_{i=1}^N n_i + 3\right)!} = \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i + 2\right)\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)}{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 3\right)\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)}
\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
Var\left(p / y, n\right) &= E\left[\left(p / y, n\right)^2\right] - \left[E\left(p / y, n\right)\right]^2 \\
&= \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i + 2\right)\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)}{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 3\right)\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)} - \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)^2}{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)^2} \\
&= \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i + 1\right)\left(\sum_{i=1}^N n_i - \sum_{i=1}^N y_i + 1\right)}{\left(\sum_{i=1}^N n_i + 3\right)\left(\sum_{i=1}^N n_i + 2\right)^2}
\end{aligned}$$

Apêndice E

Programa Computacional para o modelo Beta-Binomial

Neste apêndice, apresentamos um dos programas computacionais utilizados neste trabalho. Este programa foi desenvolvido no “software” Matlab e é baseado no algoritmo de simulação Metropolis-Hastings para o modelo Beta-Binomial, considerando os dados genéticos (Skellam (1948)).

```
% MCMC para o modelo Beta-Binomial considerando
% os dados genéticos

clear

% vetores de dados

ni=[3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
    3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3];

yi=[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0...
    0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1...
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1...
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1...
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1...
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2...
    2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2...
    2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2...
    2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2...
    2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2...]
```



```

2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2...
2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3...
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3];

```

```
% dados iniciais
```

```
a1=90;
```

```
b1=15;
```

```
a2=70;
```

```
b2=16;
```

```
n=337;
```

```
m=5;
```

```
t=8000;
```

```
% condições iniciais
```

```
alf0=[4.5 5.0 5.5 6.0 6.5];
```

```
bet0=[3 3.5 4 4.5 5.0];
```

```
ir1=zeros(1,5);
```

```
ir2=zeros(1,5);
```

```
for j=1:m
```

```
alf(1,j)=alf0(j);
```

```
bet(1,j)=bet0(j);
```

```
for i=2:t
```

```
% metropolis hastings 1
```

```
alf(i,j)=gamrnd(a1, 1/b1);
```

```
% teste de aceitação
```

```
psin1=n*log(gamma(alf(i,j)+bet(i-1,j)))...
```

```
-n*log(gamma(alf(i,j)))+sum(log(gamma(alf(i,j)+yi)))...
```

```
-sum(log(gamma(alf(i,j)+bet(i-1,j)+ni)));
```

```
psia1=n*log(gamma(alf(i-1,j)+bet(i-1,j)))...
```

```
-n*log(gamma(alf(i-1,j)))+sum(log(gamma(alf(i-1,j)+yi)))...
```

```
-sum(log(gamma(alf(i-1,j)+bet(i-1,j)+ni)));
```

```
psil=exp(psin1-psia1);
```

```
M1=min(1,psil);
```

```
U1=rand;
```

```
if U1>=M1
```

```
alf(i,j)=alf(i-1,j);
```

```

    ir1(j)=ir1(j)+1;
end

% metropolis hastings 2

bet(i,j)=gamrnd(a2,1/b2);

% teste de aceitação
psin2=n*log(gamma(alf(i,j)+bet(i,j)))...
-n.*log(gamma(bet(i,j)))+sum(log(gamma(bet(i,j)+ni-yi)))...
-sum(log(gamma(alf(i,j)+bet(i,j)+ni)));

psia2=n*log(gamma(alf(i,j)+bet(i-1,j)))...
-n.*log(gamma(bet(i-1,j)))+sum(log(gamma(bet(i-1,j)+ni-yi)))...
-sum(log(gamma(alf(i,j)+bet(i-1,j)+ni)));
psi2=exp(psin2-psia2);
M2=min(1,psi2);
U2=rand;
if U2>=M2
    bet(i,j)=bet(i-1,j);
    ir2(j)=ir2(j)+1;
end

end
end

% seleção das amostras
aaa=alf(:);
bbb=bet(:);

k=20;
alf00=alf(4020:k:t,:);
bet00=bet(4020:k:t,:);
alf000=alf00(:);
bet000=bet00(:);

% salvar os dados
save dalf1 aaa -ascii;
save dbet1 bbb -ascii;
save dalf2 alf000 -ascii;
save dbet2 bet000 -ascii;

% inferências
malf=mean(alf000)
mbet=mean(bet000)

```

```

sdalf=std(alf000)
sdbet=std(bet000)

% intervalos de credibilidade
linf_alf=prctile(alf000,2.5)
linf_bet=prctile(bet000,2.5)
lsup_alf=prctile(alf000,97.5)
lsup_bet=prctile(bet000,97.5)

% convergência
gralf=gelrub(alf)
grbet=gelrub(bet)

% porcentagem de aceitação
ir11=1- sum(ir1)/40000
ir22=1- sum(ir2)/40000

% verossimilhança marginal
s=length(alf000);

for c1=1:s

for c=1:n

hh(c,c1)=(prod(1:ni(c))/(prod(1:yi(c))*prod(1:(ni(c)-yi(c)))))
*(gamma(alf000(c1)+bet000(c1))/(gamma(alf000(c1))...
*gamma(bet000(c1))))*(gamma(alf000(c1)+yi(c))...
*gamma(bet000(c1)+ni(c)-yi(c))...
/(gamma(alf000(c1)+bet000(c1)+ni(c))));

end
end

est_vm=mean(prod(hh))

% gráficos das iterações

iter_alf=plot(alf(:))
iter_bet=plot(bet(:))

% aproximações das densidades a posteriori marginais

hist_alf=hist(alf000)
hist_bet=hist(bet000)

```

- 10) KASS, R.E.; RAFTERY, A.E. Bayes Factors and Model Uncertainty. *Journal of the American Statistical Association*, n.90, p.773-775, 1995.
- 11) KLEIN, J.P.; MOESCHBERGER, M.L. Survival Analysis: Techniques for Censored and Truncated Data. Springer-Verlag, New York, 1997.
- 12) KUPPER, L.L.; HASEMAN, J.K. The Use of a Correlated Binomial Model for the Analysis of Certain Toxicological Experiments. *Biometrics*, n.34, p.69-76, 1978.
- 13) LEE, E.T. Statistical Methods for Survival Data Analysis. New York: Wiley, 1992.
- 14) PRENTICE, R.L. Binary Regression Using an Extended Beta-Binomial Distribution, with Discussion of Correlation Induced by Covariate Measurement Errors. *Journal of the American Statistical Association*, n.90, p.773-775, 1995.
- 15) ROBERTS, G.O.; SMITH, A.F.M. Bayesian Methods via the Gibbs Sampler and related Markov Chain Monte Carlo Methods. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, n.55, p.3-23, 1993.
- 16) RUDOLFER, S.,M. A Markov Chain Model of Extra-Binomial Variation. *Biometrika*, n.77, p.255-264, 1990.
- 17) SKELLAM, J.G. A Probability Distribution Derived from the Binomial Distribution by Regarding the Probability of Success as Variable between the Sets of Trials. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, p.257-261, 1948.
- 18) TANNER, M.A.; WONG, W.H. The Calculation of Posterior Distributions by Data Augmentation (with discussion). *Journal of the American Statistical Association*, n.82, p.528-550, 1995.
- 19) TARONE, R.E. Testing the Goodness-of-Fit of the Binomial Distribution. *Biometrika*, n.66, p.585-590, 1979.

- 20) TIERNEY, L.; KADANE, J.B.; Accurate Approximations for Posterior Moments and Marginal Densities. *Journal of the American Statistical Association*, n.81, p.82-86, 1986.
- 21) TITTERINGTON, D.M.; SMITH, A.F.M.; MARKOV, U.E. *Statistical Analysis of Finite Mixture Distributions*. New York: Wiley, 1985.
- 22) WILLIAMS, D.A. Extra-Binomial Variation in Logistic Linear Models. *Applied Statistics*, p.31, n.144-148, 1982.