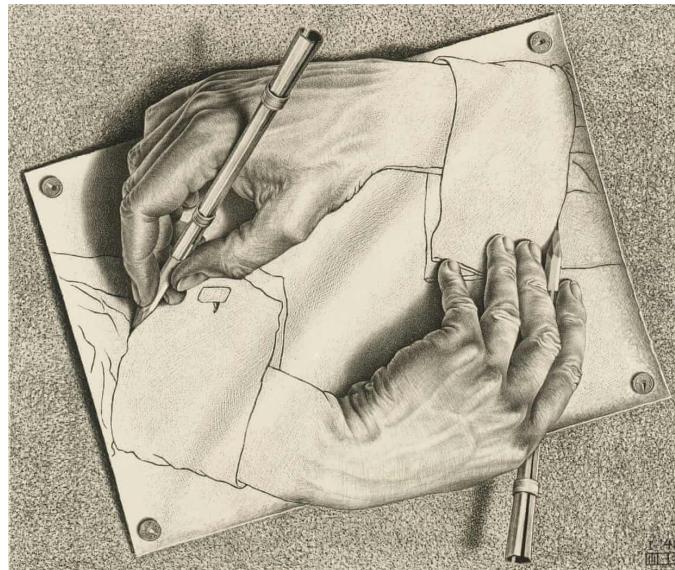


# Fundamentos Estatísticos para Ciência dos Dados

Livro de Exercícios  
com (algumas) soluções e scripts R

BY  
RENATO ASSUNÇÃO

Departamento de Ciência da Computação  
UFMG, Brasil



Belo Horizonte  
PUBLISHED IN THE WILD

## **Prefácio**

Nas últimas duas décadas, houve uma importante mudança na teoria e na prática ...  
Falar sobre os alunos que colaboraram.

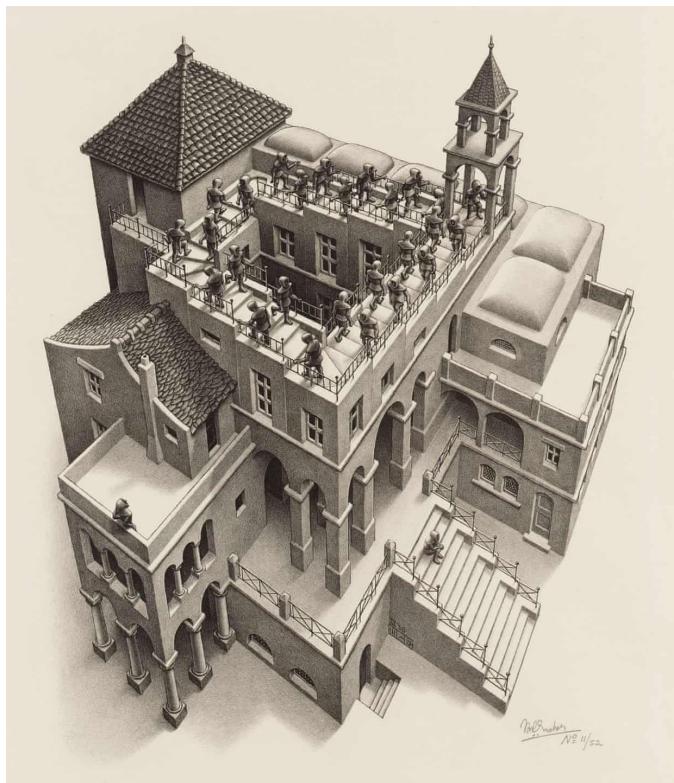
# Sumário

<b>1</b>	<b>Revisão de Matemática</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Probabilidade Básica</b>	<b>11</b>
2.1	Espaços de Probabilidade . . . . .	11
2.2	Probabilidade Condicional e Independência . . . . .	23
2.3	Classificação e probabilidade condicional . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Variáveis Aleatórias</b>	<b>31</b>
3.1	Variáveis aleatórias discretas . . . . .	32
3.2	Variáveis aleatórias contínuas . . . . .	36
3.3	Ajuste de distribuição . . . . .	40
<b>4</b>	<b>Transformação de uma v.a.</b>	<b>51</b>
<b>5</b>	<b>Simulação Monte Carlo</b>	<b>57</b>
<b>6</b>	<b>Vetores Aleatórios</b>	<b>65</b>
<b>7</b>	<b>Distribuição Gaussiana Multivariada</b>	<b>77</b>
<b>8</b>	<b>Modelos multivariados gaussianos</b>	<b>93</b>
8.1	PCA: Componentes Principais . . . . .	93
8.2	Análise Fatorial . . . . .	98
8.3	Análise Discriminante . . . . .	105
<b>9</b>	<b>Classificação</b>	<b>107</b>
<b>10</b>	<b>Iterated Expectation</b>	<b>117</b>
<b>11</b>	<b>Teoremas Limite: LGN e TCL</b>	<b>121</b>
<b>12</b>	<b>Régressão Linear</b>	<b>135</b>
<b>13</b>	<b>Régressão Logística</b>	<b>165</b>
<b>14</b>	<b>Regularização</b>	<b>167</b>
<b>15</b>	<b>Máxima Verossimilhança</b>	<b>169</b>
<b>16</b>	<b>Teoria da Estimação Pontual</b>	<b>185</b>
<b>17</b>	<b>Modelos Lineares Generalizados</b>	<b>191</b>

<b>18 Regressão Não-Paramétrica</b>	<b>193</b>
<b>19 Seleção de Modelos</b>	<b>195</b>
19.1 Entropia . . . . .	195
19.2 Distância de Kullback-Leibler . . . . .	195
19.3 Critério de Akaike . . . . .	195
19.4 MDL: Minimum Description Length . . . . .	195

# Capítulo 1

## Revisão de Matemática



Estes exercícios visam a uma revisão de fatos básicos de matemática e probabilidade que serão necessários durante a disciplina.

1. *Teoria de Conjuntos:* O objetivo é apenas verificar se você está informado sobre a diferença conceitual entre conjuntos enumeráveis e não-enumeráveis. Não é necessário saber provar que um conjunto é não-enumerável. Diga quais dos conjuntos abaixo é um conjunto enumerável e qual é não-enumerável:

- $\{0, 1, 2\}$
- naturais:  $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots\}$
- inteiros:  $\mathbb{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$
- reticulado inteiro no plano:  $\{(x, y); x \in \mathbb{Z}, y \in \mathbb{Z}\}$
- racionais:  $\mathbb{Q} = \{p/q; q > 0, p \in \mathbb{Z}, q \in \mathbb{N}\}$
- reais:  $\mathbb{R}$
- irracionais:  $\mathbb{R} - \mathbb{Q}$ .

2. *Propriedades básicas de expoentes.* Identifique abaixo quais igualdades estão corretas:

- $x^a y^a = (xy)^a$
- $\frac{a}{x+y} = \frac{a}{x} + \frac{a}{y}$
- $(x^a)^b = x^{ab}$
- $(x/y)^a = x^a/y^a$
- $(x+y)^a = x^a + y^a$
- $x^a y^b = (xy)^{a+b}$
- $(-x)^2 = -x^2$
- $\sqrt{x^2 + y^2} = |x| + |y|$
- $\frac{x+y}{a} = \frac{x}{a} + \frac{y}{a}$

3. Complete as sentenças abaixo:

- Os pontos  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  que satisfazem a equação  $x^2 + y^2 = 1$  formam ?? no plano real.
- Os pontos que satisfazem a equação  $x^2 + y^2 = 4$  formam ??.
- Os pontos que satisfazem a equação  $(x - 2)^2 + (y + 1)^2 = 1$  formam ??.
- Os pontos que satisfazem a equação  $\left(\frac{x-2}{2}\right)^2 + \left(\frac{y+1}{1}\right)^2 = 1$  formam ??.

4. *Propriedades básicas das funções exp e log.*

- Esboce o gráfico das funções  $f(x) = \log(3x+1)$  e  $f(x) = \exp(3x)$ . Identifique o maior domínio na reta em que as funções podem ser definidas.
- Obtenha as derivadas  $f'(x)$  das duas funções acima.
- Verifique quais das seguintes igualdades são válidas:
  - $\log(xy) = \log(x) + \log(y)$ .
  - $\log(x+y) = \log(x) \times \log(y)$ .
  - $\exp(x+y) = \exp(x) + \exp(y)$ .
  - $\exp(x+y) = \exp(x) \times \exp(y)$ .
  - $\log(x/y) = \log(x) - \log(y)$ .
  - $\exp(xy) = (\exp(x))^y$ .
  - $\exp(xy) = \exp(x) + \exp(y)$ .

5. Esboce o gráfico da função  $f(x) = \exp(-3(x-1)^2)$  e obtenha a sua derivada  $f'(x)$ . Esta função está associada com a distribuição de probabilidade normal ou gaussiana. Faça a mesma coisa com a função  $g(x) = \log(f(x))$ .

6. A função logística  $f(z) = 1/(1 + \exp(-z))$  é fundamental na análise de dados.

- Esboce o gráfico da função logística considerando o intervalo  $z \in (-3, 3)$ .
- Apenas olhando o gráfico de  $f(z)$ , sem fazer nenhum cálculo, diga: (a) qual o ponto  $z$  em que a derivada atinge o valor máximo; (b) a medida que  $z \rightarrow \infty$ , o valor da derivada  $f'(z)$  vai para que valor? (c) e quando  $z \rightarrow -\infty$ ?
- Apenas olhando o gráfico de  $f(z)$ , sem fazer nenhum cálculo, diga dos gráficos apresentados na Figura 1.1 representa a função derivada  $f'(z)$ .
- Obtenha a expressão matemática de  $f'(z)$  e mostre que ela pode ser expressa como  $f'(z) = f(z)(1 - f(z))$ .

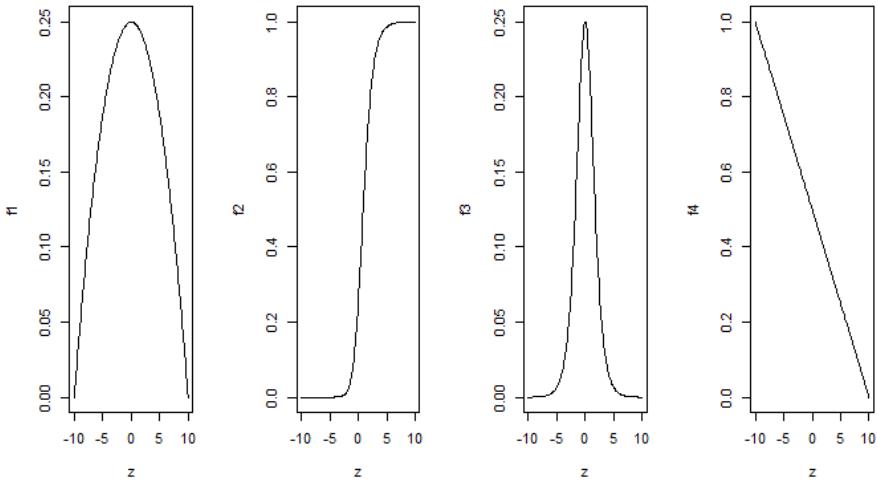


Figura 1.1: Qual desses gráficos representa a a função derivada  $f'(z)$  da função logística  $f(z) = 1/(1 + \exp(-z))$ ?

7. *Expansão de Taylor até segunda ordem.* Esta é uma das fórmulas mais úteis em matemática. Ela permite aproximar uma função  $f(x)$  muito complicada por uma função bem mais simples, um polinômio de segundo grau. Polinômios de segundo graus são facilmente deriváveis, possuem raízes e ponto de máximo ou mínimo conhecidos e, muito importante, são muito fáceis de se integrar. Assim, ao invés de trabalhar coma função complicada  $f(x)$ , trabalhamos com a sua aproximação polinomial.

Precisamos escolher um ponto de referência  $x_0$  e a aproximação de Taylor vale para os pontos  $x$  no entorno desse ponto de referência  $x_0$ . Este entorno varia de problema para problema. A expansão de Taylor da função  $f$  no ponto  $x$  próximo de  $x_0$  é o polinômio  $P(x)$  dado por

$$f(x) \approx P(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2$$

Essencialmente, todas as funções que aparecem na prática da análise de dados podem ser aproximadas pela expansão de Taylor.

- Obtenha a expressão aproximada para  $f(x) = \exp(x)$  para  $x \approx x_0 = 0$ .
- Faça um gráfico com as duas funções,  $f(x)$  e sua aproximação de Taylor de 2a. ordem, para  $x \in (-1, 2)$ .
- Repita com  $x_0 = 1$ : obtenha a expressão aproximada para  $f(x) = \exp(x)$  para  $x \approx x_0 = 1$ . Observe que os coeficientes do polinômio  $P(x)$  mudam com o ponto de referência  $x_0$ .
- Faça um gráfico com as duas funções,  $f(x)$  e sua aproximação de Taylor de 2a. ordem, para  $x \in (-1, 2)$ .

Você deve obter gráficos iguais ao da Figura 1.2.

8. Na expansão de Taylor, boas aproximações numa região mais extensa em torno do ponto de referência  $x_0$  podem ser obtidas usando um polinômio de grau mais elevado (o que implica calcular derivadas de ordens mais elevadas):

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_0)(x - x_0)^4 + \dots$$

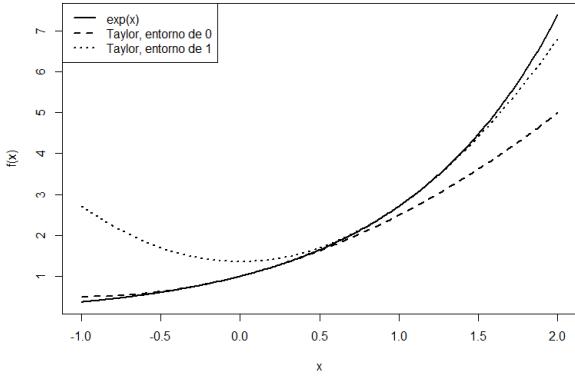


Figura 1.2: Aproximação de Taylor até a segunda ordem de  $f(x) = e^x$  em torno de  $x_0 = 0$  e em torno de  $x_0 = 1$ .

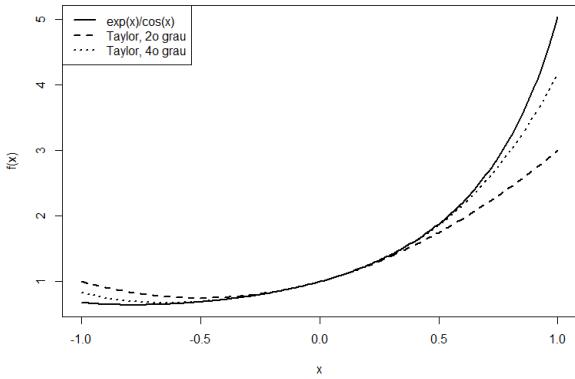


Figura 1.3: Aproximação de Taylor até a segunda e a quarta ordem de  $f(x) = e^x / \cos(x)$  em torno de  $x_0 = 0$  no intervalo  $(-1, 1)$ .

Por exemplo, em torno de  $x_0 = 0$  e usando a expansão até a 4a. ordem , temos

$$\frac{e^x}{\cos(x)} \approx 1 + x + x^2 + \frac{2x^3}{3} + \frac{x^4}{2}$$

Faça um gráfico de  $f(x) = e^x / \cos(x)$  com a aproximação até a segunda ordem (basta usar os primeiros 3 termos acima) e até a quarta ordem para  $x \in (-1, 1)$ . Você deve obter um gráfico igual ao da Figura 1.3.

9. Considere a seguinte matriz  $5 \times 3$  contendo dados de 5 apartamentos colocados a venda em BH:

$$\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1 \mid \mathbf{X}_2 \mid \mathbf{X}_3] = \begin{bmatrix} 1 & 153 & 2 \\ 1 & 107 & 1 \\ 1 & 238 & 3 \\ 1 & 179 & 2 \\ 1 & 250 & 4 \end{bmatrix}$$

Cada linha possui dados de um apartamento distinto. A primeira coluna contem apenas o valor constante 1 e é representada pelo vetor coluna  $\mathbf{X}_1 \in \mathbb{R}^5$ . A segunda coluna mostra a área (em

metros quadrados) de cada apto é representada pelo vetor coluna  $\mathbf{X}_2 \in \mathbb{R}^5$ . A terceira coluna,  $\mathbf{X}_3$ , mostra o número de quartos do apto. Seja  $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_3)^t$  um vetor-coluna  $3 \times 1$ .

- Verifique que é válida a seguinte igualdade:  $\mathbf{X}\beta = \beta_0\mathbf{X}_0 + \beta_1\mathbf{X}_1 + \beta_3\mathbf{X}_3$  onde  $\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_3$  são os vetores-coluna da matriz  $\mathbf{X}$ .
  - Sejam  $v_1, \dots, v_k$  vetores em  $\mathbb{R}^5$  tais como, por exemplo, as 3 colunas da matriz  $\mathbf{X}$ . Verifique que o conjunto das combinações lineares desses vetores forma um sub-espaco vetorial do  $\mathbb{R}^5$  (basta checar a definição de sub-espaco vetorial).
  - V ou F? O conjunto  $\mathfrak{M}(\mathbf{X})$  das combinações lineares das colunas de  $\mathbf{X}$  é igual a  $\mathfrak{M}(\mathbf{X}) = \{\mathbf{X}\beta \mid \beta \in \mathbb{R}^3\}$  e é um sub-espaco vetorial do  $\mathbb{R}^5$ . Se V, qual a dimensão do sub-espaco vetorial  $\mathfrak{M}(\mathbf{X})$ ?
10. Uma manipulação algébrica que é muito comum em estatística envolve uma decomposição de soma de quadrados. Seja  $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)/n$  a média aritmética de  $x_1, \dots, x_n$ . Verifique que:
- $\sum_i (x_i - \bar{x})^2 = \sum_i x_i^2 - n\bar{x}^2$ .
  - Seja  $a \in \mathbb{R}$  uma constante qualquer. Some e subtraia  $\bar{x}$  dentro da expressão ao quadrado em  $\sum_i (x_i - a)^2$ , expanda a expressão ao quadrado e conclua que  $\sum_i (x_i - a)^2 = \sum_i (x_i - \bar{x})^2 + n(\bar{x} - a)^2$ .
  - A partir do item anterior, conclua que o valor de  $a \in \mathbb{R}$  que minimiza  $\sum_i (x_i - a)^2$  é o valor  $a = \bar{x}$ .
11. Nossa curso precisa usar vários resultados de álgebra de matrizes. Seja  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  um vetor-coluna  $n \times 1$  e  $\mathbf{A}$  uma matriz  $n \times n$ .  $\mathbf{A}'$  indica a matriz transposta de  $\mathbf{A}$ . As seguintes identidades matriciais são fundamentais em nosso curso. Verifique que elas estão corretas, checando que o lado direito é igual ao lado esquerdo.
- $\mathbf{x}' \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i,j} x_i x_j A_{ij}$
  - O comprimento (ao quadrado) do vetor  $\mathbf{x}$  é  $\sum_i x_i^2$  e pode ser obtido fazendo a seguinte conta matricial:  $\mathbf{x}' \mathbf{x} = \sum_i x_i^2$ . Assim,  $\mathbf{x}' \mathbf{x}$  é um escalar, um número real.
  - A operação reversa do item anterior,  $\mathbf{x} \mathbf{x}'$ , não é um escalar mas sim uma matriz simétrica  $n \times n$  com elemento  $(i, j)$  dado por  $x_i x_j$ .
12. O vetor gradiente é a extensão do conceito de derivada para funções de  $\mathbb{R}^n$  para  $\mathbb{R}$ . Para ser mais concreto, você pode imaginar a altura  $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2)$  de uma superfície  $f$  para cada posição  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  do plano  $\mathbb{R}^2$ . Seja

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\longrightarrow f(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

o vetor gradiente num ponto arbitrário  $(x_0, y_0)$  do plano é definido como:

$$\begin{aligned} \nabla : \mathbb{R}^2 &\longrightarrow \mathbb{R}^2 \\ (x_0, y_0) &\longrightarrow \nabla f(x_0, y_0) = \left[ \begin{array}{c} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{array} \right]_{(x_0, y_0)} \end{aligned}$$

As derivadas parciais são avaliadas no ponto  $(x, y)$ . O vetor gradiente aponta na direção de crescimento máximo da função  $f$  em torno do ponto  $(x, y)$ .

*Vetores serão sempre representados como vetores-coluna neste livro. O vetor gradiente é um vetor-coluna.*

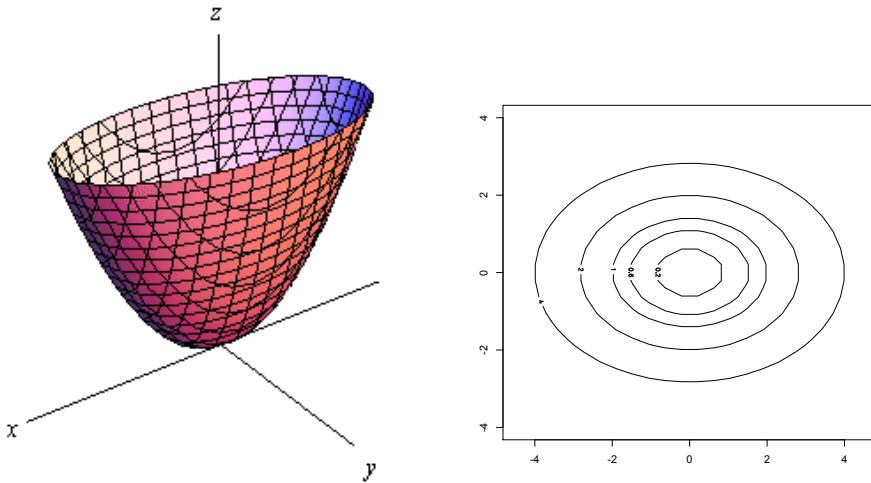


Figura 1.4: Gráfico da função  $z = f(x, y) = x^2/4 + y^2/2$ .

Considere  $z = f(x, y) = x^2/4 + y^2/2$ . A superfície definida por esta função é um parabolóide elíptico (ver Figura 1.4). Esta é uma superfície em forma de tigela. O fundo da tigela está na origem  $(0, 0)$ . A figura abaixo mostra as curvas de nível, definidas por  $f(x, y) = c$  dessa superfície. As curvas de nível são as elipses  $x^2/4 + y^2/2 = c$ .

- Mostre que o vetor gradiente num ponto  $(x, y)$  é dado por  $\nabla f(x, y) = [x/2, y]$ .
  - Esboce alguns desses vetores gradientes em diferentes pontos do gráfico das curvas de nível da Figura 1.4.
  - Suponha que  $\mathbf{x}$  é um ponto de máximo ou de mínimo da função  $f(\mathbf{x})$ . Sabe-se que  $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0} = (0, 0)^T$  nestes pontos de máximo ou de mínimo. Explique intuitivamente por quê isto deve ocorrer usando que o vetor gradiente aponta na direção de crescimento máximo da função.
13. A derivada mede o quanto  $f(\mathbf{x})$  varia quando  $\mathbf{x}$  sofre uma pequena perturbação. Os matemáticos perceberam que a quantidade desta variação em  $f(\mathbf{x})$  dependia da direção da perturbação com relação a  $\mathbf{x}$ . Imagine que passamos de um ponto  $\mathbf{x}$  para outro ponto  $\mathbf{x} + h\mathbf{u}$  onde  $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$  é um vetor de comprimento 1 e  $h > 0$  é um valor real positivo. A variação no valor da função  $f$  é dada por  $f(\mathbf{x} + h\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})$ . Esta variação depende de três coisas:
- elá depende do ponto  $\mathbf{x}$  em que estamos. Em certos pontos  $\mathbf{x}$ , a variação pode ser grande. Em outros pontos, ela pode ser pequena.
  - Ela depende de  $h$ , do quanto nos afastamos do ponto  $\mathbf{x}$  em que estamos. Se  $h$  for muito pequeno, praticamente não saímos de perto de  $\mathbf{x}$  e a variação tipicamente vai ser pequena (supondo que a função é contínua). Aumentando  $h$ , nós nos afastamos de  $\mathbf{x}$  e a função  $f$  pode mudar drasticamente.
  - Diferente do caso uni-dimensional, a variação depende também da *direção* em que nos afastamos de  $\mathbf{x}$ .

Por exemplo, se  $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ , a função  $f$  é chamada de parabolóide e seu gráfico pode ser visto na Figura 1.4. Observe que a função  $f$  é igual à distância ao quadrado entre o ponto  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  e a origem  $\mathbf{0} = (0, 0)$ . Portanto, se nos movimentarmos ao longo dos círculos concêntricos centrados na origem, o valor de  $f(x_1, x_2)$  não varia e sua derivada deveria ser zero. Isto é, suponha que estamos

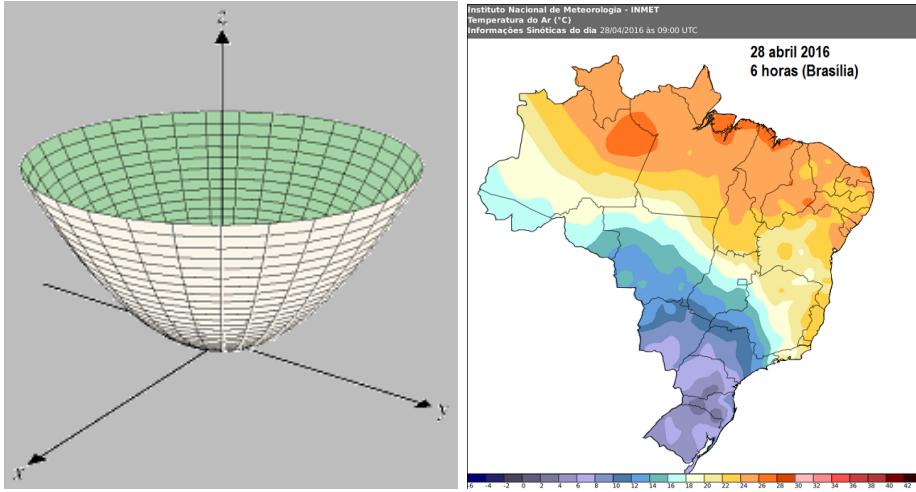


Figura 1.5: Esquerda: Gráfico da função  $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ . Direita: Curvas de nível de temperatura no dia 26 de abril de 2016, 6 horas (horário de Brasília).

num ponto  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  qualquer, a uma distância  $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$  da origem  $(0, 0)$ . Suponha que nos movimentamos ligeiramente, *mas ainda mantendo a mesma distância r da origem*. Isto é, nos movimentamos andando um pouco ao longo do círculo de raio  $r$  em torno da origem. Neste caso, a função  $f$  não muda de valor e portanto sua variação *nesta direção* é igual a zero. Um ligeiro movimento ao longo da direção tangente ao círculo concêntrico deveria implicar numa derivada igual a zero.

Por outro lado, se nos movimentarmos em outras direções, a variação de  $f$  pode ser positiva ou negativa. Por exemplo, se sairmos do ponto  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  nos afastando na direção do vetor  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  (ao longo da linha que conecta o ponto à origem), a função vai aumentar de valor. Veja o gráfico. Se nos aproximarmos do centro ao longo dessa linha que conecta  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  e a origem, a função  $f$  diminui o seu valor.

Quando  $h$  é pequeno, a variação  $f(\mathbf{x} + h\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})$  no valor da função  $f$  é obtida calculando a *derivada direcional* ao longo da direção do vetor  $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$  de comprimento um. Esta derivada direcional é o produto interno do vetor gradiente  $\nabla f(\mathbf{x})$  pelo vetor  $\mathbf{u}$ . Isto é

$$f(\mathbf{x} + h\mathbf{u}) \approx f(\mathbf{x}) + h \nabla f(\mathbf{x}) \bullet \mathbf{u} \quad (1.1)$$

Considerando a  $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ , o parabolóide mostrado na Figura 1.4, responda:

- Qual o vetor gradiente  $\nabla f(\mathbf{x})$ ? Esboce este vetor para alguns pontos do plano. Como este vetor gradiente varia?
- Obtenha o valor aproximado de  $f(\mathbf{x} + h\mathbf{u})$  usando (1.1) nas seguintes situações:
  - $\mathbf{x} = (1, 1)$ ,  $h = 0.1$  e  $\mathbf{u} = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ .
  - Como acima, exceto que  $\mathbf{u} = -(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ .
  - Como acima, exceto que  $\mathbf{u} = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2})$ .
- Por quê os resultados foram tão diferentes nos três casos acima? Desenhe as curvas de nível da função, o vetor gradiente no ponto  $\mathbf{x} = (1, 1)$  e os três vetores  $\mathbf{u}$  considerados.
- Identifique o ponto em que a função varia pouco em qualquer direção  $\mathbf{u}$ . Isto é intuitivo? Olhe a Figura 1.4.
- Obtenha o valor aproximado de  $f(\mathbf{x} + h\mathbf{u})$  usando (1.1) quando  $\mathbf{x} = (0, 0)$ ,  $h = 0.1$  e  $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ .

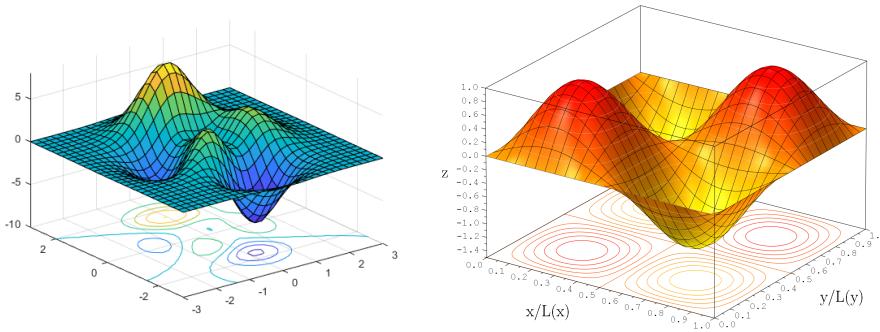


Figura 1.6: Gráficos de funções  $f(x, y)$  e suas curvas de nível.

14. Considere o mapa de curvas de nível de temperatura na Figura 1.5. Se você estiver em Brasília, em que direção você deve mover-se para diminuir ao máximo a temperatura? Se  $T = T(x, y)$  é a função temperatura como função da localização no mapa, qual é o gradiente  $\nabla T(x_B, y_B)$  na posição  $(x_B, y_B)$  correspondente a Brasília. O que acontece com a temperatura se fizermos um pequeno deslocamento  $(x_B + s, y_B + t)$  movendo-nos perpendicularmente ao gradiente  $\nabla T$ . Isto é,  $(s, t)$  é um pequeno vetor perpendicular ao vetor  $\nabla T(x_B, y_B)$ .
15. A Figura 1.6 mostra duas funções  $f(x, y)$  com suas curvas de nível. Identifique os pontos no plano onde o vetor gradiente  $\nabla f(x, y)$  é o vetor zero. De forma aproximada, identifique também alguns pontos em que este vetor terá comprimento máximo.
16. *Expansão de Taylor multivariada de primeira ordem.* Seja

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\longrightarrow f(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

uma função que mapeia vetores  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  em escalares  $f(\mathbf{x})$ . Fixe um ponto de referência  $\mathbf{x}_0 = (x_{10}, \dots, x_{n0})$ . Podemos obter uma aproximação para o valor de  $\mathbf{x}$  se  $\mathbf{x}$  é um ponto no entorno de  $\mathbf{x}_0$ . Esta aproximação é uma forma polinomial envolvendo as coordenadas de  $\mathbf{x}$ . A aproximação de primeira ordem é dada por:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_0) + (\nabla f(\mathbf{x}_0))' \bullet (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (1.2)$$

$$= f(\mathbf{x}_0) + \left[ \frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right] (\mathbf{x}_0) \bullet \begin{bmatrix} x_1 - x_{10} \\ x_2 - x_{20} \\ \vdots \\ x_n - x_{n0} \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

onde  $\mathbf{x}'$  é o vetor  $\mathbf{x}$  transposto (um vetor-linha,  $1 \times n$ ). Observe que o vetor gradiente  $\nabla f(\mathbf{x}_0)$  é avaliado no ponto de referência  $\mathbf{x}_0 = (x_{10}, \dots, x_{n0})$ .

- Considere a função  $f(x, y) = x^2 + \exp(xy)$  e obtenha a aproximação de Taylor de primeira ordem usando  $\mathbf{x}_0 = (1, 1)$ . Repita usando  $\mathbf{x}_0 = (-1, 1)$ .
- Verifique que nos dois casos acima a aproximação de Taylor de primeira ordem é um plano que passa pelo ponto  $(\mathbf{x}_0, f(\mathbf{x}_0))$  (isto é, o plano encosta na superfície  $f(\mathbf{x})$  no ponto  $\mathbf{x}_0$ ) e que possui inclinações ao longos dos eixos dadas pelas derivadas parciais (availadas em  $\mathbf{x}_0$ ). Este é o plano tangente à superfície passando pelo ponto  $(\mathbf{x}_0, f(\mathbf{x}_0))$ .
- Considere agora uma função  $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sqrt{x_1 x_2 \dots x_n} + \cos(x_1 + \dots + x_n)$  e obtenha a aproximação de Taylor de primeira ordem usando  $\mathbf{x}_0 = (1, 1, \dots, 1)$ .

17. Segunda ordem na expansão de Taylor multivariada. Seja

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\longrightarrow f(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

uma função que mapeia vetores  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  em escalares  $f(\mathbf{x})$ . Fixe um ponto de referência  $\mathbf{x}_0 = (x_{10}, \dots, x_{n0})$ . Defina a *matriz hessiana*  $n \times n$  num ponto  $\mathbf{x}_0$  como sendo

$$Hf(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

onde cada uma das derivadas parciais de segunda ordem  $\partial^2 f / \partial x_i \partial x_j$  é avaliada no ponto  $\mathbf{x}_0$ .

Queremos uma aproximação para o valor de  $f(\mathbf{x})$  onde  $\mathbf{x}$  está em torno do ponto de referência  $\mathbf{x}_0$ . Seja  $\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots, d_n) = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = (x_1 - x_{01}, x_2 - x_{02}, \dots, x_n - x_{0n})$ . A aproximação de segunda ordem para  $\mathbf{x}$  é

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_0) + (\nabla f(\mathbf{x}_0))' \bullet (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)' \bullet Hf(\mathbf{x}_0) \bullet (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (1.5)$$

$$= f(\mathbf{x}_0) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{x}_0) d_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0) d_i d_j \quad (1.6)$$

Considere a função  $f(x, y)$  definida para  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  de forma que  $f(x, y) = x \exp(-(x^2 + y^2)/2)$ .

- Obtenha a matriz hessiana em dois casos: primeiro, usando  $\mathbf{x}_0 = (1, 1)$  e depois, usando  $\mathbf{x}_0 = (0, 0)$ .
- Obtenha a aproximação de segunda ordem de Taylor para  $f(x, y)$  com  $(x, y)$  em torno do ponto  $(1, 1)$ .
- Obtenha a aproximação usando  $\mathbf{x}_0 = (0, 0)$ .

18. O conceito de derivada pode ser estendido para funções  $f$  de  $\mathbb{R}^n$  em  $\mathbb{R}^m$ . Neste caso, a derivada é uma matriz  $m \times n$ . Seja

$$\begin{aligned} \mathbf{f} : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\ \mathbf{x} &\longrightarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})) \end{aligned}$$

onde cada componente  $f_j(\mathbf{x})$  é uma função de  $\mathbb{R}^n$  para  $\mathbb{R}$ . A derivada  $Df(\mathbf{x})$  no ponto de referência  $\mathbf{x}_0$  é dado por  $\partial f_i / \partial x_j$  avaliado em  $\mathbf{x}_0$ .

- Suponha que  $\mathbf{f} : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^3$  é dada por

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(x, y) = (f_1(x, y), f_2(x, y)) = (x^2 \cos(y), \sin(xy), \exp(x + y))$$

Obtenha a derivada desta função no ponto  $\mathbf{x}_0 = (1, 2)$ .

- Seja  $\mathbf{f}(x) = (x, 2x^2, 3x^3)$  onde  $x \in \mathbb{R}$ . Obtenha a derivada de  $\mathbf{f}$  em  $x = -1$ .
- A matriz  $Df(\mathbf{x})$  pode ser vista como composta dos  $m$  vetores gradientes  $\nabla f_i$  associados com as funções escalares  $f_i(\mathbf{x})$ . Explique esta afirmativa. Isto é, qual a relação entre a matriz  $Df(\mathbf{x})$  e os  $m$  vetores gradientes  $\nabla f_i$ ?

- Seja  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$  onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz  $m \times n$  e  $\mathbf{x}$  é um vetor-coluna  $n \times 1$ . Obtenha a derivada  $Df(\mathbf{x})$ . Ela depende do ponto  $\mathbf{x}$ ?
  - Seja  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{Ax}$  onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz quadrada  $n \times n$ ,  $\mathbf{x}$  é um vetor-coluna  $n \times 1$  e  $\mathbf{x}'$  significa a transposição de  $\mathbf{x}$ . Obtenha a derivada  $Df(\mathbf{x})$ . Ela depende do ponto  $\mathbf{x}$ ? O que é esta derivada se  $\mathbf{A}$  for uma matriz simétrica? (RESP:  $Df(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'(\mathbf{A} + \mathbf{A}')$ ; sim, depende de  $\mathbf{x}$ ; no caso simétrico temos  $Df(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}'\mathbf{A}$ ).
19. Toda reta não-vertical no plano pode ser representada por uma equação do seguinte tipo:  $y = \beta_0 + \beta_1 x$  onde  $\beta_0$  e  $\beta_1$  são números reais e chamados de coeficientes da reta.
- Esboce no plano as seguintes retas:  $y = 2 + x$ ;  $y = -2 - 2x$ ;  $y = 2x$ ; e  $y = 4 + 0x$  ( $= 4$ ).
  - Qual a interpretação geométrica dos coeficientes  $\beta_0$  e  $\beta_1$ ?
  - Por quê uma reta vertical não pode ser representada pela expressão  $y = \beta_0 + \beta_1 x$ ? Se você quiser representar algébricamente uma reta vertical, como poderia fazê-lo?
  - *Reparametrização:* Considere a seguinte representação  $y = \beta_0 + \beta_1(x - 1)$ . Ela continua a representar uma reta? Qual a interpretação dos coeficientes  $\beta_0$  e  $\beta_1$  nesta representação?
  - Suponha que uma reta no plano seja escrita como  $y = \beta_0 + \beta_1 x$ . Queremos que esta mesma reta seja representada pela expressão  $= a_0 + a_1(x - 1)$ . Qual a relação entre os coeficientes  $(a_0, a_1)$  e  $(\beta_0, \beta_1)$ ?
20. Um ponto em  $\mathbb{R}^3$  é representado como  $(x_1, x_2, y)$ . Considere a expressão  $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$  onde  $\beta_0, \beta_1$  e  $\beta_2$  são constantes. Por exemplo, escolhendo  $\beta_0 = 2$ ,  $\beta_1 = 0.1$  e  $\beta_2 = -1.7$ , temos  $y = 2 + 0.1x_1 - 1.7x_2$ . O conjunto dos pontos  $(x_1, x_2, y)$  que satisfazem esta expressão formam um objeto geométrico no espaço. Que objeto é este? O que representam os coeficientes  $\beta_0, \beta_1$  e  $\beta_2$  em termos deste objeto geométrico?

## Capítulo 2

# Probabilidade Básica



### 2.1 Espaços de Probabilidade

1. O experimento aleatório consiste em lançar um mesmo dado independentemente duas vezes em sequência e observar o resultados nas faces faces. Escreva uma representação para o espaço amostral  $\Omega$ . Identifique os seguintes eventos como subconjuntos de  $\Omega$ : (a) O primeiro dado possui face maior que 4; (b) O primeiro dado possui face maior que 3 e o segundo dado possui face maior 4; (c) O segundo dado possui face maior que 4; (d) A soma das duas faces é igual ou maior que 10; (e) pelo menos uma das faces é par; (f) as duas faces somadas resultam em número maior ou igual a 13.

**Solução:** (e): obtenha por complementaridade: todos os elementos de  $\Omega$  exceto aqueles em que ambas as faces sejam números ímpares. (f)  $\emptyset$ .

2. O experimento aleatório consiste em selecionar um ponto completamente ao acaso do quadrado unitário  $\Omega = [0, 1]^2$  do plano euclidiano. A probabilidade de o ponto aleatório venha de uma região que ocupe metade do quadrado é  $1/2$ . A probabilidade de que venha de uma região que ocupa  $1/4$  da área de  $\Omega$  é  $1/4$ . De maneira geral, como  $\Omega$  possui área total igual a 1, a probabilidade  $\mathbb{P}(A)$  de um certo evento  $A$  é simplesmente a área determinada pelo evento  $A$ . Sejam  $A = \{(x, y) : x < 1/2 \text{ e } y < 1/2\}$ ,  $B = \{(x, y) : x < 1/4 \text{ e } y < 1/4\}$ ,  $C = \{(x, y) : x < 1/4 \text{ OU } y < 1/4\}$  e  $D = \{(1/2, 1/2)\}$  ( $D$  é o conjunto formado apenas pelo ponto central). Obtenha:  $\mathbb{P}(A)$ ,  $\mathbb{P}(B)$ ,  $\mathbb{P}(B^c)$ ,  $\mathbb{P}(C)$ ,  $\mathbb{P}(A \cup C)$ ,  $\mathbb{P}(A \cup B^c)$ ,  $\mathbb{P}(D)$ ,  $\mathbb{P}(A \cap D)$ .

**Solução:**

- $\mathbb{P}(A) = (1/2)^2 = 1/4$ ;  $\mathbb{P}(B) = (1/4)^2 = 1/16$ ;

- $\mathbb{P}(B^c) = 1 - \mathbb{P}(B) = 1 - 1/16 = 15/16$
- $\mathbb{P}(C) = 1/4 + 1/4 \times 3/4 = 7/16$
- $\mathbb{P}(A \cup C) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(C) - \mathbb{P}(A \cap C) = 1/4 + 7/16 - (1/4 \cdot 1/2 + 1/4 \cdot 1/4) = 8/16$
- $\mathbb{P}(A \cup B^c) = \mathbb{P}(\Omega) = 1$
- $\mathbb{P}(D) = 0$
- $\mathbb{P}(A \cap D) = \mathbb{P}(\emptyset) = 0.$

3. Considere o exemplo do micro-mercado com apenas 3 produtos possíveis:  $A$ ,  $B$ , e  $C$ . Obtenha o evento representando as seguintes situações: (a) levar o produto  $A$ , mas não o produto  $C$ ; (b) levar o produto  $A$  e talvez também o produto  $C$ ; (c) levar o produto  $A$  e também o produto  $C$ ; (d) não levar nenhum produto; (e) levar o produto  $A$  e não levar nenhum produto; (f) um cliente levar o produto  $A$  em duas compras sucessivas; (g) levar o produto  $Z$ ; (h) um cliente levar o produto  $A$  e o próximo cliente também levar o produto  $A$ .

**Solução:** (a)  $E = \{A, AB\}$ ; (b)  $E = \{A, AB, AC, ABC\}$ ; (c)  $E = \{AC, ABC\}$ ; (d)  $E = \{0\}$ ; (e)  $E = \emptyset$  (veja que (d) e (e) são diferentes); (f) esta situação não possui representação em  $\Omega$ . Os estados do mundo considerados não levam em conta o id do cliente nem o segume no tempo. Isto implica que não podemos representar essa situação como um evento (subconjunto desse  $\Omega$ ) e portanto não teremos associar uma probabilidade para ele. (g) como no caso anterior, o produto  $Z$  não entrou no conjunto  $\Omega$  e portanto não temos eventos e nem podemos calcular probabilidades associadas com  $Z$ ; (h) a representação  $\Omega$  não envolve nenhum aspecto temporal, esse evento não tem representação em  $\Omega$ .

4. Uma função de probabilidade  $\mathbb{P}$  satisfaz aos três axiomas de Kolmogorov. Prove as seguintes propriedades derivadas destes três axiomas:

- (P1)  $\mathbb{P}(A^C) = 1 - \mathbb{P}(A)$
- (P2)  $0 \leq \mathbb{P}(A) \leq 1$  para todo evento  $A \in \mathcal{A}$ .
- (P3) se  $A_1 \subset A_2 \implies \mathbb{P}(A_1) \leq \mathbb{P}(A_2)$
- (P4)  $\mathbb{P}(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_i) \leq \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_i)$
- (P5)  $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B)$ . Esta propriedade é o caso geral de  $\mathbb{P}(A \cup B)$

5. Para medir a reação a certo vídeo postado na web, os comentários sucessivos de usuários são classificados como positivos (P) ou negativos (N). Isto é feito até que dois comentários positivos sucessivos ocorram ou quatro comentários sejam postados, aquilo que ocorrer primeiro. Descreva um espaço amostral  $\Omega$  para este experimento aleatório.

**Solução:**

$$\Omega = \{PP, NPP, NNPP, PNPP, NNNN, PNNN, NPNN, NNPN, NNNP, PNPN, NPNP, PNNP\}$$

6. Um experimento A/B numa página da Web tenta inferir se uma mudança de layout na página leva a um maior número de clicks num certo anúncio. Um número  $r$  de clientes acessando a página é acompanhado. No primeiro experimento, cada cliente é acompanhado por até 2 minutos ao fim dos quais passa-se a acompanhar o próximo cliente. Assim, os  $r$  clientes são sequencialmente com o sistema monitorando apenas um deles de cada vez. O experimento é encerrado quando o primeiro dos  $r$  clientes clica no anúncio (sem verificar o que os demais clientes farão) ou quando chegarmos ao cliente  $r$  sem que nenhum deles tenha clicado no anúncio. Descreva um espaço amostral  $\Omega$  para este experimento aleatório. Num segundo experimento, todos  $r$  clientes são acompanhados registrando-se para cada um deles se o anúncio foi clicado ou não. Descreva um espaço amostral  $\Omega$  para este segundo experimento aleatório.

**Solução:** Representando por  $C$  um clique e por  $N$  um não-clique, temos:

$$\Omega = \{C, NC, NNC, NNNC, \dots, \underbrace{N \dots N}_{r-1 \text{ termos}} C, \underbrace{N \dots N}_{r \text{ termos}} N\}.$$

No segundo experimento, temos

$$\Omega = \{(a_1, a_2, \dots, a_r) : a_i = N \text{ ou } C \text{ para } i = 1, \dots, r\}$$

7. Num experimento de HCI, cada usuário deve ordenar suas preferências com relação a quatro objetos rotulados como  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$ . Descreva um espaço amostral  $\Omega$  para este experimento aleatório considerando um único usuário. Considere os eventos  $A$  e  $B$  definidos da seguinte forma:  $A$  representa os resultados em que  $a$  está entre as duas primeiras posições na ordenação. O evento  $B$  significa que  $b$  foi colocado numa posição par. Mostre o que são os elementos  $\omega \in \Omega$  que representam  $A$ ,  $B$ ,  $A \cap B$  e  $A \cup B$ .

**Solução:**  $\Omega$  é o conjunto de todas as  $4!$  permutações da 4-upla  $abcd$ .  $A$  é o subconjunto da  $2 \times 3!$  4-uplas em que  $a$  está na primeira ou segunda posição.  $B$  é o subconjunto da  $2 \times 3!$  4-uplas em que  $b$  está na segunda ou na quarta posição.  $A \cap B = \{cadb, dacb, abcd, abdc, acdb, adcb\}$  e  $A \cup B = \{axxx, xaxx, xbxx, xxxb\}$  onde  $x$  representa um dos outros símbolos.

8. Um lote contém itens com pesos iguais a  $5, 10, 15, \dots, 50$  quilos. Suponha que pelo menos dois itens de cada peso são encontrados no lote. Dois itens são escolhidos do lote. Denote por  $X$  denota o peso do primeiro item escolhido e  $Y$  o peso do segundo item. Portanto o par de números  $(X, Y)$  representa um único resultado do experimento. Usando o plano euclidiano, descreva um espaço de amostragem e os seguintes eventos: (a)  $A = \{(x, y) : x = y\}$  (b)  $B = \{(x, y) : x < y\}$  (c) o segundo item é duas vezes mais pesado que o primeiro item. (d) o primeiro item pesa 10 quilos a menos do que o segundo item. (e) O peso médio dos dois itens é superior a 40 quilos.

**Solução:** (a)  $A = \{(5, 5), (10, 10), \dots, (50, 50)\}$   
 (b)  $B = \{(5, 10), (5, 15), \dots, (5, 50), (10, 15), \dots, (10, 50), \dots, (45, 50)\}$   
 (c)  $C = \{(5, 10), (10, 20), (15, 30), (20, 40), (25, 50)\}$   
 (d)  $D = \{(5, 15), (10, 20), (15, 25), (20, 30), (25, 35), (30, 40), (35, 35), (40, 50)\}$   
 (e)  $E = \{(50, 50), (50, 45), (45, 50), (50, 40), (40, 50), (45, 45), (45, 40)\}$

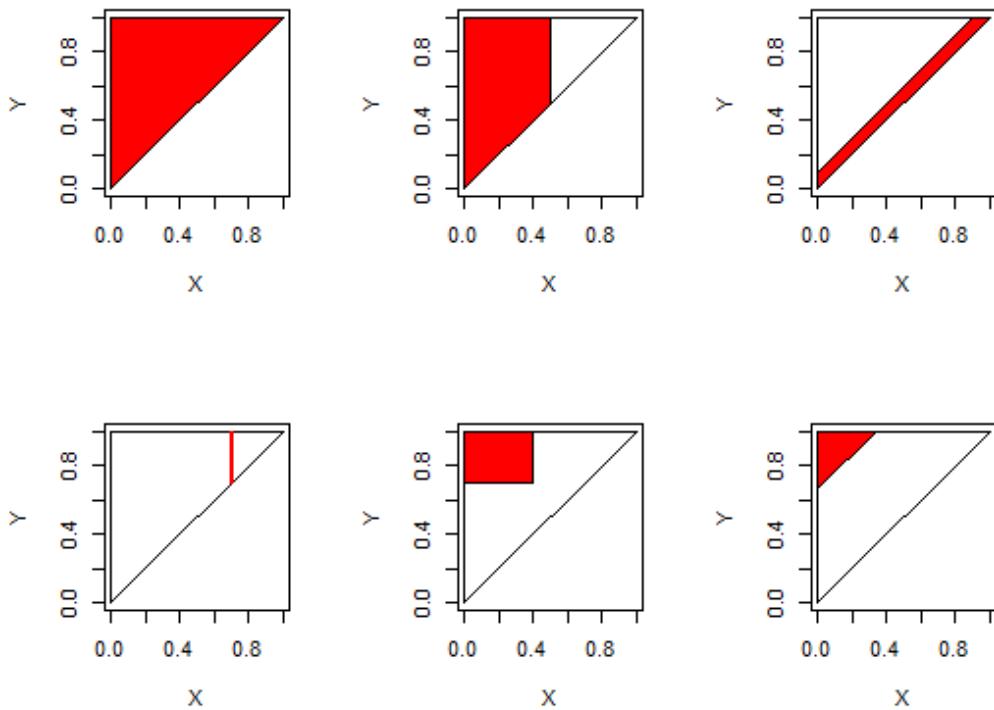


Figura 2.1: Espaço amostral  $\Omega$  e eventos (a) - (e) para problema 9.

9. Uma variável binária inicia-se com o valor  $F$ . Ela recebe o valor  $T$  (true) em algum momento aleatório  $X$  no intervalo de tempo entre 0 e 1. Em algum momento  $Y$  posterior e antes do tempo  $t = 1$ , ela volta a ficar com o valor  $F$  (false). O resultado do experimento é o par  $(X, Y)$ . Descreva um espaço amostral  $\Omega$  para este experimento aleatório. Descreva e marque no plano os seguintes eventos: (a) A variável recebe  $T$  antes do tempo 0.5. (b) A variável possui o valor  $T = \text{TRUE}$  por um período de tempo menor ou igual a 0.1 (c) A variável tem valor  $T$  no tempo  $z$  onde  $z$  é algum instante fixo no intervalo  $[0, 1]$ . (d) A variável torna-se  $T$  em um tempo  $z_1$  e volta a ser  $F$  antes de  $z_2$  (com  $0 < z_1 < z_2 < 1$ ). (e) A variável possui o valor  $T$  por um tempo pelo menos duas vezes mais longo que com o valor  $F$ .

**Solução:** A Figura 2.1 mostra em vermelho o espaço amostral  $\Omega$  e os eventos das letras (a) a (e). O código R para as figuras está abaixo:

```

plotaux = function()
plot(c(0,1), c(0,1), type="n", xlab="X", ylab="Y");
polygon(c(0,0,1),c(0,1,1))

par(mfrow=c(2,3), pty="s")
plotaux(); polygon(c(0,0,1), c(0,1,1), col="red")
plotaux(); polygon(c(0,0.5,0.5,0), c(0,0.5,1,1), col="red")
plotaux(); polygon(c(0,0,0.9,1),c(0,0.1,1,1),col="red")
plotaux(); polygon(c(0,0,1), c(0,1,1))
segments(0.7, 0.7, 0.7, 1, col="red", lwd=2)
plotaux(); polygon(c(0,0.4,0.4,0),c(0.7,0.7,1,1),col="red")

```

```
plotaux(); polygon(c(0, 1/3, 0),c(2/3,1,1),col="red")
```

Eu usei  $z = 0.7$  em (c) e  $z_1 = 0.4$  e  $z_2 = 0.7$  em (d). Para a letra (e), queremos que o tempo total com valor  $F$  (que é  $x + (1 - y)$ ) seja pelo menos duas vezes maior que o tempo com o valor  $T$  (que é  $y - x$ ). Assim, queremos  $y - x > 2(x + 1 - y)$ , o que implica em  $y > 2/3 + x$ .

10. Numa rede social, um indivíduo possui 10 links sendo 4 deles homens e 6 mulheres. Um procedimento de amostragem está coletando dados da rede e extrai um dos links completamente ao acaso verificando que é mulher. Se um segundo link, diferente do primeiro, é extraído, qual a probabilidade de que seja mulher?

**Solução:** Após extrair um link mulher, restam 9 links, sendo 5 deles de mulheres. Portanto a probabilidade é  $5/9$ .

11. Em cada linha da tabela abaixo temos algumas atribuições de probabilidade para um espaço amostral  $\Omega$  composto por cinco elementos. Diga quais delas são atribuições válidas.

	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$	$\omega_4$	$\omega_5$
$A_1$	0.3	0.2	-0.1	0.4	0.2
$A_2$	0.1	0.2	0.1	0.4	0.2
$A_3$	1.0	1.2	1.0	1.2	1.0
$A_4$	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
$A_5$	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
$A_6$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.2
$A_7$	0.0	0.0	0.5	0.0	0.5
$A_8$	0	0	0	0	0.9999

**Solução:** As linhas  $A_1$ ,  $A_3$ ,  $A_6$ ,  $A_8$  não são atribuições válidas.

12. Uma tarefa é repetida até que o primeiro sucesso seja registrado. O espaço amostral é formado por  $\Omega = \{1, 2, 3, \dots\}$ , o conjunto dos inteiros não-nulos e positivos representando o número de tentativas até que o primeiro sucesso ocorra. Sugere-se que a chance do primeiro sucesso ocorrer na  $k$ -ésima tentativa seja dada por  $\mathbb{P}(k)$  de acordo com os possíveis modelos abaixo. Diga quais são modelos probabilísticos válidos.

- (a)  $\mathbb{P}(k) = (0.1)(0.9)^{k-1}$  para  $k \in \Omega$
- (b)  $\mathbb{P}(k) = (0.1)(0.9)^k$  para  $k \in \Omega$
- (c)  $\mathbb{P}(k) = (0.9)^{k-1}$  para  $k \in \Omega$
- (d)  $\mathbb{P}(1) = 0.73$  e  $\mathbb{P}(k) = (0.03)(0.9)^{k-1}$  para  $k \geq 2$

**Solução:** (a) e (d) são as corretas.

13. Um servidor só pode ter três tipos diferentes de causas de falhas,  $A$ ,  $B$  e  $C$ . As causas de falhas não co-ocorrem, apenas um tipo delas ocorre se existe uma falha. Suponha que  $A$  ocorra duas vezes mais frequentemente que  $B$ , senda esta quatro mais frequente que  $C$ . Quando ocorre uma falha, qual é a probabilidade de que ela seja devida a cada um dos três tipos?

**Solução:** Como as falhas não ocorrem, se houver uma falha deve ser causada por uma, e apenas uma delas. Assim, supondo que ocorre uma falha, temos

$$1 = \mathbb{P}(A \cup B \cup C) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) + \mathbb{P}(C)$$

Sabemos que  $\mathbb{P}(A) = 2\mathbb{P}(B)$  e que  $\mathbb{P}(B) = 4\mathbb{P}(C)$ . Portanto,

$$1 = 2(4\mathbb{P}(C)) + 4\mathbb{P}(C) + \mathbb{P}(C) = 13\mathbb{P}(C).$$

Em conclusão,  $\mathbb{P}(C) = 1/13$ ,  $\mathbb{P}(B) = 4/13$  e  $\mathbb{P}(A) = 8/13$ .

14. Suponha que  $A$ ,  $B$  e  $C$  sejam eventos tais que  $\mathbb{P}(A) = 1/4$ ,  $\mathbb{P}(B) = 1/4$  e  $\mathbb{P}(C) = 1/2$ . Além disso,  $\mathbb{P}(A \cap B) = 1/8$  e  $\mathbb{P}(A \cap C) = 1/8$ . Marque V ou F:
- $\mathbb{P}(A \cup B \cup C) = 1$
  - $\mathbb{P}(B \cap C) = 1/8$
  - $\mathbb{P}(A \cup B) = 3/8$
  - $\mathbb{P}(A \cup B \cup C) < 1$
  - $\mathbb{P}(C) > \mathbb{P}(A \cup B)$
  - $\mathbb{P}(A \cap B \cap C) \leq 1/8$

**Solução:** FFVVVV

Na letra (e),  $1/2 = \mathbb{P}(C) > 1/4 + 1/4 - 1/8 = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A \cup B)$ . Na letra (f),  $\mathbb{P}(A \cap B \cap C) \leq \mathbb{P}(A \cap B) = 1/8$ .

15. Prove que, para dois eventos  $A_1$  e  $A_2$  quaisquer, temos que  $\mathbb{P}(A_1 \cup A_2) \leq \mathbb{P}(A_1) + \mathbb{P}(A_2)$ . A seguir, talvez usando indução, prove que para quaisquer  $n$  eventos  $A_1, A_2, \dots, A_n$ , temos que

$$\mathbb{P}(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n) \leq \mathbb{P}(A_1) + \mathbb{P}(A_2) + \dots + \mathbb{P}(A_n).$$

**Solução:** Temos  $A_1 \cup A_2 = A_1 \cup (A_2 \cap A_1^c)$  com  $A_1$  e  $A_2 \cap A_1^c$  sendo disjuntos (verifique isto). Assim,

$$\mathbb{P}(A_1 \cup A_2) = \mathbb{P}(A_1 \cup (A_2 \cap A_1^c)) = \mathbb{P}(A_1) + \mathbb{P}(A_2 \cap A_1^c) \leq \mathbb{P}(A_1) + \mathbb{P}(A_2).$$

Por indução, suponha que o resultado valha para  $n$  eventos. Então

$$\mathbb{P}(\underbrace{A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n}_B \cup A_{n+1}) \leq \mathbb{P}(B) + \mathbb{P}(A_{n+1}) \leq \underbrace{\mathbb{P}(A_1) + \mathbb{P}(A_2) + \dots + \mathbb{P}(A_n)}_{\text{hip. indução}} + \mathbb{P}(A_{n+1})$$

16. The events A and B in a probability space have probabilities  $\mathbb{P}(A) = 0.55$  and  $\mathbb{P}(B) = 0.62$ .

- Why these events can not be mutually exclusive?
- What is the probability that the events occur together if they are independent?
- What is the probability that at least one of the two events will occur if they are independent?
- Suppose that  $\mathbb{P}(B|A) = 0.5$  and therefore, that  $A$  and  $B$  are not independent. What is the probability that at least one of the two events will occur?

**Solução:** (a) If they were mutually exclusive, we should have  $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) = 0.55 + 0.62 > 1.0$ . No event can have probability larger than 1.0. (b) It will be the product of their probabilities:  $0.55 \times 0.62$ . (c)  $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B) = 0.55 + 0.62 - 0.55 \times 0.62$ . (d) Again, we want  $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B)$ . We are given that  $0.5 = \mathbb{P}(B|A) = \mathbb{P}(A \cap B)/\mathbb{P}(A)$  and therefore  $\mathbb{P}(A \cap B) = 0.5 \times 0.62 = 0.31$ . Hence,  $\mathbb{P}(A \cup B) = 0.55 + 0.62 - 0.31$ .

17. Temos  $n$  objetos distintos e o interesse é na ordenação aleatória que um algoritmo produz desses  $n$  objetos. Descreva um espaço amostral  $\Omega$  para este segundo experimento aleatório. Em seguida, suponha que uma teoria sugere que o algoritmo produza ordenações completamente ao acaso, todas com a mesma chance de ocorrer. Se isto for verdade, qual a atribuição de probabilidades que deve ser feita a cada resultado possível?

**Solução:** Sejam  $1, 2, \dots, n$  os índices dos objetos. Em matemática, existem duas maneiras comuns para representar permutações, ambas fazendo uso de uma letra grega, tal como  $\sigma$  para representar cada permutação. A primeira delas é escrever os elementos a serem permutados numa linha, e a nova ordem na linha debaixo. Por exemplo, se  $n = 5$ , uma permutação seria

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 5 & 4 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

A linha debaixo mostra os valores da linha de cima permutados: 25413. Outra notação típica é usar uma função bijetiva do conjunto  $X = \{1, 2, \dots, n\}$  no próprio conjunto  $X$ . Assim, todo elemento  $i \in X$  possui uma imagem  $\sigma(i)$ . Sendo a função bijetiva, todo elemento  $j$  de  $X$  é a imagem de um único elemento  $i$  de  $X$  (isto é, para todo  $j \in X$  existe um único  $i \in X$  tal que  $\sigma(i) = j$ ).

O espaço amostral é composto pelo conjunto de *todas* as permutações dos  $n$  símbolos em  $X$  e isto é representado por  $S_X$ . Este conjunto é um grupo, uma estrutura matemática com ricas propriedades mas que não vai ns interessar aqui.

A atribuição de probabilidade é a mais simples de todas no caso de espaços amostrais finitos:  $\mathbb{P}(w) = 1/\#\Omega$ . Isto é, a probabilidade é constante e igual ao inverso da cardinalidade de  $\Omega$ .

18. Considere a situação do problema 17 onde os elementos do espaço amostral são constituídos pelas permutações de  $n$  objetos distintos. Nem sempre vamos querer atribuir uma probabilidade igual para todas as permutações possíveis. Filipe Arcanjo inspirou o artigo Almeida *et al.* (2019), intitulado “Random Playlists Smoothly Commuting Between Styles”, onde este problema apareceu. Filipe tinha uma playlist favorita com um número  $n$  muito grande de canções. Ele ouvia esta playlist todos os dias ao ir e vir entre o trabalho e sua casa. Ele queria uma ordem diferente todos os dias para não ficar entediado ao ouvir a playlist. Além disso, ele queria que as transições entre músicas sucessivas fosse suave, sem passar de um estilo musical para outro muito diferente numa única transição. Este problema pode ser pensado então como o de selecionar ao acaso uma permutação das canções mas dando maior probabilidade deseleção àquelas fazem uma transição suave. Seja  $\mathbf{x}_i$  um vetor com características numéricas que captam aspectos harmônicos, melódicos e de ritmo de cada canção. Defina uma função de distância entre os pares de canções com base nestes vetores,

$$d(i, j) = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|,$$

tal como a distância euclidiana entre eles. Como isto pode ser usado para determinar uma atribuição de probabilidade para selecionar e ouvir uma ordenação das canções com a desejada característica de transição suave entre os pares sucessivos de músicas?

**Solução:** Seja  $\sigma$  uma permutação dos  $n$  símbolos. O elemento  $\sigma \in S_X$  onde  $S_X$  é o conjunto de todas as permutações dos  $n$  símbolos em  $X$ . Então uma possibilidade é

$$\mathbb{P}(\sigma) = \frac{1}{K} \exp \left( -\beta \sum_{i=2}^n d(\sigma(i-1), \sigma(i)) \right) > 0,$$

onde  $\beta > 0$  é uma constante positiva e  $K$  é um fator de normalização, a soma sobre todas as permutações do fator exponencial do lado direito acima.

19. Temos um conjunto de  $n$  símbolos distintos e queremos escolher  $k$  deles aleatoriamente em sequência de forma que, em qualquer momento, os elementos disponíveis possuem a mesma probabilidade de serem selecionados. Por exemplo, considere um conjunto de 4 músicas  $(a, b, c, d)$  dos quais queremos escolher duas delas em sequência. Isto implica que a sequência  $bd$  deve ser considerada diferente da sequência  $db$ . Ouvir o mesmo sub-conjunto de canções em diferentes ordens causam impressões diferentes. Especifique o espaço amostral desse experimento e atribua probabilidades considerando que todas as sequências de tamanho  $k$  dentre  $n$  objetos distintos possuem a mesma probabilidade de serem selecionados.

**Solução:** Seja  $S = \{1, 2, \dots, n\}$ . O espaço amostral  $\Omega$  é

$$\Omega = \{\omega = (i_1, \dots, i_k); i_j \in \{1, 2, \dots, n\} \text{ e todos distintos}\}$$

Para atribuir probabilidades, precisamos contar o número de maneiras de escolher  $k$  objetos dentre  $n$  deles. Pense em preencher cada uma das  $k$  posições em sequência. Para a primeira posição temos  $n$  objetos para escolher. Fixado um objeto qualquer nesta primeira posição, podemos escolher o segundo dentre os  $n - 1$  restantes. Assim, o número de sequências ordenadas de tamanho 2 com  $n$  objetos é  $n(n - 1) = n!/(n - 2)!$ . Teremos  $n - 2$  elementos para preencher as duas primeiras. Assim, temos  $n(n - 1)(n - 2)$  sequências ordenadas de 3 posições dentre  $n$  objetos. De maneira geral, teremos

$$n(n - 1) \dots (n - (k - 1)) = \frac{n!}{(n - k)!}.$$

Assim,  $\mathbb{P}(\omega) = 1/\#\Omega = (n - k)!/n!$ .

20. Depois do exercício 19 você pode fazer este. Você está selecionando um sub-conjunto de  $k$  elementos a partir de uma conjunto maior com  $n$  elementos distintos mas sua ordenação é irrelevante. Só interessa o sub-conjunto de  $k$  elementos selecionados e não uma ordem associada a eles. Não importa se a seleção tenha sido feita sequencialmente ou se foi tomada como um lote de  $k$  elementos tirados ao mesmo tempo de dentre os  $n$  disponíveis. Obtenha espaço amostral  $\Omega$  e uma atribuição de probabilidade tal que  $\mathbb{P}(\omega)$  é um valor constante.

**Solução:** Se estivéssemos selecionando uma amostra *ordenada* de  $k$  elementos dentre  $n$  estariamos na situação do exercício 19 e neste caso existem  $n!/(n - k)!$  resultados possíveis. Mas a ordem não-importa e contamos várias vezes o mesmo sub-conjunto mudando sua ordem. Portanto, neste problema onde a ordem não-importa o número anterior  $n!/(n - k)!$  deve ser reduzido. Acontece que cada conjunto não-ordenado de  $k$  elementos distintos pode ser ordenado de  $k!$  maneiras diferentes. Isto é,

$$\begin{aligned} \# \text{ seq ordenadas} &= \# \text{ seq não-ordenadas} \times k! \\ \frac{n!}{(n - k)!} &= \# \text{ seq não-ordenadas} \times k! \end{aligned}$$

Esta contagem aparece tantas vezes em matemática que acabarecebendo um símbolo e nome especial, o coeficiente binomial:

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k! (n-k)!}$$

Portanto, se  $w$  é um dos subconjuntos de tamanho  $k$  dentre  $n$  elementos temos

$$\mathbb{P}(\omega) = \frac{(n-k)! k!}{n!} = \frac{1}{\binom{n}{k}}$$

21. Suponha que os três dígitos 1, 2 e 3 sejam escritos em ordem aleatória de forma que toda permutação tem a mesma chance de ser escolhida. (a) Qual é a probabilidade de que pelo menos um dos dígitos ocupe seu lugar natural? Isto é, qual a probabilidade de que 1 ocupe a primeira posição ou que 2 ocupe a segunda ou que 3 ocupe a terceira posição? Pode ser mais fácil obter a probabilidade do evento complementar e mais tarde subtrair de 1 esta probabilidade encontrada. (b) Repita esta análise com os dígitos 1, 2, 3 e 4. (c) Procure derivar uma fórmula recursiva para obter o resultado para os dígitos 1, 2, 3, ...,  $n$  em função dos resultados para  $n-1, n_2, \dots$

**Solução:** (a) Temos  $\Omega = S_X$  onde  $X = \{1, 2, 3\}$  (conjunto das permutações de elementos de  $X$ ) e  $\mathbb{P}(\omega) = 1/3! = 1/6$ . Seja  $A_3$  o evento em que nenhum dos três dígitos ocupa seu lugar natural. Isto significa que  $A_3 = \{(2, 3, 1), (3, 1, 2)\}$  e portanto  $\mathbb{P}(A) = 2/6 = 1/3$  e a probabilidade desejada é  $1 - \mathbb{P}(A) = 2/3$ . Vamos chamar de  $D_3 = \#A_3 = 2$ , a cardinalidade de  $A_3$ .

(b) Temos  $\Omega = S_X$  onde  $X = \{1, 2, 3, 4\}$  e  $\mathbb{P}(\omega) = 1/4! = 1/24$ . Vamos agora obter  $A_4$ , o conjunto das permutações que atendem o critério de não possuirem dígitos em suas posições naturais. A simples enumeração de todas as 16 permutações possíveis permite selecionar aquelas nove que são as válidas:  $A_4 = \{4312, 2413, 2341, 4123, 3421, 3142, 2143, 3412, 4321\}$ . Seis delas podem ser obtidas a partir de  $A_3$ . Cada uma das duas permutações em  $A_3$  gera 3 novas configurações em  $A_4$ . Considere inicialmente a permutação  $\underline{2} \underline{3} \underline{1} \in A_3$ . Precisamos introduzir uma posição adicional a ser ocupada pelo dígito 4. Coloque inicialmente esta posição no final da sequência:  $\underline{2} \underline{3} \underline{1} \underline{4}$ . Esta sequência não é válida pois 4 ocupa sua posição natural. Entretanto, se trocarmos as posições desse dígito 4 com qualquer um dos outros dígitos na sequência teremos uma permutação válida. De fato, trocando os dígitos da 1a. posição com a 4a. temos  $\underline{4} \underline{3} \underline{1} \underline{2}$ . Trocando a 2a e a 4a, temos  $\underline{2} \underline{4} \underline{1} \underline{3}$  e trocando a 3a. e a 4a. temos  $\underline{2} \underline{3} \underline{4} \underline{1}$ . Em seguida, usando o outro elemento de  $A_3$  e completando a 4a. posição com o dígito 4,  $\underline{3} \underline{1} \underline{2} \underline{4}$ , basta trocar o dígito 4 com cada um das três posições anteriores obtendo:  $\underline{4} \underline{1} \underline{2} \underline{3}$  ao trocar a 1a. e a 4a.,  $\underline{3} \underline{4} \underline{2} \underline{1}$  ao trocar a 2a. e a 4a.,  $\underline{3} \underline{1} \underline{4} \underline{2}$  ao trocar a 3a. e a 4a.

Para completar  $A_4$  faltam as permutações 4321, 3412, 2143. Elas são obtidas da seguinte forma. Deixe 1 na sua posição natural e os demais dígitos fora das posições naturais:  $\underline{1} \underline{3} \underline{2} \underline{?}$ . Coloque 1 na 4a. posição e introduza 4 na 1a. obtendo:  $\underline{4} \underline{3} \underline{2} \underline{1}$ . Começando com  $\underline{3} \underline{2} \underline{1} \underline{?}$  troque o 2 com 4 criando  $\underline{3} \underline{4} \underline{1} \underline{2}$ . Finalmente, começando com  $\underline{2} \underline{1} \underline{3} \underline{?}$  troque o 3 com 4 criando  $\underline{2} \underline{1} \underline{4} \underline{3}$ .

A probabilidade de que pelo menos um dos dígitos ocupe seu lugar natural é então  $1 - 9/24 = 5/8$ .

(c) Para generalizar, seja  $D_{n-1}$  o número de elementos em  $A_{n-1}$ . Acrescente uma posição no final para o dígito  $n$  e troque cada um dos  $n-1$  dígitos nos elementos de  $A_3$  com  $n$ . Isto resulta em  $(n-1)D_{n-1}$  elementos válidos para  $A_n$ . Os elementos válidos restantes são obtidos usando os  $D_{n-2}$  elementos e trocando o dígito  $n$  com cada um dos  $n-1$  em suas posições naturais removendo então  $(n-1)C_2$  elementos válidos em  $A_n$ . Portanto, terminamos com  $D_n = (n-1)(D_{n-1} + D_{n-2})$ .

Este problema é chamado de *derangement* (desarranjo). Uma análise mais aprofundada mostra que a probabilidade de não haver coincidência com  $n$  dígitos converge muito rapidamente para  $1/e \approx 0.37$  à medida que  $n$  aumenta. O símbolo  $e$  designa o número de Euler,  $e \approx 2.71828$ . Com  $n = 5$  já temos a probabilidade igual a 0.37 quando arredondamos para duas casas decimais. Assim, curiosamente, a chance de desarranjo *não depende de  $n$* . Seja  $n$  grande ou pequeno (maior que 5), a probabilidade é praticamente constante e igual a  $1/e$ . Talvez intuitivamente esperássemos que, com  $n$  bem grande, alguma coincidência fosse acontecer. Isto não é verdade. Este problema aparece sob várias versões diferentes. Por exemplo,  $n$  indivíduos entregam seus chapéus (o problema é antigo) na entrada e, na saída, os chapéus são devolvidos de forma completamente aleatória. Qual a probabilidade de que ninguém tenha recebido seu próprio chapéu?

22. Sejam  $\Omega = [0, 1]$  e  $f(\omega)$  uma densidade de probabilidade. Marque  $V$  ou  $F$  nas afirmações abaixo:

- $\mathbb{P}([a, b]) = b - a$  se  $[a, b] \subset [0, 1]$ .
- Como a integral de  $f(\omega)$  sobre  $[0, 1]$  é igual a 1 temos  $f(\omega) \leq 1$  para todo  $\omega \in [0, 1]$ .
- Podemos ter  $f(\omega) > 1$  para todo  $\omega \in [0, 1]$ .
- $f(x)$  pode ser descontínua.
- $f(x)$  não pode ter dois ou mais pontos de máximo.
- $f(x) = 2x$  é uma densidade válida.
- $f(x) = 12(x - 0.5)^2$  é uma densidade válida.
- Não podemos ter  $f(x) \rightarrow \infty$  quando  $x \rightarrow 1$  porquê a densidade deve integrar 1 no intervalo  $[0, 1]$ .

**Solução:** V F F V F V V F

23. Considere uma sequência infinita de lançamentos sucessivos de uma moeda. Apresente uma representação  $\Omega$  para os resultados possíveis desse experimento aletório conceitual. Nessa representação, diga quais são os subconjuntos associados com os seguinte eventos: (a) o número de lançamentos necessários até o aparecimento da primeira cara é maior que 2; (b) os cinco primeiros lançamentos são cara; (c) o número total de caras é finito; (d) a última cara da sequência aparece antes do lançamento 500;

**Solução:**  $\Omega = \{(a_1, a_2, \dots) : a_i \in \{0, 1\}\} = \{0, 1\}^\infty$ . Nesta representação,  $a_i$  é o resultado do  $i$ -ésimo lançamento e o valor  $a_i = 0$  significa que saiu coroa, e o valor 1 significa cara. (a)  $E = \{\omega \in \Omega : a_1 + a_2 = 0\}$ ; (b)  $E = \{\omega \in \Omega : a_1 + a_2 + \dots + a_5 = 5\}$ ; (c)  $E = \{\omega \in \Omega : \sum_i a_i < \infty\}$ ; (d)  $E = \{\omega \in \Omega : a_i = 0 \forall i \geq 500\}$ .

24. Uma moeda honesta é lançada repetidamente até observarmos a primeira coroa. Apresente uma representação  $\Omega$  para os resultados possíveis desse experimento aletório conceitual e diga qual a probabilidade de cada elemento  $\omega \in \Omega$ . A seguir, obtenha as probabilidades da ocorrência dos seguintes eventos: (a) a primeira coroa aparece num lançamento par. (b) a primeira coroa aparece num lançamento ímpar. (c) a primeira coroa aparece depois do terceiro lançamento.

**Solução:**  $\Omega = \{1, 01, 001, 0001, 00001, \dots\}$ . Nesta representação, 0 significa cara e 1 representa coroa. Para  $\omega \in \Omega$  temos  $\mathbb{P}(\omega) = 1/2^n$  onde  $n$  é o comprimento do string  $\omega$ . (a)  $\sum_{k=1}^{\infty} 1/2^{2k} = 1/4 + 1/4^2 + 1/4^6 + \dots = 1/4 \frac{1}{1-1/4} = 1/3$ . (b) Como o primeiro lançamento de coroa tem de ser par ou ímpar e não pode ser os dois ao mesmo tempo, esse evento é o complementar do evento em (a), o qual tem probabilidade  $1/3$ . Assim, este evento possui probabilidade  $1 - 1/3 = 2/3$ . (c) Novamente, usando a ideia de evento complementar, a probabilidade de que a primeira coroa *não apareça* depois do terceiro lançamento é a probabilidade de que ela apareça no primeiro, segundo ou terceiro lançamentos e essas realizações são disjuntas. Assim, a probabilidade é  $1 - (1/4 + 1/4^2 + 1/4^3) = 0.67$ .

25. Esta questão foi feita no Quora, <https://bit.ly/2FsRLHs>. É possível gerar um triângulo aleatório, uniformemente escolhido de todas as possíveis formas triangulares? Isto é, como gerar triângulos de forma que nenhum deles tenha mais chance de ser selecionado que nenhum outro.

**Solução:** Esta solução é a resposta dada por Alon Amit <https://www.quora.com/profile/Alon-Amit> no Quora (ver link acima). Yes.

The most reasonable interpretation of “possible triangle shapes” is “triangles up to similarity”. Similar triangles have the same “shape”, while non-similar ones don’t.

(If you wish to also include the size of the triangle then the answer becomes No. It also doesn’t seem reasonable to interpret the question in this way.) Similarly classes of triangles are determined by

the angles, and the angles are numbers between 0 and  $\pi$ . To choose a random triangle uniformly, we need to uniformly pick three angles  $\alpha, \beta, \gamma$  with  $\alpha + \beta + \gamma = \pi$ . This can be done in many ways, but here’s a very simple and concrete one.

In order to ensure we aren’t skewing and double-counting, we’ll force the angles to be ordered  $\alpha \geq \beta \geq \gamma$ . This isn’t strictly necessary, but it’s easier to visualize the space of options.

We don’t need to pick  $\gamma$ : it’s simply  $\pi - \alpha - \beta$ . So we just need to pick  $\alpha$  and  $\beta$ , ensuring that:

$$0 < \beta \leq \alpha < \pi$$

$$\beta \leq \pi - \alpha ,$$

to ensure that  $\gamma \geq 0$

$$\pi - \alpha \leq 2\beta ,$$

to ensure that  $\gamma \leq \beta$ .

26. Therefore, the space of allowed pairs  $(\alpha, \beta)$  looks like the (first triangle in the left hand side of Figure 2.2). Any point inside the red region corresponds to a legal pair  $(\alpha, \beta)$ , where  $\alpha$  is the  $x$ -coordinate and  $\beta$  is the  $y$ -coordinate. The third angle,  $\gamma$ , is of course  $\pi - \alpha - \beta$ .

Don’t worry about the fact that some inequalities are closed and some open. We’re sampling from a continuum, and the edges have probability (measure) 0. Specifically, some of the points marked in this diagram don’t correspond to actual triangle (which ones do?)

How do you sample inside such a polygon? There are many methods, but perhaps the easiest one is to randomly pick a point inside the square containing our region and reject it if it falls outside the polygon.

In this view, it’s easy to answer questions like: what is the probability that a random triangle is acute? Given our approach to defining the sample space, the answer is  $1/4$ , as you can easily discover (ver o lado direito da Figura 2.2).

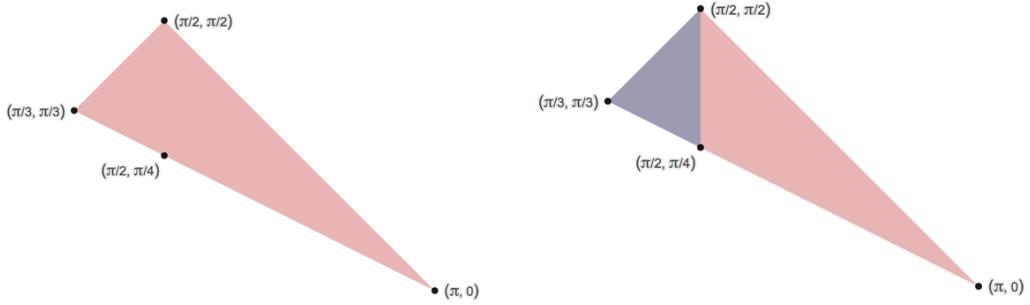


Figura 2.2: Um espaço amostral para selecionar triângulos aleatórios com distribuição uniforme. A partir desse espaço, podemos responder a questões tais como: what is the probability that a random triangle is acute? É a proporção da área hachurada em relação ao triângulo  $\Omega$ .

There are many other methods to choose “random triangles”, and they usually lead to different probability measures on the space of triangles. Our approach focuses on uniform sampling from the space of all possible combinations of angles.

27. Seja  $[0, 1]^2$  o quadrado de área unitária no plano. Queremos selecionar aleatoriamente sub-quadrados da forma  $[0, X]^2$  dentro de  $[0, 1]^2$ . É claro que o problema se resume a selecionar o lado  $X$  aleatoriamente. Entretanto, queremos selecionar de forma que a área do quadrado tenha uma distribuição *uniforme* sobre o conjunto de áreas possíveis. Isto é, seja  $Q = X^2$  a área do quadrado selecionado de alguma forma. Temos  $Q \in [0, 1]$ . Queremos que  $\mathbb{P}(Q \in (a, b)) = b - a$  para  $0 \leq a < b \leq 1$ . Por exemplo, queremos selecionar quadrados de forma que  $\mathbb{P}(Q < 1/2) = \mathbb{P}(Q > 1/2)$  e que  $\mathbb{P}(Q < 1/4) = \mathbb{P}(Q > 3/4) = \mathbb{P}(Q \in (1/4, 1/2))$ .

Alguém sugere uma maneira simples: selecione o lado  $X \in [0, 1]$  com distribuição uniforme. Por exemplo, usando R, use `runif(1)`. Mostre que isto não gera quadrados com distribuição uniforme (os quadrados gerados tenderão a ser pequenos). (DICA: Mostre que  $\mathbb{P}(Q < 1/2) \neq \mathbb{P}(Q > 1/2)$ ). DESAFIO EXTRA: Procure descobrir com que densidade você deveria selecionar  $X$  de forma que os quadrados tenham área escolhida uniformemente em  $[0, 1]$ .

**Solução:** Temos

$$\mathbb{P}(Q < 1/2) = \mathbb{P}(X^2 < 1/2) = \mathbb{P}(X < 1/\sqrt{2}) = 1/\sqrt{2} = 0.71$$

enquanto que

$$\mathbb{P}(Q > 1/2) = \mathbb{P}(X^2 > 1/2) = \mathbb{P}(X > 1/\sqrt{2}) = 1 - 1/\sqrt{2} = 0.29$$

Parece então que devemos selecionar os  $X$  pequenos (digamos, menores que  $1/2$ ) com *menos* chance do que os  $X$  grandes. Como fazer isto? Seja  $a \in [0, 1]$  um valor qualquer de área para o quadrado selecionado. Queremos que  $\mathbb{P}(X^2 < a) = a$  para todo  $a$ . Isto é, queremos  $\mathbb{P}(X < \sqrt{a}) = a$ . Se selecionamos o lado  $X$  com a densidade  $f(x)$ , queremos então que

$$a = \mathbb{P}(X < \sqrt{a}) = \int_0^a f(x) dx$$

Vamos dar um chute buscando uma densidade de forma polinomial:  $f(x) = cx^k$ . Quais deveriam ser os valores de  $c$  e  $k$ , se é que eles existem? Substituindo esta expressão hipotética para a densidade, devemos ter:

$$a = \int_0^a f(x) dx = \int_0^a cx^k dx = c \frac{(\sqrt{a})^{k+1}}{k+1}$$

Como isto deve valer para todo  $a$ , temos de ter os expoentes de  $a$  iguais:  $1 = (k + 1)/2$ , o que implica que  $k = 1$ . Assim, o problema se reduz a ter  $a = ca/(1 + 1)$  para todo  $a$ , o que implica que  $c = 2$ . De fato,  $f(x) = 2x$  é uma desnidade válida. Além disso, se você calcular  $\mathbb{P}(Q < a) = \mathbb{P}(X < \sqrt{a})$ , você vai encontrar esta probabilidade igual a  $a$ , como desejado.

## 2.2 Probabilidade Condisional e Independência

1. Se  $A \subset B$  temos  $\mathbb{P}(B|A) = 1 \geq \mathbb{P}(B)$ . Assim, a ocorrência de  $A$  aumenta a probabilidade de  $B$  para seu valor máximo possível, que é 1. Temos certeza que  $B$  ocorreu pois  $A$  é parte de  $B$ . E o contrário? Mostre que, se  $B \subset A$ , podemos concluir que  $\mathbb{P}(B|A) \geq \mathbb{P}(B)$ . Isto é, se  $B$  é parte de  $A$ , saber que  $A$  ocorreu tende a aumentar a chance de  $B$  ocorrer. Intuitivamente, se  $B$  for uma grande parte de  $A$  devemos ter  $\mathbb{P}(B|A) \approx 1$ .
2. No momento do diagnóstico de um câncer de estômago para um paciente qualquer, definimos o evento  $B$  como sendo o evento em que o paciente tem pelo menos mais 1 ano de vida. Suponha que  $\mathbb{P}(B) = 0.70$ . Seja  $A$  o evento em que um paciente de câncer de estômago tenha uma autópsia confirmado que o tumor é benigno. Imaginamos que  $\mathbb{P}(B|A)$  seja maior que 0.70. Explique como as probabilidades  $\mathbb{P}(B)$  e  $\mathbb{P}(B|A)$  poderiam ser estimadas com base numa grande amostra de pacientes de câncer de estômago. Que frequências relativas você usaria para estimá-las?
3. Um ponto aleatório  $(x, y)$  é escolhido completamente ao acaso no disco de raio unitário centrado na origem. Temos  $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 \leq 1\}$  e a probabilidade de um evento  $E \subset \Omega$  é dada por  $\mathbb{P}(E) = (\text{área de } E) / (\text{área do círculo}) = |E|/\pi$ . Seja  $A$  o evento “distância entre o ponto escolhido e a origem é menor que  $1/2$ ” e  $B$  o evento “a coordenada  $x$  do ponto escolhido é maior que  $y$ ”. Mostre que os eventos  $A$  e  $B$  são independentes. Veja que não é óbvio que isto seja verdade, precisamos verificar matematicamente que a definição de independência é válida neste exemplo.
4. Marque  $V$  ou  $F$  nas afirmações abaixo:
  - Se  $A \cap B = \emptyset$  então  $A$  e  $B$  são eventos independentes.
  - Se  $A \subset B$  então  $A$  e  $B$  são eventos independentes.
  - Se  $\mathbb{P}(B|A) = \mathbb{P}(B)$  dizemos que  $B$  é independente de  $A$ . A ordem dos eventos não importa pois isto implica que  $\mathbb{P}(A|B) = \mathbb{P}(A)$  e portanto que  $B$  também é independente de  $A$ .
  - $\mathbb{P}(B|A) > \mathbb{P}(B)$  se, e somente se,  $\mathbb{P}(A \cap B) > \mathbb{P}(B) \times \mathbb{P}(A)$ .
5. Mostre que, se  $\mathbb{P}(A) = 0$ , então  $A$  é independente de qualquer outro evento  $B$ . Isto faz sentido intuitivamente?
6. Um evento  $A$  é independente de si mesmo se, e somente se,  $\mathbb{P}(A) = 0$  ou  $\mathbb{P}(A) = 1$ . Prove isto em uma linha.
7. Se  $A$  e  $B$  são independentes então  $A$  e  $B^c$  também são independentes (e também  $A^c$  e  $B$ , e ainda  $A^c$  e  $B^c$ ). Prove isto usando que  $A = (A \cap B^c) \cup (A \cap B)$ . Aproveite e responda:  $A$  e  $A^c$  são independentes?
8. Se  $A, B, C$  são eventos mutuamente independentes, mostre que  $C$  é independente de  $A \cap B$ , de  $A \cap B^c$ , de  $A^c \cap B^c$ . Isto é, mostre que, por exemplo,  $\mathbb{P}(A \cap B^c \cap C) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B^c)\mathbb{P}(C)$ , etc.
9. Usando o resultado acima, mostre que, se  $A, B, C$  são eventos mutuamente independentes,  $C$  é independente de  $A \cup B$ . Dica: escreva  $A \cup B$  como uma interseção de conjuntos.

10. Sabemos que  $\mathbb{P}(B|A)$  pode ter uma valor muito diferente de  $\mathbb{P}(A|B)$ . Entretanto, existe uma amrração entre estes valores. Mostre que, se  $B$  é um evento 5 vezes mais provável que outro evento  $A$ , então  $\mathbb{P}(B|A)$  também é 5 vezes maior que  $\mathbb{P}(A|B)$ . De maneira geral, mostre que

$$\frac{\mathbb{P}(B|A)}{\mathbb{P}(A|B)} = \frac{\mathbb{P}(B)}{\mathbb{P}(A)}$$

11. Responda *V* ou *F* no contexto de testes de diagnóstico do vírus HIV:

- Sensitividade é a probabilidade de que um indivíduo tenha *TESTE+* e *HIV+*.
- Sensitividade é a probabilidade de que um indivíduo com *HIV+* tenha resultado *TESTE+*.
- Sensitividade é a probabilidade de que um indivíduo com resultado *TESTE+* seja *HIV+*.
- Falso positivo ocorre se o teste indica positivo quando o paciente é *HIV+*

12. Considere dois eventos  $A$  e  $B$ . Dizemos que  $B$  aumenta as chances de  $A$ , denotado  $B \nearrow A$ , se  $\mathbb{P}(A|B) > \mathbb{P}(A)$ , isto é, se saber que  $B$  ocorreu aumenta a probabilidade de ocorrer  $A$ . Da mesma forma, dizemos que  $B$  diminui as chances de  $A$ , denotada  $B \searrow A$ , se  $\mathbb{P}(A|B) < \mathbb{P}(A)$ . As afirmações a seguir são verdadeiras ou falsas? Justificar suas respostas.

- Se  $B \nearrow A$ , então  $A \nearrow B$  (isto é, a propriedade de um evento aumentar a probabilidade de outro é simétrica)
- Se  $B \nearrow A$  e  $A \nearrow C$ , então  $B \nearrow C$  (isto é, a propriedade de um evento aumentar a probabilidade de outro é transitiva)
- Se  $B \nearrow A$ , então  $B \searrow A^c$  (isto é, se  $B$  aumenta a chance de  $A$ , ele diminui a chance de não- $A$ )
- $A \searrow A$  (a propriedade reflexiva vale)

13. Um sistema é chamado “*k out of n*” se funcionar de forma confiável quando pelo menos  $k$  de seus  $n$  componentes estão trabalhando; Em outras palavras, o sistema usa redundância para garantir robustez à falha. Como exemplo, considere uma matriz redundante de discos de baixo custo (RAID) na qual se usa  $n$  discos para armazenar uma coleção de dados. Enquanto pelo menos  $k$  estiverem funcionando, os dados podem ser lidos corretamente. Suponha que os discos falhem independentemente e que a probabilidade de um falha de disco individual em um período de um ano é  $p$ .

- (a) Suponha que temos uma matriz de discos  $n = 3$  que pode sobreviver a uma falha ( $k = 2$ ). O que é o número esperado de falhas de disco em um ano? Em função de  $p$ , qual é a probabilidade que toda a matriz continuará a funcionar sem perda de dados após um ano?
- (b) Suponha que temos um array de discos  $n = 5$  que pode sobreviver a duas falhas ( $k = 3$ ). O que é número esperado de falhas de disco em um ano? Em função de  $p$ , qual é a probabilidade que toda a matriz continuará a funcionar sem perda de dados após um ano?
- (c) Suponha  $p = 0.1$ . Qual é mais confiável (tem maior probabilidade de não perder nenhum dado em um ano), o RAID da parte (a) ou parte (b)?
- (d) Suponha  $p = 0.6$ . Qual é mais confiável, o RAID da parte (a) ou parte (b)?

14. A Figura 2.3 mostra exemplos de falso positivo e falso negativo. Explique estes erros em termos de probabilidades condicionais  $\mathbb{P}(A|B)$  explicando o que são os eventos  $A$  e  $B$  em cada um dos dois erros.

15. Leia o delicioso artigo *Chances are* sobre a regra de Bayes do matemático Steven Strogatz no New York Times: <http://opinionator.blogs.nytimes.com/2010/04/25/chances-are/>. Steven é bastante conhecido por seu artigo *Collective dynamics of small-world networks* na revista

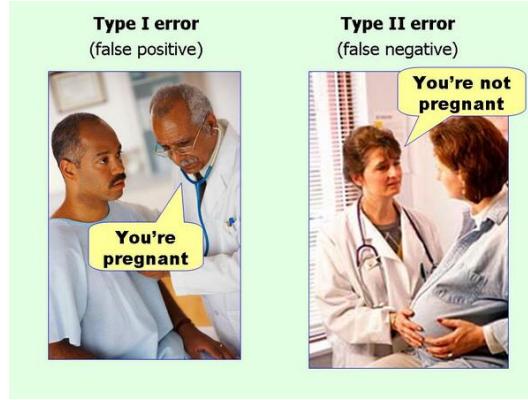


Figura 2.3: Falso positivo e falso negativo

*Nature* em 1998. Como uma medida do impacto deste artigo, ele foi o mais citado sobre redes entre 1998 e 2008 considerando todas as disciplinas científicas, bem como o sexto mais citado - sobre qualquer tema - em física. Usando a regra de Bayes, verifique que a resposta de 9% para  $\mathbb{P}(\text{cancer} | \text{mamografia} +)$  é correta.

16. Sejam  $A$ ,  $B$  e  $C$  três eventos com probabilidade positiva (isto é,  $\mathbb{P}(A) > 0$ ,  $\mathbb{P}(B) > 0$  e  $\mathbb{P}(C) > 0$ ). Mostre que

$$\mathbb{P}(A \cap B \cap C) = \mathbb{P}(A|B \cap C)\mathbb{P}(B|C)\mathbb{P}(C)$$

Dica: Faça  $B \cap C = D$  e aplique a definição de probabilidade condicional em  $\mathbb{P}(A \cap D)$ . A seguir, aplique de novo esta definição em  $\mathbb{P}(D) = \mathbb{P}(B \cap C)$

17. Mostre que  $\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)$  implica que  $\mathbb{P}(A|B) = \mathbb{P}(A)$ .
18. Definimos  $A \perp B|C$  se  $\mathbb{P}(A|B \cap C) = \mathbb{P}(A|C)$ . Mostre que  $A \perp B|C$  se, e somente se,  $\mathbb{P}(A \cap B|C) = \mathbb{P}(A|C)\mathbb{P}(B|C)$ .
19. Problema de Monty Hall. Leia a descrição deste problema em [http://en.wikipedia.org/wiki/Monty\\_Hall\\_problem](http://en.wikipedia.org/wiki/Monty_Hall_problem). Faça um pequeno exercício de simulação em que você repete o jogo um grande número de vezes (100 mil, digamos) e testa as duas possíveis estratégias em cada jogo. Um jogador SEMPRE troca as portas. O outro nunca troca. Verifique qual estratégia é mais eficiente (quem vence mais frequentemente)
20. Da Wikipedia: [http://en.wikipedia.org/wiki/Three\\_Prisoners\\_problem](http://en.wikipedia.org/wiki/Three_Prisoners_problem). Three prisoners, A, B and C, are in separate cells and sentenced to death. The governor has selected one of them at random to be pardoned. The warden knows which one is pardoned, but is not allowed to tell. Prisoner A begs the warden to let him know the identity of one of the others who is going to be executed. "If B is to be pardoned, give me C's name. If C is to be pardoned, give me B's name. And if I'm to be pardoned, flip a coin to decide whether to name B or C."

The warden tells A that B is to be executed. Prisoner A is pleased because he believes that his probability of surviving has gone up from  $1/3$  to  $1/2$ , as it is now between him and C. Prisoner A secretly tells C the news, who is also pleased, because he reasons that A still has a chance of  $1/3$  to be the pardoned one, but his chance has gone up to  $2/3$ . What is the correct answer?

Faca um estudo de simulação similar ao do problema anterior para achar a resposta de maneira empírica.

21. Da wikipedia: [http://en.wikipedia.org/wiki/Boy\\_or\\_Girl\\_paradox](http://en.wikipedia.org/wiki/Boy_or_Girl_paradox). Martin Gardner published one of the earliest variants of the Boy or Girl paradox in *Scientific American*. He phrased the paradox as follows:

- Mr. Jones has two children. The older child is a girl. What is the probability that both children are girls?
  - Mr. Smith has two children. At least one of them is a boy. What is the probability that both children are boys?
22. Do Buzz de Terence Tao, <https://profiles.google.com/114134834346472219368/buzz/G5DnA8EL7D3>. Another interesting place where one can contrast classical deduction with Bayesian deduction is with regard to taking converses. In classical logic, if one knows that A implies B, one cannot then deduce that B implies A. However, in Bayesian probability, if one knows that the presence of A elevates the probability that B is true, then an observation of B will conversely elevate the prior probability that A is true, thanks to Bayes' formula: if  $\mathbb{P}(B|A) > \mathbb{P}(B)$ , then  $\mathbb{P}(A|B) > \mathbb{P}(A)$ .
- Prove este resultado.
23. Usando probabilidade para fazer perguntas delicadas num questionário. Exemplos de perguntas delicadas para as quais queremos saber a probabilidade de uma resposta SIM:
- Você já fumou baseado alguma vez?
  - Você já roubou algum objeto numa loja?
  - Você é a favor do aborto? Etc.
- O ENTREVISTADO rola um dado bem balanceado e NÃO MOSTRA O RESULTADO AO ENTREVISTADOR. Se sair 1, 2 ou 3, o entrevistado responde SIM ou NÃO à pergunta delicada. Se sair 4, 5 ou 6, ele responde SIM ou NÃO à seguinte pergunta alternativa: o último dígito de sua conta bancária (ou de sua identidade) é par?
- Quando o entrevistador ouve a resposta (digamos, SIM), ele não sabe a qual das duas perguntas o entrevistado está respondendo, se à delicada ou àquela sobre o dígito.
- Suponha que a proporção de entrevistados respondendo SIM ao entrevistador foi 0.32. A amostra é bastante grande de modo que supomos  $\mathbb{P}(SIM) \approx 0.32$ .
- Use a lei de probabilidade total para expandir  $\mathbb{P}(SIM)$  em função dos dois resultados possíveis do dado e sugira uma estimativa para a probabilidade  $\mathbb{P}(SIM|dado = 1, 2, 3)$ .
24. Suppose that the probability of mothers being hypertensive (high blood pressure) is 0.1 and fathers is 0.2. Find the probability of a child's parents both being hypertensive, assuming both events are independent. Note: we would expect these two events to be independent if the primary determinants of hypertensivity were genetic, however if the primary determinants were environmental then we might expect the two events not to be independent.
25. Num teste de diagnóstico, a sensibilidade é a probabilidade de que o teste seja positivo dado que o indivíduo realmente seja doente:  $\mathbb{P}(T+|D+)$ . Um sinônimo muito usado para esta probabilidade no contexto de recuperação de informação é *recall*. As afirmativas abaixo foram ouvidas pelo autor em diferentes ocasiões. Explique cada uma das sentenças.

- “Aumentar muito o recall é praticamente não deixar passar um caso positivo”.
- Uma alta sensibilidade significa uma alta taxa de “verdadeiros positivos”.
- Em recuperação de informação, recall é a proporção de documentos recuperados que são relevantes. Coloque este problema no arcabouço de sensibilidade (isto é, faça a equivalência com “teste positivo”, “doente”, etc.)

## 2.3 Classificação e probabilidade condicional

O pacote `rpart` do R implementa o algoritmo de árvores de classificação. O objetivo dos próximos exercícios é manusear algumas funções básicas do pacote. Uma excelente (e mais completa) introdução é a *vignette* descrevendo o uso do pacote em <https://cran.r-project.org/web/packages/rpart/>.

Caso você prefira fazer este problema usando Python, pegue o dataset `stagec` descrito abaixo no site <http://www-eio.upc.edu/~pau/cms/rdata/datasets.html>.

1. Comece instalando o pacote `rpart` e a seguir carregando-o na sessão de trabalho. Peça informação sobre o dataset `stagec`:

```
library(rpart) # carregue o pacote rpart
help(stagec) # info sobre dataset stagec do pacote rpart
```

Este é um conjunto de dados de 146 pacientes com câncer de próstata em estágio *C*. Este câncer é potencialmente curável e um dos procedimentos é a remoção cirúrgica da área afetada. Infelizmente, para alguns dos pacientes a doença retorna. O principal interesse ao coletar esses dados é descobrir quais os fatores associados com a recidiva (ou retorno) do câncer.

A principal variável é o status da progressão do câncer, `pgstat`, uma variável binária indicando se o câncer retornou ou não ao final do período de acompanhamento pós-cirúrgico. A variável `pgtime` é o tempo que levou para o câncer retornar (nos casos em que `pgstat = 1`) ou o tempo do último follow-up ou acompanhamento (nos casos em que `pgstat = 0`). Esta variável `pgtime` não será usada neste exercício.

As demais variáveis no dataset estão potencialmente associadas com o retorno do câncer.

- `age`: idade, em anos
- `eet`: se o paciente recebeu terapia endócrina precocemente (=2) ou não (=1).
- `g2`: porcentagem de células na fase G2 medida por citometria de fluxo (técnica usada para medir características físicas e químicas de células). A fase G2 é das fases da divisão celular por mitose e a divisão celular desregulada é a causa central de cânceres.
- `grade`: grau de desenvolvimento do tumor no momento da cirurgia medido pelo sistema Farrow.
- `gleason`: outra medida do grau de desenvolvimento do tumor no momento da cirurgia, pelo sistema Gleason.
- `ploidy`: o status ploíde do sistema via citometria de fluxo com valores iguais a: diplóide (células normais) e dois tipos de células com cromossomos irregulares e precursoras de células cancerígenas: tetraplóide e aneuplóide.

Queremos descobrir *quais* desses fatores afetam a probabilidade de `pgstat = 1`. Queremos mais que isto. Queremos descobrir também *como* eles afetam esta probabilidade. Não um de cada vez, separadamente, mas todos eles ao mesmo tempo, agindo talvez de forma interativa e em sinergia.

Vamos denotar `pgstat` por  $Y$ . Queremos saber que fatores (ou variáveis)  $X_1, X_2, \dots$  fazem com que  $\mathbb{P}(Y = 1) \neq \mathbb{P}(Y = 1|X_1, X_2, \dots)$  e como esta probabilidade é alterada. Para isto, você vai usar `rpart` com o código abaixo. O primeiro comando substitui a variável binária e numérica `pgstat` por outra com o mesmo nome mas estruturada como um fator. Os seus valores possíveis são os rótulos `Prog` (progressão ou retorno do câncer) e `No` (sem retorno ao fim do estudo). Em seguida, fixamos a semente para a geração de números aleatórios. Com `indx` temos os índices da amostra de treinamento (a ser usada para criação da árvore) e de teste (para avaliar a qualidade do modelo gerado). Finalmente, chamamos a função `rpart` e plotamos o resultado bem como printamos a árvore com os detalhes da segmentação recursiva realizada.

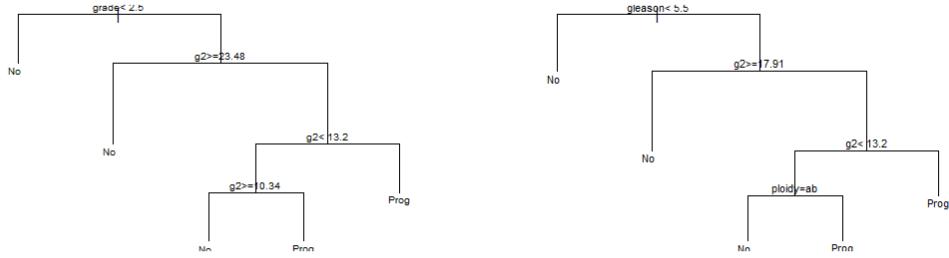


Figura 2.4: ll.

```

stagec$pgstat <- factor(stagec$pgstat, levels = 0:1, labels = c("No", "Prog"))
set.seed(35) # semente aleatoria
ntreino = as.integer(0.8 * nrow(stagec))
indx = sample(1:nrow(stagec), ntreino)
stagec_treino = stagec[indx,] # amostra de treinamento
stagec_teste = stagec[-indx,] # amostra de teste, para avaliar arvore

arv_fit <- rpart(pgstat ~ age + eet + g2 + grade + gleason + ploidy,
                  data = stagec_treino, method = 'class') # ajute com rpart
# resultados
printcp(arv_fit) # exibir os resultados
summary(arv_fit) # resumo detalhado das segmentacoes
# plot da arvore
plot(arv_fit)
text(arv_fit, cex=0.7) # textos nos ramos
# um plot mais informativo
plot(arv_fit, uniform=TRUE, main="Cancer de Prostata")
text(arv_fit, use.n=TRUE, all=TRUE, cex=.7)

```

O resultado gráfico deve ser exatamente a árvore de classificação no lado esquerdo da Figura 2.4. Com base nesta figura e nos resultados da árvore, responda:

- Quais variáveis foram usadas e quais não foram usadas na árvore obtida pela segmentação recursiva do `rpart`?
- Forneça estimativas de probabilidades condicionais para as folhas da árvore. Isto é, forneça uma estimativa numérica para  $\mathbb{P}(Y = 1|X_1, X_2, \dots)$  em cada folha (nó terminal) da árvore especificando o conjunto de atributos  $X$ 's e seus valores em cada nó final.
- V ou F: Como a `eet` não apareceu na árvore, isto sugere (pois não é uma prova definitiva) que:
  - $\mathbb{P}(Y = 1) = \mathbb{P}(Y = 1| eet = yes) = \mathbb{P}(Y = 1| eet = no);$
  - Os eventos `eet = yes` e `eet = no` são independentes do evento  $Y = 1$ .
- Para avaliar a qualidade do modelo gerado, use os dados selecionados em `stagec_teste` (20% do total) e que não foram usados na construção da árvore. Eles imitam os novos casos que chegarão no futuro ao usar a árvore. Verifique os erros cometidos com os comandos abaixo:

```

# Classe predita para cada exemplo do conjunto de teste
fitted.results <- predict(arv_fit, newdata=stagec_teste, type='class')
head(fitted.results)
# Tabela de confusao - erros e acertos
table(fitted.results, stagec_teste$pgstat)

```

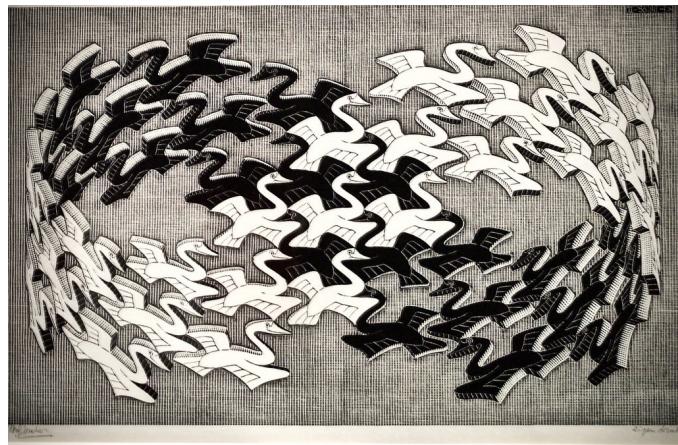
Calcule valores aproximados para as seguintes probabilidades: (a) probabilidade de predizer a classificação correta, chamada de acurácia do método. (resp: 2/3) (b) dado que um caso foi predito como *Prog*, a probabilidade de que ele realmente seja *Prog*, chamada de precisão do método. (resp: 3/5) (c) dado que um caso realmente é *Prog*, obter a probabilidade de que ele seja predito pela árvore como *Prog*, chamada de revocação (ou recall) do método. (resp: 1/2)

- Com uma amostra de dados pequena como neste exemplo, as árvores são instáveis. Amostras ligeiramente diferentes podem levar a árvores muito distintas. Isto é consequência da característica gulosa (*greedy*) do algoritmo e do alto impacto das primeiras segmentações no restante da árvore. Para verificar isto, refaça a árvore com outra amostra de 80% dos dados resetando `set.seed(12)` e repetindo os comandos seguintes. Você deve obter a árvore do lado direito da Figura 2.4. Compare com a árvore do lado esquerdo. Uma excelente solução para este problema de instabilidade é usar as *florestas aleatórias*, uma coleção de árvores baseada em muitas sub-amostras dos dados originais.
- Para entender melhor por que as árvores são instáveis, use `table(stagec$grade, stagec$gleason)` para fazer uma tabela cruzando os valores das variáveis `grade` e `gleason` do dataframe original. Estas duas variáveis são formas diferentes de medir o estágio do *mesmo* câncer no momento da cirurgia. Podemos esperar que eles produzam resultados similares de alguma forma. Verifique que de fato, a “diagonal” da tabela gerada contém a maior parte dos dados da matriz original. Isto significa que uma das variáveis é capaz de predizer muito bem a outra. Isto também pode significar que se uma dessas variáveis é escolhida é bem possível que a outra não traga muita informação adicional e seja descartada pela árvore. Pequenas mudanças nos dados podem fazer a escolha pender para uma dessas variáveis em detrimento da outra.



# Capítulo 3

## Variáveis Aleatórias



Esta lista de exercícios visa ao aprendizado de algumas das características das principais distribuições de probabilidade. Você vai se familiarizar com seus principais aspectos visuais e quantitativos, vai aprender a simular estas distribuições no R e a verificar se um conjunto de dados segue uma determinada distribuição usando o teste qui-quadrado e de Kolmogorov.

Vamos aprender um poucos sobre as seguintes distribuições:

- Discretas: binomial, Poisson, geométrica, Pareto-Zipf
- Contínuas: uniforme, gaussiana (ou normal), log-normal, gama, beta, Pareto.

O R possui um conjunto de funções para trabalhar com as principais distribuições de probabilidade. Todas operam com uma sintaxe similar. O primeiro caracter do nome da função identifica o que você quer fazer com ela: gerar números aleatórios, calcular uma probabilidade, uma probabilidade acumulada ou um quantil. Os caracteres seguinte identificam a distribuição.

Por exemplo, se quisermos trabalhar com a distribuição binomial com  $n = 10$  repetições e probabilidade de sucesso  $\theta = 0.15$  podemos usar:

- `rbinom(13, 20, 0.15)`: gera um conjunto de 13 inteiros aleatórios, cada um deles seguindo uma binomial  $\text{Bin}(n = 20, \theta = 0.15)$ .
- `dbinom(13, 20, 0.15)`: se  $X \sim \text{Bin}(20, 0.15)$ , este comando calcula a função de probabilidade  $\mathbb{P}(X = 13) = p(13)$  para as v.a's discretas. Podemos passar vetores como argumento. Por exemplo, `dbinom(c(10, 11, 12), 20, 0.15)` retorna o vetor  $(\mathbb{P}(X = 10), \mathbb{P}(X = 11), \mathbb{P}(X = 12))$ .
- `pbinom(13, 20, 0.15)`: Calcula a função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}$  no ponto 13. Isto é, calcula  $\mathbb{F}(13) = \mathbb{P}(X \leq 13)$  onde  $X \sim \text{Bin}(20, 0.15)$ .

- `pbinom(0.20, 20, 0.15)`: Calcula o quantil  $x$  associado com a de probabilidade acumulada 0.20. Isto é, calcula o valor de  $x$  tal que  $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = 0.20$ . Como  $X$  é uma v.a. discreta que acumula probabilidades aos saltos, a probabilidade acumulada até  $x$  pode ser apenas aproximadamente igual a 0.20.

As funções correspondentes para uma gaussiana são `rnorm`, `dnorm`, `pnorm`, `qnorm`. Se quisermos trabalhar com uma gaussiana  $N(\mu, \sigma^2)$ , com valor esperado  $\mu = 10$  e  $sigma = 2$ :

- `rnorm(100, 10, 2)`: gera um conjunto de 100 valores aleatórios independentes de uma v.a.  $X \sim N(10, 2^2)$ .
- `dnorm(11.25, 10, 2)`: retorna o valor da densidade  $f(x)$  de  $N(10, 2)$  no ponto  $x = 11.25$ . Isto é, retorna  $f(11.25)$ . O comando `dnorm(c(11.25, 13.15), 10, 2)` retorna um vetor com os valores  $(f(11.25), f(13.15))$ .
- `pnorm(11.25, 10, 2)`: Calcula a função de probabilidade acumulada no ponto 11.25. Isto é, calcula  $\mathbb{F}(11.25) = \mathbb{P}(X \leq 11.25)$  onde  $X \sim N(10, 2^2)$ .
- `qnorm(0.20, 10, 2)`: Calcula o quantil  $x$  tal que  $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = 0.20$ . Como  $X$  é uma v.a. contínua que acumula probabilidades continuamente, a probabilidade acumulada até  $x$  é exatamente igual a 0.20.

Para uma Poisson, são as seguintes: `rpois`, `dpois`, `ppois` e `qpois`. Para a exponencial, temos `rexp`, `dexp`, `pexp` e `qexp`. Para conhecer todas as distribuições disponíveis no R, digite `?distributions` ou, equivalente, `help(distributions)`.

### 3.1 Variáveis aleatórias discretas

1. Seja  $X \sim \text{Bin}(10, 0.4)$ . Para obter e plotar (veja Figura 3.2) os valores da função de probabilidade  $\mathbb{P}(X = k)$  e da função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}(x)$  uso os seguintes comandos:

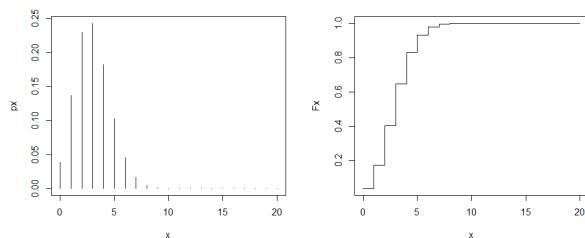


Figura 3.1: Função de probabilidade  $\mathbb{P}(X = k)$  (esquerda) e da função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}(x)$  (direita) de uma v.a. binomial  $\text{Bin}(n = 10, \theta = 0.40)$ .

```

x <- 0:10
px <- dbinom(x, 10, 0.40)
par(mfrow=c(1,2)) # janela grafica com uma linha de 2 plots
plot(x, px, type = "h") # para usar linhas verticais at\''{e} os pontos (x,px)
Fx <- pbinom(x, 10, 0.35)
plot(x, Fx, type = "s") # o argumento "s"

```

- Sua vez agora. Obtenha o gráfico das probabilidades  $\mathbb{P}(X = k)$  e da função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}(x)$  para uma v.a.  $X \sim \text{Bin}(n = 20, \theta = 0.15)$ . Em seguida, responda às questões abaixo.

- Qual o valor  $k$  em que  $\mathbb{P}(X = k)$  é máxima? Quanto é esta probabilidade máxima?
  - VISUALMENTE, obtenha uma faixa de valores  $(a, b)$  na qual a probabilidade de  $X \in (a, b)$  seja próxima de 1. Procure grosseiramente obter a faixa mais estreita possível.
  - O valor (teórico) de  $\mathbb{E}(X)$  no caso de uma binomial é  $n\theta$ . Como é o comportamento da função  $\mathbb{P}(X = k)$  no entorno deste valor  $\mathbb{E}(X)$ ? Ela tem valores  $\mathbb{P}(X = k)$  relativamente altos?
  - Confirme esta impressão calculando  $\mathbb{P}(a \leq X \leq b)$  usando a função `dnorm` ou `pnorm` do *R*. Por exemplo, se eu quiser  $\mathbb{P}(5 \leq X \leq 8)$ , uso `sum(dnorm(5:8, 20, 0.15))` ou então `pbinom(8, 20, 0.15) - pbinom(5-0.01, 20, 0.15)`. Porque eu subtraio 0.01 de 5 na chamada da segunda função?
  - Use `qbinom` para obter o inteiro  $k$  tal que  $\mathbb{F}(k) = \mathbb{P}(X \leq k) \approx 0.95$ .
  - Verifique o valor da probabilidade acumulada exata  $\mathbb{F}(k)$  obtida com o inteiro acima usando `pbinom`.
  - Gere 1000 valores aleatórios independentes de  $X \sim \text{Bin}(n = 20, \theta = 0.15)$ . Estes valores cairam, em sua maioria, na faixa que você escolheu mais acima? Qual a porcentagem de valores que caiu na faixa que você escolheu?
  - Compare os valores das probabilidades  $\mathbb{P}(X = k)$  para  $k = 0, \dots, 6$  e as frequências relativas destes inteiros nos 100 valores simulados. São parecidos?
- 

2. Este problema é similar ao anterior, usando agora a distribuição de Poisson.

- Obtenha o gráfico das probabilidades  $\mathbb{P}(X = k)$  e da função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}(x)$  para uma v.a.  $X \sim \text{Poisson}(\lambda)$  usando dois valores:  $\lambda = 0.73$  e  $\lambda = 10$ .
  - O valor  $k$  em que  $\mathbb{P}(X = k)$  é máximo é próximo de  $\mathbb{E}(X) = \lambda$ ?
  - Obtenha um intervalo de valores  $(a, b)$ , o mais curto possível grosseiramente, para o qual  $\mathbb{P}(X \in (a, b)) \approx 1$ .
  - Usando `ppois` do *R*, calcule  $\mathbb{P}(a \leq X \leq b)$ .
  - Gere 200 valores aleatórios independentes de  $X \sim \text{Poisson}(\lambda)$  com os dois valores acima para  $\lambda$ .
  - Compare os valores das probabilidades  $\mathbb{P}(X = k)$  para  $k = 0, \dots, 6$  e as frequências relativas destes inteiros nos 100 valores simulados. São parecidos?
- 

3. Este problema é similar ao anterior, usando agora a distribuição discreta de Pareto, também chamada de distribuição de Zipf. Ver [http://en.wikipedia.org/wiki/Zipf's\\_law](http://en.wikipedia.org/wiki/Zipf's_law). A distribuição de Pareto (discreta ou contínua) não está disponível em *R* a não ser em alguns pacotes especializados. Entretanto, não é necessário usar estes pacotes já que ela é facilmente simulada ou calculada. Veremos técnicas de simulação Monte Carlo em breve, então apenas aceite por enquanto o algoritmo abaixo.

A distribuição discreta de Pareto possui suporte igual a  $\{1, 2, \dots, N\}$  onde  $N$  pode ser infinito. Além de  $N$ , ela possui um outro parâmetro,  $\alpha > 0$ . A função massa de probabilidade é dada por

$$\mathbb{P}(X = k) = \frac{C}{k^{1+\alpha}}$$

onde  $C$  é uma constante escolhida para que as probabilidades somem 1. Observe que  $C$  é dada por

$$\frac{1}{C} = \sum_{k=1}^N \frac{1}{k^{1+\alpha}}$$

Se  $N$  for um número finito, não existe uma expressão analítica para esta soma e ela deve ser calculada somando-se os valores. Se  $N$  for infinito, a expressão acima é chamada de função  $\zeta$  de Riemann:

$$\zeta(1 + \alpha) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{1+\alpha}} = \frac{1}{\Gamma(1 + \alpha)} \int_0^{\infty} \frac{x^{\alpha}}{e^x - 1} dx \quad (3.1)$$

(ver [http://en.wikipedia.org/wiki/Riemann\\_zeta\\_function](http://en.wikipedia.org/wiki/Riemann_zeta_function)).

Para alguns valores específicos de  $\alpha$ , a função zeta  $\zeta(1 + \alpha)$  tem valores conhecidos exatamente. Por exemplo, para  $\alpha = 1$  é possível mostrar que

$$\zeta(2) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} = 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \dots = \frac{\pi^2}{6} \approx 1.645$$

Exceto nestes casos particulares, no caso de  $N = \infty$ , a constante  $C = 1/\zeta(1+\alpha)$  deve ser aproximada numericamente somando-se um número grande de termos da série ou calculando numericamente a integral em (3.1). Por exemplo, para  $\alpha = 1/2$ , temos  $\zeta(1 + 1/2) \approx 2.612$ , e para  $\alpha = 2$ , temos  $\zeta(1 + 2) \approx 1.202$ .

Tendo um valor para a constante  $C$ , podemos plotar os valores de  $\mathbb{P}(X = k)$  e também da função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}(k)$  já que

$$\mathbb{F}(k) = \mathbb{P}(X \leq k) = \sum_{i=1}^k \mathbb{P}(X = i) = C \sum_{i=1}^k \frac{1}{i^{1+\alpha}}.$$

- Usando os valores  $\alpha = 1/2, 1, 2$ , obtenha em  $R$  o gráfico das probabilidades  $\mathbb{P}(X = k)$  e da função de probabilidade acumulada  $\mathbb{F}(x)$  para uma v.a.  $X \sim \text{Zipf}(\alpha)$  com  $N = \infty$ . Em  $R$ , não chame a constante de integração de  $c$  pois este é o nome da função de concatenação de vetores e, como um defeito do  $R$ , ele não avisa que você está sobrepondo uma função-base crucial. Faça a escala horizontal variar nos inteiros de 1 a 20. Obtenha  $\mathbb{F}(x)$  usando o comando `cumsum` que retorna o vetor de somas acumuladas de um vetor.
- Pelo gráfico, as probabilidades parecem cair rápido, talvez exponencialmente. Mas isto não é verdade. O comportamento dessa queda quando  $k$  aumenta é a principal razão propriedade que faz com que a distribuição power-law de Pareto (ou Zipf) seja tão importante na prática da análise de dados. Para entender como as probabilidades diminuem em direção a zero a medida que  $k$  cresce, obtenha a razão entre valores sucessivos de  $\mathbb{P}(X = k)$ . Isto é, mostre que

$$\frac{\mathbb{P}(X = k + 1)}{\mathbb{P}(X = k)} = \left( \frac{k}{k + 1} \right)^{1+\alpha}$$

Perceba agora que, quando  $k$  cresce,  $k/(k + 1)$  é sempre menor que 1 mas cada vez mais próximo de 1 e portanto

$$\mathbb{P}(X = k + 1) \approx \mathbb{P}(X = k)$$

se  $k$  for bem grande. As duas probabilidades serão pequenas mas quase idênticas. Isto é, a medida que  $k$  cresce, as probabilidades decaem muito lentamente, quase nada quando  $k$  for bem grande.

- Quando  $\alpha > 0$  crescer, o que você esperar acontecer ao gerar inteiros Zipf com estes  $\alpha$  grandes em relação à geração com  $\alpha$  apenas ligeiramente maior que 1.

- Faça um gráfico dos pontos  $(\log(k), \log(\mathbb{P}(X = k))$ . O resultado é o que você esperava? Usando `abline(log(C), -(1+alpha))`, sobreponha uma reta com intercepto  $\log(C)$  e inclinação  $-(1 + \alpha)$ .
- Chega de análise teórica, vamos simular por Monte Carlo alguns valores Zipf agora. A função `R` abaixo faz isto para você:

```
rzipf = function(nsim = 1, alpha = 1, Cte = 1/1.645)
{
  res = numeric(nsim)
  for(i in 1:nsim){
    x = -1
    k = 1
    F = p = Cte
    U = runif(1)
    while( x == -1){
      if(U < F) x = k
      else{
        p = p * (k/(k+1))^(1+alpha)
        F = F + p
        k = k+1
      }
    }
    res[i] = x
  }
  res
}
```

Por default, a função assume  $\alpha = 1$  e fornece também a constante  $C$ . Para gerar  $nsim = 400$  valores com estes argumentos default, basta digitar `rzipf(400)`. Para gerar 400 valores de uma Zipf com  $\alpha = 1/2$  e com a constante  $C = 1/2.612$  determinada por este valor de  $\alpha$ , basta digitar `rzipf(400, 1/2, 1/2.62)`.

Agora, a tarefa: gere 400 valores de Zipf com  $\alpha = 1/2, 1, 2$  (as constantes estão no texto acima). Verifique que apesar da maioria dos valores ficar num intervalo limitado, valores extremamente grandes (relativamente aos demais) são gerados com facilidade. Repita a geração algumas vezes para observar este efeito. Reporte na lista apenas uma dessas repetições.

- 
4. Verifique se existe algo errado em cada uma das seguintes atribuições de argumentos aos parâmetros de algumas distribuições de probabilidade:

- $\text{Bernoulli}(\theta = 1.5)$
- $\text{Bin}(12.5, 0.5)$
- $\text{Bin}(25, 0.5, 0.5)$
- $\text{Poisson}(\lambda = -2)$
- $\text{Bin}(25, 0.03)$
- $\text{Poisson}(\lambda = 2.5)$

**Solução:** (a): argumento deve ser um número em  $[0, 1]$ ; (b): primeiro argumento deve ser um inteiro positivo; (c): requer apenas dois argumentos. (d)  $\lambda$  não pode ser negativo. (e): válido. (f): válido. Apesar da Poisson colocar massa de probabilidade apenas sobre os inteiros não-negativos, o seu parâmetro  $\lambda$  pode ter um valor que é um inteiro.

---

## 3.2 Variáveis aleatórias contínuas

- Este problema trata da distribuição gaussiana ou normal, a mais importante distribuição na análise de dados. Ela é uma v.a. contínua com suporte na reta real  $\mathbb{R} = (-\infty, \infty)$  e com densidade de probabilidade dependendo de dois parâmetros,  $\mu$  e  $\sigma$ :

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

Neste exercício você vai se familiarizar com a distribuição gaussiana.

- Divida a tela gráfica  $2 \times 2$  e desenhe o gráfico das densidades de probabilidade de uma  $N(0, 1)$  na posição  $(1, 1)$  da janela, uma  $N(2, 1)$  na posição  $(1, 2)$ , uma  $N(0, 4)$  na posição  $(2, 1)$  e uma  $N(2, 4)$  na posição  $(2, 2)$ .
- Qual o ponto  $x$  em que  $f(x)$  assume o valor máximo? Este ponto depende de  $\sigma$ ? E a altura  $f(x)$  no ponto de máximo, ela depende de  $\sigma$ ?
- No caso da gaussiana, o parâmetro  $\sigma$  controla a variação em torno de  $\mu$ . Para uma  $N(10, 5)$  verifique que a área debaixo da densidade entre  $10 - 2 \times \sqrt{5}$  e  $10 + 2 \times \sqrt{5}$  é aproximadamente igual a 0.95. Use a função `pnorm` para isto. Este é um resultado geral: no caso de uma gaussiana, a chance de observar um valor distante mais de  $2\sigma$  de do valor esperado e central  $\mu$  é aproximadamente 0.05.
- Gere 200 valores aleatórios independentes de  $X \sim N(\mu, \sigma)$  com  $\mu$  e  $\sigma$  escolhidos por você. Faça um histograma forçando a área toal ser igual a 1 (argumento `prob=T`) e sobreponha a curva da densidade gaussiana que você usou. Eles se parecem?

- Verifique o que está errado em cada uma das seguintes atribuições de argumentos aos parâmetros de algumas distribuições de probabilidade:

- $N(0, 1, 2.5)$  —; deveria ter apenas 2 parâmetros
- $Beta(-2, -2)$
- $Beta(1,1)= U(0,1)$
- $N(1, 0)$  —; 2º parâmetro é a variancia, que deve ser  $\sigma^2$
- $Gama(a, a - b)$  onde  $a=3$  e  $b = 6$  —; segundo parâmetro é  $a-b=-3$  e deveria ser  $\sigma$

- Um campeonato de futebol tem  $n$  times e cada um deles joga duas partidas contra cada um dos outros  $n - 1$  times, uma vez em casa e uma vez fora de casa. Como usual, um time pode ganhar 0, 1 ou 2 pontos ao final de uma partida. Suponha que os resultados dos jogos são todos independentes uns dos outros e que os times possuam a mesma habilidade de forma que a probabilidade de vencer

qualquer partida é sempre 1/2 para qualquer time. Nesta situação idealizada, qual a distribuição do número de pontos  $X$  que um time terá ao final do campeonato? Qual é a  $\mathbb{E}(X)$  e a  $\mathbb{V}(X)$ ? Colocar gráfico real e verificar se está próximo do real.

---

4. Em um cassino, os jogadores usam  $n$  dados bem平衡ados de 6 lados. Se um 6 aparecer em qualquer um dos dados, o jogador não recebe nada. Se nenhum 6 aparecer, o jogador recebe a soma (em dólares) dos valores nas faces dos dados. O jogador é livre para escolher  $n$ , o número de dados.
  - a) Derive uma fórmula para o retorno esperado do jogador (o total de dólares ganhos). Traçar este pagamento para valores de  $n$  de 1 a 20. Qual é o menor  $n$  que maximiza o retorno esperado?
  - b) Suponha que o jogador opte por lançar  $n = 10$  dados. Qual é o número esperado de valores de dados distintos que aparecem? Ou: qual é o número esperado de faces que aparecem pelo menos uma vez?
5. Seja  $X \sim \exp(1/3)$ . Isto é,  $X \sim \exp(\lambda)$  com  $\lambda = 1/3$ . Isto implica que a densidade  $f(x)$  é igual a

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ (1/3) \exp(-x/3), & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

Calcule  $\mathbb{E}(X)$ ,  $\mathbb{F}(x)$  e  $\mathbb{P}(X > 3)$ .

---

6.  $X$  é uma v.a. com distribuição Pareto contínua com parâmetros  $m$  e  $\alpha$ . Isto é,

$$f_X(x) = \begin{cases} 0 \text{ se } x \leq m \\ c/x^{\alpha+1} \text{ se } x > m \end{cases}$$

onde a constante de integração  $c$  é dada por  $c = \alpha m^\alpha$ .

Calcule  $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$ . Calcule também  $\mathbb{E}(X)$  para  $\alpha > 1$  (a integral  $\mathbb{E}(X)$  não existe se  $0 < \alpha \leq 1$ ).

Para simular 1000 valores de uma Pareto e visualizar os resultados com  $R$ , basta digitar:

```
m=1; alpha=1
x = m*(1-runif(1000))^{(-1/alpha)}
par(mfrow=c(1,2))
hist(x); plot(x)
```

Repita estes comandos algumas vezes. Veja como valores muito extremos de  $X$  são gerados com facilidade.

---

7. O arquivo `vadiscreta.txt` possui uma tabela de dados com  $n = 200$  itens e  $k = 6$  atributos, todos discretos. Podemos assumir que os itens são replicações independentes de um mecanismo aleatório. Queremos encontrar um modelo probabilístico para cada coluna-atributo da tabela.

Para cada uma das colunas, vamos assumir que os  $n = 200$  itens são realizações independentes de uma mesma v.a. discreta. As 3 primeiras colunas possuem 5 valores possíveis. Isto é, o suporte das v.a.s é o conjunto  $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ . Embora os valores possíveis sejam os mesmos nos três atributos, as probabilidades associadas são diferentes.

$k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
<i>OBS</i>	215	1485	5331	10649	14959	11929	6678	2092	342
<i>ESP</i>	165.22	1401.69	5202.65	11034.65	14627.60	12409.87	6580.24	1993.78	264.30
<i>DIF</i>	49.78	83.31	128.35	-385.65	331.40	-480.87	97.76	98.22	77.70

Tabela 3.1: Número  $k$  de filhos do sexo masculino em 53680 famílias de tamanho 8. *OBS* são os números observados na Alemanha no século XIX e *ESP* são os números esperados sob o modelo binomial. A linha *DIF* é a diferença entre as linhas *OBS* e *ESP*.

Para o primeiro atributo, acredita-se que os cinco valores sejam igualmente prováveis.

Para o segundo atributo, deseja-se verificar se as probabilidades são similares a outras cinco probabilidades deduzidas de uma teoria. Esta teoria afirma que a chance de observar  $k$  decai exponencialmente com  $k$ . Isto é, na segunda coluna queremos verificar se temos  $\mathbb{P}(X = k) = c\theta^k$  onde  $\theta \in (0, 1)$  é uma constante e  $c$  é outra constante necessária para que as probabilidades somem 1. Mostre que este modelo implica em ter as razões entre probabilidades sucessivas constantes e iguais a  $\theta$ :

$$r_k = \frac{\mathbb{P}(X = k + 1)}{\mathbb{P}(X = k)} = \theta$$

para  $k = 1, 2, 3, 4$ .

Para o terceiro atributo, existe uma outra população similar que foi exaustivamente estudada e para a qual encontrou-se o seguinte:

$k$	1	2	3	4	5
$\mathbb{P}(X = k)$	0.44	0.11	0.12	0.32	0.01

Estime as probabilidades  $\mathbb{P}(X = k)$  para  $k = 1, \dots, 5$  em cada coluna usando as frequências relativas de cada categoria. A seguir, verifique *informalmente* (usando gráficos ou comparações simples de tabelas de números) se os modelos para cada um dos atributos é compatível com os dados observados.

Não quero que você saia pesquisando para encontrar maneiras ótimas de resolver o problema. Também não estou esperando nem pedindo que você use o teste qui-quadrado ou Kolmogorov.

8. Em seu livro clássico *Statistical Methods for Research Workers*, Ronald A. Fisher, o maior gênio estatístico que já existiu, analisa alguns dados referentes ao número de filhos do sexo masculino entre famílias com um número total de filhos igual a 8. Os dados foram coletados por A. Geissler em uma região da Alemanha no período de 1876 a 1885. O livro de Fisher tem uma página na wikipedia, [http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical\\_Methods\\_for\\_Research\\_Workers](http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical_Methods_for_Research_Workers).

É bem conhecido que os nascimentos do sexo masculino são ligeiramente mais numerosos do que os nascimentos do sexo feminino. Suponhamos que a probabilidade de uma criança ser do sexo masculino seja  $\theta > 0.5$ . Suponha que os 8 nascimentos sucessivos numa família de tamanho 8 sejam independentes. Assuma também que  $\theta$  é o mesmo para todas as famílias e para os 8 nascimentos ao longo de uma sequência familiar. Então o número  $X$  de meninos numa família de tamanho 8 seguiria uma distribuição binomial:  $X \sim \text{Bin}(8, \theta)$ .

A linha *OBS* na Tabela 3.1 mostra o número de famílias com  $k$  filhos do sexo masculino na população de 53680 famílias com exatamente 8 filhos. A linha *ESP* mostra o número esperado de famílias com  $k$  meninos dentre os 8 filhos se o modelo binomial se aplicar.

Impressionava que algumas centenas de famílias tivessem todos os seus 8 filhos homens ou todos mulheres. Estas centenas de famílias não representavam um excesso em relação ao que se espera

sob o modelo binomial? Se as famílias diferissem não só pelo acaso associado com a distribuição binomial, mas também por uma tendência por parte de alguns pais para produzir homens ou mulheres, os dados não seriam bem ajustados por uma binomial. Imagine, para tomar um exemplo muito extremo, que cada família escolhesse um valor  $\theta$  para sua probabilidade de gerar meninos. Após escolher “seu”  $\theta$ , ou a sua “moeda”, cada família a jogasse para cima 8 vezes de acordo com o modelo binomial. Suponha que as famílias retirassem os seus  $\theta$ ’s de uma urna onde houvessem apenas dois tipos de valores e em iguais proporções:  $\theta = 0.01$  e  $\theta = 0.99$ . Neste caso, veríamos nos dados um acúmulo de famílias nas categorias extremas (com 0 ou 1 ou então com 8 ou 7 filhos), sem muitas famílias com número intermediário de filhos homens.

É claro que não vemos nada tão extremo nos dados acima. Fisher escreve: *The observed series differs from expectation markedly in two respects: one is the excess of unequally divided families; the other is the irregularity of the central values, showing an apparent bias in favour of even values. No biological reason is suggested for the latter discrepancy, which therefore detracts from the value of the data. The excess of the extreme types of family may be treated in more detail by comparing the observed with the expected ...*

- Para verificar sua compreensão do problema, obtenha os números esperados que estão na Tabela 3.1.
- Calcule a estatística qui-quadrado neste problema (você deve obter um valor de  $X^2 = 91.87$ ).
- Qual a distribuição de referência desta estatística?
- Qual o p-valor associado com esta estatística? (DICA: use `pchisq` para obter o p-valor igual a 0.0 (numa aproximação até 15 casas decimais))

9. No livro clássico *Statistical Methods for Research Workers* de Ronald A. Fisher, ele apresenta alguns dados de contagens de leveduras de cerveja (fungos) obtidas através da observação humana num microscópio (hemocitômetro). Um área de 1 milímetro quadrado foi dividido em 400 quadrados de área igual e foi contado o número de fungos em cada um deles. A tabela 3.2 mostra quantos quadradinhos tiveram  $k$  fungos. Ela também mostra os números esperados segundo um modelo de Poisson.

Obtenha a coluna de números esperados segundo o modelo Poisson. Em seguida, use o teste qui-quadrado para testar se os dados são compatíveis com esta hipótese.

10. Este exercício usa o teste de Kolmogorov. Gere 100 valores i.i.d. de uma  $N(0, 1)$  e teste se eles de fato vem de uma  $N(0, 1)$  usando o teste de Kolmogorov. Em R, você pode usar o comando `ks.test` para isto:

```
x = rnorm(100)
ks.test(x, "pnorm", 0, 1)
```

Repita estes comandos 1000 vezes. Colete os valores da estatística  $D$  e do p-valor nestas 1000 simulações. Faça um histograma padronizado dos 100 valores de  $D$ . Qual é o intervalo dentro do qual você pode esperar os valores de  $D$  quando o modelo proposto coincide com o processo gerador de dados?

Faça um histograma dos p-valores obtidos. Ele deve ter uma distribuição aproximadamente uniforme no intervalo  $(0, 1)$ . Qual a proporção dos p-valores simulados que ficaram menores que 0.05?

$k$	Obs	Esp
0	0	3.71
1	20	17.37
2	43	40.65
3	53	63.41
4	86	74.19
5	70	69.44
6	54	54.16
7	37	36.21
8	18	21.18
9	10	11.02
10	5	5.16
11	2	2.19
12	2	0.86
13	0	0.31
14	0	0.10
15	0	0.03
16	0	0.03
Total	400	400

Tabela 3.2: Contagens de leveduras de cerveja em 400 quadrados e valores esperados segundo modelo Poisson.

11. Um exercício simples e importante. Você deve coletar algum conjunto de dados, QUALQUER UM, com pelo menos 100 instâncias e pelo menos dois atributos. Pelo menos um dos atributos deve ser numérico. Os dados podem ser, por exemplo, os tamanhos de seus arquivos pessoais, dados de uma rede de computadores, dados extraídos de textos ou imagens. O fundamental é que você mesmo colete ou obtenha os dados. Não devem ser entregues dados de bases conhecidas e disponíveis na web em repositórios de dados.

Em seguida, você deve tentar ajustar uma distribuição, qualquer uma, a um dos atributos em seus dados usando o teste qui-quadrado ou o teste de Kolmogorov.

?? Vou ficar surpreso se você conseguir ajustar alguma coisa. Portanto, não hánenhuma expectativa da minha parte de que você consiga, nesta altura do curso, fazer um ajuste de alguma distribuição.  
??

- 
12. Buscar exemplo em redes com binomial - coursera - ???
- 

13. Prove que  $m = \mathbb{E}(Y)$  minimiza  $\mathbb{E}(Y - m)^2$ . Dica: soma e subtraia  $\mathbb{E}(Y)$ , expanda o quadrado e tome esperança de cada termo. A seguir, derive com relação a  $m$ .
- 

### 3.3 Ajuste de distribuição

1. O R possui uma função, `ks.test()`, que implementa o teste de Kolmogorov. Suponha que  $x$  é um vetor com  $n$  valores numéricos distintos. Então `ks.test(x, "pnorm", m, dp)` testa se  $x$  pode vir da distribuição  $N(m, dp)$ , uma normal (ou gaussiana) com média  $\mu = m$  e desvio-padrão  $\sigma = dp$ .

Outras distribuições são possíveis substituindo o string "pnorm": as pré-definidas em R (veja com `?distributions`) ou qualquer outra para a qual você crie uma função que calcula a função distribuição acumulada teórica.

```
> ks.test(x, "pnorm")

One-sample Kolmogorov-Smirnov test

data: x
D = 0.0805, p-value = 0.876
alternative hypothesis: two-sided
```

A saída de `ks.test()` fornece o valor de  $D_n = \max_x |\hat{F}_n(x) - F(x)|$  e o p-valor (a esta altura talvez já tenhamos aprendido o conceito de p-valor). Dissemos em sala que se  $\sqrt{n}D_n$  estiver aproximadamente entre 0.4 e 1.4, podemos aceitar o modelo (não há evidência nos dados para rejeitar o modelo). Se  $\sqrt{n}D_n > 1.36$ , rejeitamos o modelo.

Gere alguns dados com  $n = 50$  de uma normal qualquer e use a função `ks.test()` para verificar se o teste rejeita o modelo. Faça o teste de dois modos: use o modelo correto que você usou para gerar seus dados e depois use um modelo diferente deste alterando, por exemplo, o valor de  $\mu$  ou  $\sigma$ .

---

2. Implemente em R uma função para calcular o resultado de um teste de Kolmogorov. A função estará restrita a testar apenas o modelo normal com média  $\mu = \text{mean}$  e desvio-padrão  $\sigma = \text{sd}$  que devem ser fornecidas pelo usuário ou obtidas dos próprios dados (default) usando a média aritmética (comando `mean()`) e o desvio-padrão amostral (raiz da saída do comando `var()`). Não se preocupe em lidar com os casos extremos (usuário fornecer vetor nulo, fornecer vetor com valores repetidos, etc).

Observação importante: pode-se provar que  $D_n = \max_x |\hat{F}_n(x) - F(x)|$  assume seu valor em um dos pontos de salto de  $\hat{F}_n(x)$ , ou imediatamente antes de  $x_i$  ou em  $x_i$ , onde  $x_i$  é um dos valores do vetor.

---

3. Obtenha duas amostras de dados estatísticos, uma com valores de v.a.'s discretas e outra com dados contínuos, ligados de alguma forma a problemas de seu interesse. Postule um modelo de dados i.i.d. para cada lista com uma distribuição de probabilidade que você acredita que possa se ajustar aos dados. Calcule a qualidade do ajuste da sua distribuição usando o teste qui-quadrado de Pearson. Exponha as dificuldades ou dúvidas práticas ou teóricas não-cobertas no curso que você talvez encontre neste exercício.
4. *Distribuição de Zipf.* Considere um longo texto (ou vários textos juntos). Algumas palavras aparecem pouco, são raras. Outras aparecem com muita frequência. Por exemplo, no português brasileiro (ver <http://www.linguateca.pt/>), temos a seguinte tabela de frequência (ocorrência aproximada da palavra em cada bloco de texto de um milhão de palavras):

palavra	posto (rank)	frequência (por 1M)
de	1	79607
a	2	48238
ser	27	4033
amor	802	174
chuva	2087	70
probabilidade	8901	12
interativo	14343	6
algoritmo	21531	3

Imagine o seguinte experimento: escolha uma palavra ao acaso do texto. Note que escolhemos do texto, onde algumas palavras aparecem repetidas várias vezes, e não de uma lista de palavras distintas (como num índice, onde cada palavra aparece apenas uma vez. Seja  $Y$  a v.a. indicando o posto (ou rank) da palavra escolhida. Por exemplo, se a palavra escolhida é *amor* o valor de  $Y$  é 802. Se a palavra escolhida é *de*, o valor de  $Y$  é 2. É óbvio que os valores de  $Y$  estão concentrados em valores baixos: com maior probabilidade devem ser escolhidas as palavras que aparecem com mais frequência no texto. Qual a distribuição de  $Y$ ? Depende da língua? Depende do assunto tratado na coleção de textos? Estudiosos dizem que um modelo de distribuição de probabilidade ajusta-se a uma ampla classe de problemas: a distribuição de Zipf.

Os valores possíveis de  $Y$  são iguais a  $1, 2, 3, \dots, N$ . Às vezes, o número  $N$  não é conhecido ou é simplesmente ignorado pois jogamos fora a informação sobre as palavras muito pouco frequentes (com posto muito alto). A distribuição de Zipf diz que

$$\mathbb{P}(Y = k) = \frac{c}{k^\theta} \quad (3.2)$$

onde  $\theta$  é uma constante que varia de problema para problema e  $c$  é a constante de normalização. Isto é, como  $1 = \sum_k \mathbb{P}(Y = k)$ , teremos

$$c = \frac{1}{\sum_k 1/k^\theta}$$

O fato fundamental na distribuição de Zipf é que as probabilidades decaem de forma polinomial com  $k$ . O parâmetro  $\theta$  costuma ser um valor próximo de 1.

Se tomarmos logaritmo dos dois lados de (3.2), temos

$$\log(\mathbb{P}(Y = k)) = \log(c) - \theta \log(k) = a - \theta \log(k).$$

Assim, no caso de uma distribuição de Zipf, um plot de  $\log(\mathbb{P}(Y = k))$  versus  $\log(k)$  deveria exibir uma linha reta cuja inclinação seria o negativo do parâmetro  $\theta$  (tipicamente, aproximadamente, -1).

Na tabela acima, temos a frequência  $n_k$  em 1 milhão de algumas palavras do português, bem como seu rank. Probabilidades são aproximadamente a frequência relativa de modo que  $\mathbb{P}(Y = k) \approx n_k 10^6$  e portanto

$$\log(c) - \theta \log(k) = \log(\mathbb{P}(Y = k)) \approx \log(n_k / 10^6)$$

o que implica em

$$\log(n_k) \approx (\log(c) - 6 \log(10)) - \theta \log(k)$$

Assim, para checar se uma distribuição de Zipf ajusta-se aos dados, podemos fazer um scatter-plot dos pontos  $(\log(k), \log(n_k))$  e verificar se eles caem aproximadamente ao longo de uma linha reta. Ajustando uma reta (por mínimos quadrados ou regressão linear, por exemplo) podemos encontrar uma estimativa para  $\theta$ .

- Da Wikipedia: *Zipf's law states that given some corpus of natural language utterances, the frequency of any word is inversely proportional to its rank in the frequency table. Thus the most frequent word will occur approximately twice as often as the second most frequent word, three times as often as the third most frequent word, etc. For example, in the Brown Corpus of American English text, the word "the" is the most frequently occurring word, and by itself accounts for nearly 7% of all word occurrences (69,971 out of slightly over 1 million). True to Zipf's Law, the second-place word "of" accounts for slightly over 3.5% of words (36,411 occurrences), followed by "and" (28,852). Only 135 vocabulary items are needed to account for half the Brown Corpus.* Explique como a equação (3.2) implicaria que *the frequency of any word is inversely proportional to its rank*. A resposta é simples e direta, não tem nada sutil ou complicado aqui.
  - Use os dados da tabela acima para fazer o scatter-plot dos pontos  $(\log(k), \log(n_k))$ . Em R, basta fazer `summary(lm(y ~ x))` onde  $y$  e  $x$  são os vetores com  $\log(n_k)$  e  $\log(k)$ , respectivamente. Qual o valor da inclinação? RESP: -0.999.
  - Um excelente material sobre Zipf e Pareto: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0412004>
- 

5. A distribuição de Poisson é muito usada para modelar dados de contagens. Por exemplo, ela pode ser usada para modelar o número de mortes por certa doença numa região durante um ano, o número de falhas num software descobertas num certo período de desenvolvimento, o número de requisições de um certo recurso numa rede, etc.

Se  $Y$  tem distribuição de Poisson então ela possui um número infinito de valores possíveis:  $0, 1, 2, \dots$  com probabilidades associadas dadas por  $\mathbb{P}(Y = k) = \lambda^k \exp(-\lambda)/k!$  onde  $\lambda > 0$  é um parâmetro controlando a forma da distribuição.

- Se o conjunto de valores possíveis é infinito, como é possível explicar que a soma  $\sum_k \mathbb{P}(Y = k)$  das probabilidades não seja infinita?
  - Mostre que  $\sum_k \mathbb{P}(Y = k) = 1$  (consulte qq livro de probab ou a web)
  - Mostre que  $\mathbb{E}(Y) = \sum_k k \mathbb{P}(Y = k) = \lambda$  (isto mostra qual o significado do parâmetro  $\lambda$ ). Pode-se mostrar (não precisa fazer isto) que a variância  $\mathbb{V}(Y) = \lambda$ . Isto é, no caso Poisson,  $\mathbb{E}(Y) = \lambda = \mathbb{V}(Y)$ .
  - Supondo que  $\lambda = 0.3$ , use a função `dpois` do R para calcular  $\mathbb{P}(Y = 2)$ .
  - Supondo que  $\lambda = 0.3$ , use a função `ppois` do R para calcular  $\mathbb{P}(Y \geq 3)$ .
  - Supondo que  $\lambda = 0.3$ , use a função `rpois` do R para simular 3 mil valores de  $Y \sim \text{Poisson}(0.3)$ . Com a amostra gerada, use a proporção de vezes em que  $Y \geq 3$  para estimar  $\mathbb{P}(Y \geq 3) = 0.0036$ . Verifique também que a média aritmética dos 300 valores gerados é aproximadamente igual a  $\lambda$ .
  - Repita os itens 4 a 6 usando  $\lambda = 3$ .
- 

6. A distribuição Gama é muito flexível, adotando formas muito distintas dependendo de seus parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  (veja na wikipedia). Existe mais de uma forma de parametrizar a distribuição gama. A mais comum (e usada como default pelo R) é aquela em que a densidade de probabilidade de  $Y \sim \text{Gamma}(\alpha, \beta)$  é dada por  $f(x) = 0$  se  $x \leq 0$  e, se  $x > 0$ , por

$$f(x) = cx^{\alpha-1} \exp(-\beta x).$$

onde  $c$  é uma constante para que a área total debaixo da curva seja 1.

- Usando `rgamma` do R, gere 350 valores de uma gama com  $\alpha = 9$  e  $\beta = 3$ . Faça um histograma padronizado destes números gerados e, usando `lines` e `dgamma`, sobreponha a curva densidade. Ficam parecidos?
- Teoricamente, temos  $\mathbb{E}(Y) = \alpha/\beta = 9/3 = 3$ . Calcule a média aritmética dos 350 números gerados e compare com  $\mathbb{E}(Y)$ . Eles são aproximadamente iguais.
- Usando `pgamma`, faça um gráfico da distribuição acumulada teórica de uma gama com  $\alpha = 9$  e  $\beta = 3$ . Sobreponha o gráfico da distribuição acumulada empírica: eles se parecem? O script abaixo foi usado para algo similar num dos slides do curso:

```
set.seed(1)
dados <- rnorm(30, 10, 2) # gera 30 valores de uma N(10,2)
Fn <- ecdf(dados) # calcula a função dist. acum. empírica
plot(Fn, verticals= T, do.p=F, main="", xlab="x", col="blue", xlim=c(3, 16))
x <- seq(3, 16, by=0.1)
y <- pnorm(x, 10, 2) # calcula a acumulada teórica de uma N(10,2)
lines(x,y, col="red")
```

---

7. Gere  $n = 100$  valores aleatórios em  $(0, 1)$  e guarde num vetor  $x$ . Repita isto e guarde o resultado em  $y$ . Faça um gráfico de dispersão (scatterplot) de  $x$  versus  $y$  (o objetivo é apenas fazer um scatterplot qualquer). Como você poderia gerar  $y$  se você quisesse que seus valores dependessem de alguma forma do valor correspondente  $x$ ?
8. Seja  $Y$  uma v.a. com valor esperado  $\mathbb{E}(Y) = \mu$  e variância  $\mathbb{V}(Y) = \sigma^2$ . Prove a desigualdade de Tchebyshev:  $\mathbb{P}(|Y - \mu| \geq k\sigma) \leq 1/k^2$ . OBS: Qualquer livro de probabilidade (ou a web) possui a demonstração.
9. Aplique a desigualdade de Tchebyshev com  $k = 1, 2, 4, 6, 10$ . O que acontece com a cota (bound) dado pela desigualdade? Como é o seu decaimento?
10. Seja  $X \sim \exp(1/3)$ . Isto é,  $X \sim \exp(\lambda)$  com  $\lambda = 1/3$ . Calcule  $\mathbb{E}(X)$ ,  $\mathbb{V}(X)$ ,  $\mathbb{F}(x)$  e  $\mathbb{P}(X > 3)$ .  
RESP:  $\mathbb{E}(X) = 3$ ;  $\mathbb{V}(X) = 3^2$ ;  $\mathbb{F}(x) = 0$  se  $x \leq 0$  e  $\mathbb{F}(x) = 1 - \exp(-x/3)$ , para  $x > 0$ ;  $\mathbb{P}(X > 3) = \exp(-3/3) = 0.37$ . Veja que, embora o valor esperado  $\mathbb{E}(X)$  seja igual a 3, temos  $\mathbb{P}(X > 3) < 1/2$ . No caso geral,  $\mathbb{E}(X) = 1/\lambda$ ;  $\mathbb{V}(X) = 1/\lambda^2$ ;  $\mathbb{F}(x) = 0$  se  $x \leq 0$  e  $\mathbb{F}(x) = 1 - \exp(-\lambda x)$ , para  $x > 0$ ;  $\mathbb{P}(X > 3) = \exp(-3\lambda)$ .
11. Use o método da transformada inversa com a função  $\mathbb{F}(x)$  calculada no exercício anterior para gerar 1000 valores aleatórios de  $X \sim \exp(1/3)$ . Faça um histograma (normalizado com área 1) dos 1000 valores gerados e sobreponha o gráfico da função densidade de probabilidade (dada por  $f(x) = 0$  se  $x \leq 0$  e  $f(x) = (1/3) \exp(-x/3)$ , se  $x > 0$ ). Calcule a média aritmética e compare com o valor teórico  $\mathbb{E}(X) = 3$ .  
Gere uma segunda amostra de tamanho 1000 e recalcule a média aritmética. Verifique que o valor teórico  $\mathbb{E}(X) = 3$  permanece o mesmo mas que a média aritmética varia de amostra para amostra.

RESP: Como  $\mathbb{F}(x) = 1 - \exp(-x/3)$  então  $X = -3 \log(1 - U) \sim \exp(1/3)$  se  $U \sim U(0, 1)$ . Script em R (# significa comentário):

```

x <- -3*log(1-runif(1000)) # runif(n) gera n v.a.'s U(0,1)
mean(x)
hist(x, prob=T) # normaliza com o argumento prob=

# sobrepondo o grafico da densidade:
grid <- seq(0, 20, length=100) # vetor com pontos no eixo x
y <- dexp(grid, rate=1/3) # densidade exp(1/3) nos pontos de grid

lines(grid, y, type = "l") # adiciona linhas ao grafico anterior

# Podemos tambem calcular diretamente o valor da funcao densidade
hist(x, prob=T) #normaliza com o argumento prob=
y <- 1/3 * exp(-grid/3)
lines(grid, y, type = "l") # adiciona ao grafico anterior

# R tem varias funcoes para gerar v.a.'s de distribuicoes conhecidas
x <- rexp(1000, rate=1/3) # gera 1000 v.a.'s exp(1/3)
x <- rnorm(1000, m=10, sigma=2) # gera 1000 v.a.'s N(10, 2^2)
x <- rgamma(1000, alpha=3, beta =2) # 1000 Gamma(3,2)

```

---

12.  $X$  é uma v.a. com distribuição Pareto com parâmetros  $m$  e  $\alpha = 2$ . Isto é,

$$f_X(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq m \\ c/x^{\alpha+1} & \text{se } x > m \end{cases}$$

onde a constante de integração  $c$  é dada por  $c = \alpha m^\alpha$ . Calcule  $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$ .

Calcule também  $\mathbb{E}(X)$  para  $\alpha > 1$  (a integral  $\mathbb{E}(X)$  não existe se  $0 < \alpha \leq 1$ ).

RESP:  $\mathbb{F}(x) = 0$  se  $x \leq m$  e  $\mathbb{F}(x) = 1 - (m/x)^\alpha$ . Temos

$$\mathbb{E}(X) = \int_m^\infty x c/x^{\alpha+1} dx = \int_m^\infty c/x^\alpha dx = c/((1 - \alpha)x^{\alpha-1}) = \alpha m/(\alpha - 1)$$


---

13. Usando o método da transformada inversa, gere 1000 valores de uma Pareto com  $\alpha = 4$  e  $m = 1$ . Gere outros 1000 valores de uma Pareto com  $\alpha = 2, 1$ , e  $0.5$ . Qual o efeito de diminuir  $\alpha$  em direção a zero? Compare  $\mathbb{E}(X)$  com os valores gerados nos casos em que  $\alpha > 1$ .

RESP: Como  $\mathbb{F}(x) = 1 - (m/x)^\alpha$  para  $x > m$ , temos a v.a.  $X = \mathbb{F}^{-1}(U) = m/(1 - U)^{1/\alpha}$  com distribuição Pareto com parâmetros  $m$  e  $\alpha$ . Se  $m = 1$  e  $\alpha = 2$ , temos  $X = 1/\sqrt{1 - U}$ . Tomando  $\alpha = 1$ , temos  $X = 1/(1 - U)$  e, se  $\alpha = 1/2$ , temos  $X = 1/(1 - U)^2$ . Usando um script R (Note a ESCALA dos 4 gráficos abaixo e compare  $\mathbb{E}(X)$  com os valores gerados nos casos em que  $\alpha > 1$ ):

```

x4 <- 1/(1-runif(1000))^(0.25) # gera 1000 v.a.'s Pareto m=1 e alpha=4
x2 <- 1/sqrt(1-runif(1000)) # gera 1000 v.a.'s Pareto m=1 e alpha=2
x1 <- 1/(1-runif(1000)) # Pareto m=1 e alpha=1
x05 <- 1/(1-runif(1000))^2 # Pareto m=1 e alpha=1/2
par(mfrow=c(2,2)) # divide a janela grafica numa matriz 2x2
plot(x4) # grafico da **sequencia** de valores gerados
plot(x2); plot(x1); plot(x05)

```

- 
14. Verifique como valores extremos são facilmente gerados pela Pareto. Tomando  $m = 1$  e  $\alpha = 0.5$ , calcule  $\mathbb{P}(X \leq 10)$ . A seguir, calcule  $\mathbb{P}(X > 10^k)$  para  $k = 2, 3, 4, 5$ .

RESP: Com  $m = 1$  e  $\alpha = 0.5$ ,  $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = 1 - 1/sqr{tx}$  para  $x > 0$ . Assim,  $\mathbb{P}(X \leq 10) = 0.68$ . Isto é, 68% dos valores gerados numa simulação serão no máximo iguais a 10. Temos  $\mathbb{P}(X \leq 100) = 1/\sqrt{100} = 0.1$ . Portanto, 10% dos valores gerados numa simulação devem maiores que 100. Muito maiores?  $\mathbb{P}(X \leq 1000) = 0.03$  ou 3% dos valores gerados são maiores que 1000. Temos  $\mathbb{P}(X \leq 10000) = 0.01$  e  $\mathbb{P}(X \leq 100000) = 0.003$  e finalmente  $\mathbb{P}(X \leq 1000000) = 0.001$ . Assim, 1 em cada 1000 valores gerados serão maiores que 1 milhão mesmo que a maioria (68%) sejam menores que 10.

---

15. Durante a Segunda Grande Guerra, foram mapeados os locais atingidos por bombas ao sul de Londres. A área foi dividida em  $n = 576$  quadrinhos, cada um com  $0.25km^2$ . O número total de bombas que atingiu a região foi 537. Seja  $X_i$  o número de bombas no quadrinho  $i$ . Vimos em sala que um bom modelo para as contagens  $X_1, \dots, X_{576}$  supõem que elas sejam instâncias de uma variável aleatória Poisson( $\lambda$ ).

Neste exercício vamos verificar que o teste qui-quadrado permite eliminar escolhas incorretas para a distribuição de  $X$ . Vamos supor que a contagem de bombas ACRESCIDA DE UMA UNIDADE siga a distribuição logarítmica com parâmetro  $\theta \in (0, 1)$ , que é definida da seguinte forma:

- Valores possíveis:  $\{1, 2, 3, \dots\}$
- $\mathbb{P}(Y = k) = \frac{-1}{\log(1-\theta)} \frac{\theta^k}{k}$  para  $k = 1, 2, \dots$ ,
- com  $\mathbb{E}(Y) = \frac{-1}{\log(1-\theta)} \frac{\theta}{1-\theta}$ .

OBS: Como  $\theta \in (0, 1)$ , temos  $\log(1 - \theta) < 0$ . Esta é a razão para o sinal de menos na expressão da função de probabilidade acima. Você deve ter notado que somamos 1 a  $X$  pois o número de bombas pode ser zero e a distribuição logarítmica começa de 1. Isto é, supomos que  $Y = X + 1$  siga a distribuição logarítmica.

- Estime  $\mathbb{E}(Y)$  usando a média aritmética  $\bar{X} + 1$  e obtenha assim uma estimativa de  $\theta$ . RESP:  $\hat{y} = 1 + 0.9323$  e  $\hat{\theta} = 0.696$ .
- A seguir, preencha os valores esperados do número de quadrados com  $k$  bombas na tabela abaixo. Por exemplo, o número esperado com 0 bombas é dado por

$$576 \times \mathbb{P}(X = 0) = 576 \times \mathbb{P}(Y = 1) = \frac{-1}{\log(1 - \hat{\theta})} \frac{\hat{\theta}^1}{1} = 576 \times 0.585 = 336.96$$

$k$	0	1	2	3	4	5 e acima
Obs	229	211	93	35	7	1
Esp	336.96	??	??	??	??	??

Para a última categoria, use  $\mathbb{P}(X \geq 5) = 1 - \sum_{j=1}^4 \mathbb{P}(X = j)$ .

- Embora seja óbvio que a distribuição logarítmica não se ajusta a estes dados, calcule a estatística qui-quadrado a partir das diferenças entre os valores observados e esperados nesta tabela.
- Obtenha o p-valor com o comando `1-pchisq(qq, df)` onde  $qq$  é o valor da estatística qui-quadrado e  $df$  é o número de graus de liberdade.

- 
16. Use os dados das contagens mensais de cirurgias cardiovasculares infantis em hospitais discutido em sala de aula para verificar se, para cada hospital, podemos assumir que as suas contagens  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  sejam i.i.d. e sigam uma distribuição de Poisson com parâmetro  $\lambda$ . Os dados estão no arquivo cirurgia.txt. Use o script cirurgia.R para iniciar sua análise. Eu deixei todos os comandos necessários para fazer a análise com o Hospital 1. Considere os seguintes exercícios:

- Faça um teste qui-quadrado para o SÉTIMO hospital da tabela (linha 7). Usando a função `pchisq`, calcule o p-valor associado com a hipótese ou modelo assumido (isto é, i.i.d.  $\text{Poisson}(\lambda)$ ).
- EXERCICIO OPCIONAL, BONUS (PONTO EXTRA SE ENTREGAR): Generalize o código anterior fazendo uma função em R para executar estes cálculos para cada um dos hospitais da tabela. Você vai precisar considerar a criação das classes de valores que vai variar de hospital para hospital.
- O teste qui-quadrado é interessante porque é um teste genérico, pode ser usado para com qualquer modelo para a distribuição de uma variável aleatória. Entretanto, supondo que a distribuição é uma Poisson, podemos explorar alguns aspectos específicos **desta** distribuição para avaliar se o modelo ajusta-se aos dados observados. Uma dessas formas, puramente visual, é a seguinte:
  - Mostre que, se  $Y \sim \text{Poisson}(\lambda)$ , então  $r_k = \mathbb{P}(Y = k)/\mathbb{P}(Y = k + 1) = (k + 1)/\lambda$ .
  - Tomando logaritmo natural dos dois lados da igualdade acima, temos  $\log(r_k) = -\log(\lambda) + \log(k + 1)$ . Assim, um gráfico de  $\log(r_k)$  versus  $\log(k + 1)$  deveria mostrar uma linha reta com coeficiente angular 1 e intercepto que vai variar com o valor de  $\lambda$ .
  - Estime  $r_k$  pela razão  $f_k = n_k/n_{k+1}$  onde  $n_k$  é o número de elementos da amostra que são iguais a  $k$ . Faça o gráfico de  $\log(f_k)$  versus  $\log(k + 1)$  e verifique se aparece aproximadamente uma reta de inclinação 1. Faça isto APENAS PARA O HOSPITAL 7 para entregar (se quiser fazer mais, fique à vontade!)
- Uma outra forma simples de verificar se o modelo de Poisson ajusta-se aos dados que estão num vetor  $y$  é o teste de dispersão:
  - Numa v.a. Poisson, o valor esperado  $\mathbb{E}(Y) = \lambda$  é igual à variância da v.a.  $\mathbb{V}(Y)$ .
  - Estime  $\mathbb{E}(Y)$  pela média aritmética  $m$  das observações no vetor  $y$  (usando `mean(y)` no R).
  - Estime  $\mathbb{V}(Y)$  pela variância  $v$  da amostra (usando `var(y)` no R).
  - Calcule a razão  $v/m$ , que deveria ser próxima de 1 se o modelo Poisson é correto.
  - Como avaliar se  $v/m$  está próximo de 1? Se  $n$  é o comprimento do vetor de contagens  $y$ , pode-se mostrar que  $(n - 1)v/m$  segue aproximadamente uma distribuição qui-quadrado (ela aqui de novo) com  $n - 1$  graus de liberdade.
  - Usando os dados do HOSPITAL 7, calcule o p-valor deste teste.

- 
17. Os primeiros 608 dígitos da expansão decimal do número  $\pi$  tem as seguintes frequências:

$k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Obs	60	62	67	68	64	56	62	44	58	67
Esp	??	??	??	??	??	??	??	??	??	??

Estes dados são compatíveis com a suposição de que cada dígito é escolhido de forma completamente aleatória? Isto é, de acordo com uma distribuição uniforme discreta sobre os possíveis dígitos?

18. Vamos usar a desigualdade de Tchebychev,

$$\mathbb{P}\left(\left|\frac{X - \mu}{\sigma}\right| \leq \delta\right) \leq \frac{1}{\delta^2}$$

para gerar um intervalo de predição para  $X$ . Suponha que  $X$  possua uma distribuição de probabilidade arbitrária com  $\mathbb{E}(X) = \mu = 120$  e  $Var(X) = \sigma^2 = 10^2$ . Usando a desigualdade de Tchebychev, mostre que o intervalo  $(120 \pm 45) = (75, 165)$  deverá conter pelo menos 95% dos dados gerados de  $X$ , qualquer que seja a distribuição de  $X$ .

Suponha agora que sabemos algo mais sobre a distribuição de  $X$ . Este conhecimento adicional reduz substancialmente a incerteza acerca dos valores gerados da distribuição. Agora, usando o comando `qnorm` do R, mostre que o intervalo que conterá 95% dos valores de uma amostra de  $X$  é  $120 \pm 1.96 * 10 = (100.4, 139.6)$ .

---

19. Gere uma amostra de tamanho  $n = 100$  de uma normal com  $\mu = 10$  e  $\sigma = 1$ . Faça o qqplot da amostra usando o comando `qqnorm(x)`. Repita isto 10 vezes. O gráfico ficou na forma de uma linha reta todas as vezes?

Refaça este exercício gerando os seus dados de uma distribuição Cauchy com parâmetro de locação  $\mu = 10$  e escala  $\sigma = 1$ : `rcauchy(100, 10, 1)`. Para comparar a distribuição  $N(10, 1)$  e a Cauchy(10, 1), use os seguintes comandos:

```
x <- seq(4, 16, by=0.01)
yc <- dcauchy(x, location = 10, scale = 1)
yn <- dnorm(x, mean = 10, sd = 1)
plot(x, yn, type="l")
lines(x, yc, lty=2)
legend("topright", c("normal", "Cauchy"), lty=1:2)
qqnorm(rcauchy(100, 10, 1))
```

---

20. No site <http://www.athenasc.com/prob-supp.html> você encontra exercícios SUPLEMENTARES de Bertsekas and Tsitsiklis. Considerando o arquivo relacionado ao capítulo 3, faça os seguintes exercícios: 2, 8, 9, 21(b).
- 

21. Obtenha os dados de fragmentos de vidro coletados pela polícia forense do livro *All of Statistics* no site: <http://www.stat.cmu.edu/~larry/all-of-statistics/index.html> Estime a densidade da primeira variável (refractive index) usando um histograma e um estimador de densidade baseado em kernel. Experimente com diferentes bins para o histograma e bandwidths para o kernel. Veja como fazer isto em R no endereço: <http://www.statmethods.net/graphs/density.html>.

O comando básico para a estimativa de kernel é da forma: `density(x, kernel = "gauss")` onde o kernel gaussiano é o escolhido. Outras opções incluem: "epanechnikov", "rectangular", "triangular", "biweight", "cosine", "optcosine". A escolha default do bandwidth é calculada com a seguinte fórmula (conhecida como a regra de bolo de Silverman):

$$h = 0.9 \min \left\{ \hat{\sigma}, \frac{R}{1.34} \right\} n^{-1/5}$$

onde  $R = q_{0.75} - q_{0.25}$  é a diferença entre o  $1^{\text{o}}$  e o  $3^{\text{o}}$  quartis e que pode ser calculado usando-se, por exemplo, o comando  $IQR(x)$ . Verifique qual o valor deste bandwidth  $h$  de Silverman e, a seguir, calcule a estimativa de kernel usando o dobro e a metade deste valor (isto é, usando  $2h$  e  $h/2$ ). Compare os resultados obtidos visualmente. Qual parece representar melhor a densidade  $f(x)$  dos dados?

---

22. Graças ao Bráulio Veloso (obrigado!), este exercício pede que você use o modelo Bag of Words para classificar alguns textos. O vocabulário foi construído com 12 livros de Ficção, Humor e Religião, com três livros em cada categoria. As stop-words foram eliminadas (as palavras muito comuns mas que não discriminam os textos tais como preposições e artigos).

Existem 4 arquivos. Um deles, `FreqTreinoNoStopWords.csv`, possui a frequência das bases de treino (foram usados 4 livros por categoria). Ele possui 4 campos. O primeiro campo é um string com a palavra. O dicionário está ordenado. As strings que são constituídas somente de números ficaram nas primeiras linhas do arquivo. As demais palavras estão mais abaixo no csv. Os outros 3 campos são as frequências das palavras em cada tipo de livro na seguinte ordem: livros de Ficção, Humor e Religião.

Os outros 3 arquivos são para teste, com um livro por categoria. A resposta correta das categorias das bases de treino é:

- `livroTeste0`: humor
- `livroTeste1`: religião
- `livroTeste2`: Ficção

Ignorando a resposta correta, você deve tentar classificar cada arquivo teste em uma das categorias possíveis usando as ideias discutidas em sala e presentes nos slides.

23. O comportamento de uma v.a. nas caudas de sua densidade  $f(x)$  é muito importante. Esta frase quer dizer que a forma com que a densidade  $f(x)$  decai a medida em que  $|x|$  cresce (vai para infinito) influencia muito o tipo de dado que será observado numa amostra. Para apreciar este fato, você vai comparar o comportamento nas caudas de duas distribuições de probabilidade: a gaussiana padrão, que tem densidade  $f_1(x) \propto \exp(-x^2/2)$ , e a distribuição  $t$ -Student com 2 graus de liberdade (df), com densidade  $f_2(x) \propto 1/(1+x^2/2)^{3/2}$ .

- Faça um gráfico com as sobreposições das duas densidades usando os comandos `dnorm` e `dt` (com o argumento `df=2`) no intervalo  $(-5, 5)$ . Compare o comportamento das duas densidades para  $x$  longe de zero. Veja que, visualmente, nenhuma parece ter tanta diferença entre as duas.
- Gere uma amostra com  $n = 500$  pontos de cada uma das duas distribuições e compare a dispersão dos pontos amostrais. Veja que elas são drasticamente diferentes

**Solução:** Código R e resultado na Figura ??.

```

x = seq(-5, 5, by=0.01)
f1 = dnorm(x)
f2 = dt(x, df=2)
set.seed(123)
s1 = rnorm(500)
s2 = rt(500, df=2)

par(mfrow=c(1,2))

```

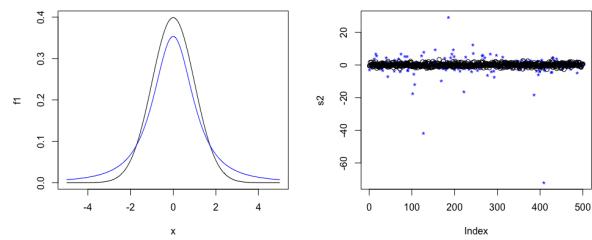


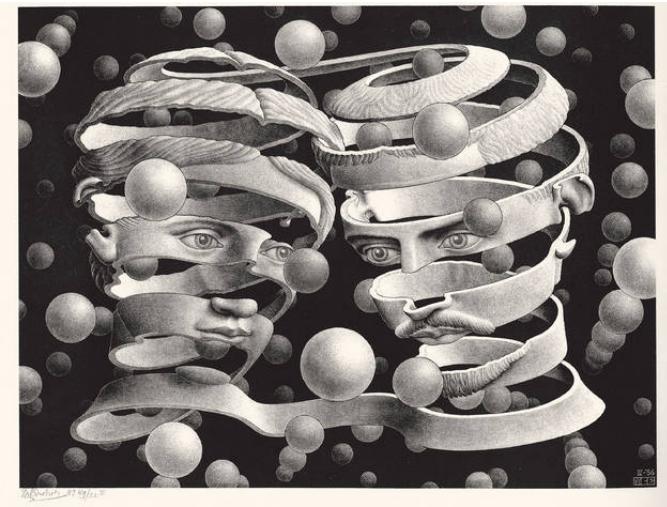
Figura 3.2: Comparando caudas das distribuições gaussiana padrão e *t*-Student com  $df = 2$  graus de liberdade.

```
plot(x, f1, type="l")
lines(x, f2, col="blue")
plot(s2, pch="*", col="blue")
points(s1)
```

**Solução:** Por aqui depois de resolver verbatim em solution.

## Capítulo 4

# Transformação de uma v.a.



1. Seja  $U \sim U(0, 1)$ . Mostre que  $W = a + (b - a)U \sim U(a, b)$ .

**Solução:** Claramente, se  $U \in [0, 1]$  então  $W \in [a, b]$ . Para  $w \in [a, b]$ , temos  $(w - a)/(b - a) \in [0, 1]$ . Segue-se que

$$\mathbb{P}(W \leq w) = \mathbb{P}(a + (b - a)U \leq w) = \mathbb{P}\left(U \leq \frac{w - a}{b - a}\right) = \frac{w - a}{b - a}$$

e a densidade de  $W$  é igual a  $f(w) = \mathbb{F}'(w) = 1/(b - a)$  para  $w \in [a, b]$ . Assim,  $W$  possui densidade constante em  $[a, b]$  e portanto possui distribuição uniforme neste intervalo.

- 
2. Seja  $U \sim U(0, 1)$ . Mostre que  $W = 1 - U \sim U(0, 1)$ .

**Solução:**  $W \in [0, 1]$  pois  $U \in [0, 1]$ . Além disso,

$$\mathbb{P}(W \leq w) = \mathbb{P}(1 - U \leq w) = \mathbb{P}(U \geq 1 - w) = 1 - (1 - w) = w .$$

Para  $w \in [0, 1]$ , a densidade de  $W$  é igual a  $f(w) = \mathbb{F}'(w) = 1$  e portanto  $W \sim U(0, 1)$ .

- 
3. Se  $U \sim U(0, 1)$ , encontre a distribuição de probabilidade de  $X = -\log(1 - U)/3$ .

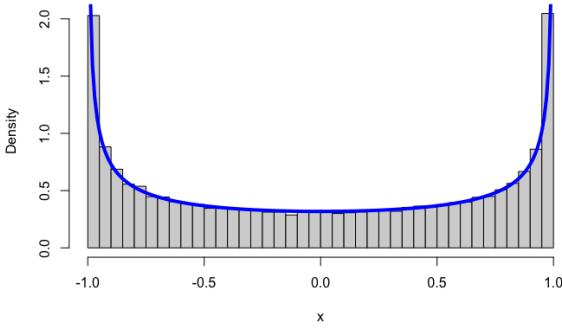


Figura 4.1: Gráfico do histograma de 50 mil valores de  $X = \cos(\theta)$  onde  $\theta \sim U(0, 2\pi)$ . A linha contínua representa a densidade de probabilidade da v.a.  $X$  e dada por  $f(x) = 1/(\pi\sqrt{1-x^2})$  para  $x \in (-1, 1)$ .

**Solução:** Se  $U \in [0, 1]$  teremos  $X \in [0, \infty)$ . Para  $x \in [0, \infty)$ , temos

$$\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{P}\left(-\frac{\log(1-U)}{3} \leq x\right) = \mathbb{P}(U \leq 1 - e^{-3x}) = 1 - e^{-3x}$$

Portanto, a densidade de  $X$  no eixo positivo é igual a

$$f(x) = \mathbb{F}'(x) = 3e^{-3x}$$

que é a densidade de uma v.a. com distribuição exponencial com parâmetro  $\lambda = 3$ .

4. Se  $\theta \sim U(0, 2\pi)$ , encontre a distribuição de probabilidade de  $X = \cos(\theta)$ .

**Solução:** Fazendo o desenho de um círculo, encontramos o seguinte: se  $x \in [0, 1)$ ,

$$\mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{P}(\cos(\theta) \leq x) = \mathbb{P}(\arccos(x) \leq \theta \leq 2\pi - \arccos(x)) = \frac{2\pi - 2\arccos(x)}{2\pi} = 1 - \frac{\arccos(x)}{\pi}$$

Se  $x \in (-1, 0)$ , temos

$$\mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{P}(\pi - \arccos(-x) \leq \theta \leq \pi + \arccos(-x)) = \frac{\arccos(-x)}{\pi}$$

Assim,

$$\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = \begin{cases} \arccos(-x)/\pi & \text{se } -1 < x < 0 \\ 1 - \arccos(x)/\pi & \text{se } 0 \leq x < 1 \end{cases}$$

e a densidade de  $X$  é a derivada dessa função acumulada. Lembrando da derivada do arco cosseno, temos

$$f(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \quad \text{para } -1 < x < 1.$$

Observe que esta densidade vai para mais infinito quando  $x$  se aproxima dos extremos do intervalo. A Figura 4.1 mostra um histograma de 50 mil valores de  $X = \cos(\theta)$  onde  $\theta \sim U(0, 2\pi)$ . A linha contínua representa a densidade de probabilidade  $f(x)$ . Veja que, apesar do ângulo  $\theta$  ser uniformemente distribuído em  $(0, 2\pi)$ , o cosseno do ângulo não é uniformemente distribuído em  $(-1, 1)$ . A densidade é concentrada em valores de cossenos próximos dos extremos -1 e 1.

```

theta = runif(50000, 0, 2*pi)
x = cos(theta)
hist(x, prob=T, breaks=50, main="")
xx = seq(-1,1,by=0.01)
yy = 1/(pi*sqrt(1-xx^2))
lines(xx, yy, lwd=4, col="blue")

```

---

5. Os primeiros 608 dígitos da expansão decimal do número  $\pi$  têm as seguintes frequências:

$k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Obs	60	62	67	68	64	56	62	44	58	67
Esp	??	??	??	??	??	??	??	??	??	??

Estes dados são compatíveis com a suposição de que cada dígito é escolhido de forma completamente aleatória? Isto é, os dígitos podem ser considerados como valores escolhidos de acordo com uma distribuição uniforme discreta sobre os elementos do conjunto  $\{0, 1, 2, \dots, 9\}$ ? Obtenha o valor esperado de cada dígito e compare com os valores observados usando o teste qui-quadrado.

---

6. O R possui uma função, `ks.test()`, que implementa o teste de Kolmogorov. Suponha que  $x$  é um vetor com  $n$  valores numéricos distintos. Então `ks.test(x, "pnorm", m, dp)` testa se  $x$  pode vir da distribuição  $N(m, dp)$ , uma normal (ou gaussiana) com média  $\mu = m$  e desvio-padrão  $\sigma = dp$ . Outras distribuições são possíveis substituindo o string "pnorm": as pré-definidas em R (veja com `?distributions`) ou qualquer outra para a qual você crie uma função que calcula a função distribuição acumulada teórica.

```

> ks.test(x, "pnorm")

One-sample Kolmogorov-Smirnov test

data: x
D = 0.0805, p-value = 0.876
alternative hypothesis: two-sided

```

A saída de `ks.test()` fornece o valor de  $D_n = \max_x |\hat{F}_n(x) - F(x)|$  e o seu p-valor. Dissemos em sala que se  $\sqrt{n}D_n > 1.36$ , rejeitamos o modelo. Caso contrário, não há muita evidência nos dados para rejeitar o modelo (não quer dizer que o modelo seja correto, apenas não conseguimos rejeitá-lo).

Gere alguns dados com  $n = 50$  de uma normal qualquer e use a função `ks.test()` para verificar se o teste rejeita o modelo. Faça o teste de dois modos: use o modelo correto que você usou para gerar seus dados e depois use um modelo diferente deste alterando, por exemplo, o valor de  $\mu$  ou  $\sigma$ .

---

7. Implemente em R uma função para calcular o resultado de um teste de Kolmogorov. A função estará restrita a testar apenas o modelo normal com média  $\mu = m$  e desvio-padrão  $\sigma = dp$  que devem ser fornecidas pelo usuário ou obtidas dos próprios dados (default) usando a média aritmética (comando `mean()`) e o desvio-padrão amostral (raiz da saída do comando `var()`). Não se preocupe em lidar com os casos extremos (usuário fornecer vetor nulo, fornecer vetor com valores repetidos, etc).

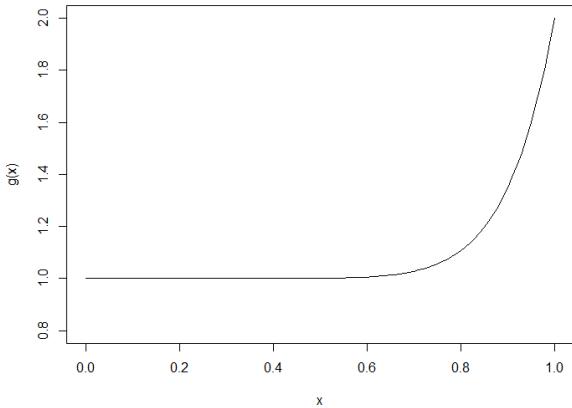


Figura 4.2: Gráfico da função  $h(x)$  usada para criar a v.a.  $Y = h(X)$  onde  $X \sim \text{Unif}(0, 1)$ .

Observação importante: pode-se provar que para encontrar  $D_n = \max_x |\hat{F}_n(x) - F(x)|$  basta varrer os pontos de salto de  $\hat{F}_n(x)$ , olhando o valor de  $\hat{F}_n(x)$  imediatamente antes de  $x_i$  ou no próprio ponto  $x_i$ , onde  $x_i$  é um dos valores do vetor de dados observados.

- 
8. Seja  $Y = h(X)$  onde  $X \sim \text{Unif}(0, 1)$ . A função  $h(x)$  é mostrada no gráfico da Figura 4.2. A partir dessa figura, é possível obter aproximadamente os valores da f.d.a.  $\mathbb{F}_Y(y)$  sem fazer nenhum cálculo explícito, apenas no olhômetro. Dentre as opções abaixo, decida qual o valor que melhor aproxima  $\mathbb{F}_Y(y)$ .
- $\mathbb{F}_Y(0.9)$  é aproximadamente igual a: (a) zero, (b) 0.01 (c) 0.5 (d) 0.8 (e) 0.95 (f) um.
  - $\mathbb{F}_Y(1.1)$  é aproximadamente igual a: (a) zero, (b) 0.01 (c) 0.5 (d) 0.8 (e) 0.95 (f) um.
  - $\mathbb{F}_Y(1.8)$  é aproximadamente igual a: (a) zero, (b) 0.01 (c) 0.5 (d) 0.8 (e) 0.95 (f) um.
  - $\mathbb{F}_Y(2.1)$  é aproximadamente igual a: (a) zero, (b) 0.01 (c) 0.5 (d) 0.8 (e) 0.95 (f) um.
- 
9. Transformação de v.a.'s: Seja  $X$  o lado de um quadrado aleatório. A v.a.  $X$  é selecionada de uma distribuição  $\text{Unif}(0, 1)$ . A área do quadrado formado com lado  $X$  é a v.a.  $Y = X^2$ .
- Calcule o comprimento esperado do lado do quadrado  $\mathbb{E}(X)$ .
  - Obtenha também a área esperada  $\mathbb{E}(Y)$ . É verdade que  $\mathbb{E}(Y) = (\mathbb{E}(X))^2$ ? Ou seja, a área esperada  $\mathbb{E}(Y)$  é igual à  $(\mathbb{E}(X))^2$ , a área de um quadrado cujo lado tem comprimento igual ao comprimento esperado?
  - Qual a distribuição de  $Y$ ? Isto é, obtenha  $F_Y(y)$  para  $y \in \mathbb{R}$ . item Derive  $F_Y(y)$  para obter a densidade  $f_Y(y)$  e faça seu gráfico. Qual a região onde mais massa de probabilidade é alocada? O que é mais provável, um quadrado com área menor que 0.1 ou maior que 0.9?
- 
10. Refaça o exercício anterior considerando o volume aleatório  $V = X^3$  do cubo aleatório formado com o lado  $X \sim \text{Unif}(0, 1)$ .
-

- 
11. Refaça o exercício anterior considerando o volume aleatório  $V = (4/3)\pi X^3$  da esfera aleatória formada com o raio  $X \sim \text{Unif}(0, 1)$ .

- 
12. Supondo  $X$  contínua com densidade  $f(x)$  e  $A$  um subconjunto da reta real. Complete os passos da dedução abaixo preenchendo os locais indicados por ??.

$$\mathbb{P}(X \in A) = \int_{??} f(x)dx = \int_{??} I_A(x)f(x)dx = \mathbb{E}(I_{??}(??))$$

**Solução:** O correto é

$$\mathbb{P}(X \in A) = \int_A f(x)dx = \int_{\mathbb{R}} I_A(x)f(x)dx = \mathbb{E}(I_A(X))$$

Preste atenção à notação: às vezes, usamos  $X$ ; às vezes,  $x$ . Isto é proposital e possui um significado diferente em cada caso:  $X$  é uma v.a. (portanto, tem duas listas de números associadas com as quais pode-se calcular probabilidades ou esperanças), enquanto  $x$  é apenas um ponto da reta.

---

13. Seja  $Y = h(X) = 1 + X^{10}$  onde  $X \sim U(0, 1)$ , uma uniforme no intervalo real  $(0, 1)$ . Isto é, a probabilidade de que  $X$  caia num intervalo  $(a, b)$  contido em  $(0, 1)$  é o comprimento  $b - a$  do intervalo. A Figura 4.2 mostra o gráfico desta transformação.

- Os valores possíveis de  $Y$  formam o intervalo  $(??, ??)$ . Complete os locais marcados com “??”.
  - Analisando a Figura 4.2 verifique aonde o intervalo  $(0, 0.8)$  no eixo  $x$  é levado pela transformação no eixo  $y = h(x)$ . Faça o mesmo com o intervalo de mesmo comprimento  $(0.8, 1)$ . Conclua:  $\mathbb{P}(Y \in (1.2, 2.0))$  é maior ou menor que  $\mathbb{P}(Y \in (0, 1.1))$ ?
  - Sejam os eventos  $B = [Y < ??]$  e  $A = [X < 1/\sqrt[10]{2}]$ , onde  $1/\sqrt[10]{2} \approx 0.933$ . Os eventos  $A$  e  $B$  devem ser tão iguais. Qual o valor de “??”?
  - Considerando a distribuição de  $Y$ , calcule  $F_Y(y) = \mathbb{P}(Y \leq y)$  para qualquer  $y \in \mathbb{R}$  mapeando o evento  $[Y \leq 1/2]$  e um evento equivalente  $[X \in S]$  e calculando  $\mathbb{P}(X \in S)$ .
  - Derive  $F_Y(y)$  para obter a densidade  $f(y)$  de  $Y$ . Esboce a densidade e com base no gráfico, sem fazer contas, responda: o que é maior,  $\mathbb{P}(Y < 1/2)$  ou  $\mathbb{P}(Y > 1/2)$ ?
- 

14. Considere a f.d.a.  $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$ . Quais afirmações abaixo são corretas?

- $\mathbb{F}(x)$  é uma função aleatória.
  - Se  $X$  é uma v.a. discreta então  $\mathbb{F}(x)$  possui saltos em todos os pontos onde  $X$  tem massa de probabilidade maior que zero.
  - $\mathbb{F}(x)$  mede a probabilidade de  $X$  ser menor que média.
  - $\mathbb{F}(x)$  é uma função determinística.
  - $\mathbb{F}(x)$  só pode ser calculada depois que uma amostra é obtida.
  - $\mathbb{F}(x)$  é a mesma função, qualquer que seja a amostra aleatória de  $X$ .
-

15. Exercício para verificar aprendizagem de notação: Seja  $X_1, X_2, \dots, X_n$  uma amostra de uma v.a. Considere a f.d.a. empírica

$$\hat{F}(x) = \frac{1}{n} \text{ no. elementos } leqx$$

Explique por que isto é equivalente a escrever

$$\hat{F}(x) = \frac{\sum_{i=1}^n I_{[X_i \leq x]}}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n I_{(-\infty, x]}(X_i)}{n}$$


---

16. Considere a f.d.a. empírica  $\hat{F}(x) = \sum_i I[X_i \leq x]/n$  baseada numa amostra aleatória de  $X$ . Quais afirmações abaixo são corretas?

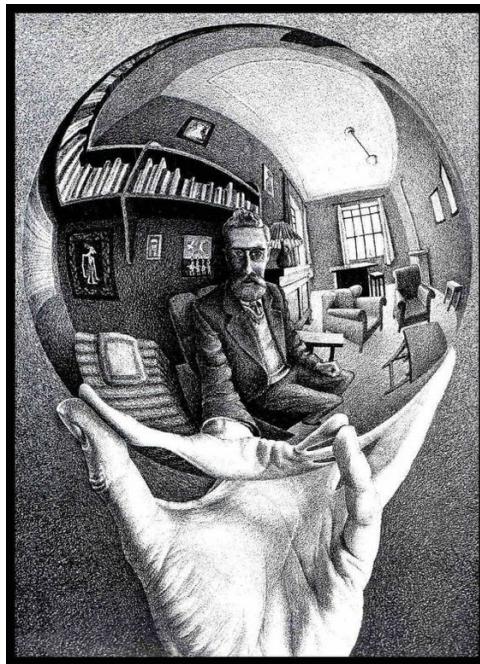
- $\hat{F}(x)$  é uma função aleatória.
  - Se  $X$  é uma v.a. discreta então  $\hat{F}(x)$  possui saltos em todos os pontos onde  $X$  tem massa de probabilidade maior que zero.
  - $\hat{F}(x)$  mede a probabilidade de  $X$  ser menor que média.
  - $\hat{F}(x)$  é uma função determinística.
  - $\hat{F}(x)$  só pode ser calculada depois que uma amostra é obtida.
  - $\hat{F}(x)$  é a mesma, qualquer que seja a amostra aleatória de  $X$ .
  - $F(x)$  é a mesma função, qualquer que seja a amostra aleatória de  $X$ .
- 

17. Em finanças, o valor presente (hoje) de um capital  $c$  a ser pago daqui a  $T$  anos é dado por  $V = c \exp(-\delta T)$  onde  $\delta$  é a taxa de juros anual. Um valor típico é  $\delta = 0.04$ , o que corresponde a 4% anuais de juros. Imagine que  $c$  é o capital a ser pago por uma apólice de seguros a um beneficiário quando um indivíduo falecer. Se  $T$  é o tempo de vida futuro (e aleatório) deste indivíduo,  $V = c \exp(-\delta T)$  representa o valor atual (presente, no instante da assinatura do contrato da apólice) deste capital futuro e incerto. Para especificar o seguro e estabelecer o prêmio a ser cobrado do segurado, a seguradora precisa calcular o valor esperado  $\mathbb{E}(V)$ . Supondo que  $T$  possui uma distribuição exponencial com parâmetro  $\lambda = 1/40$  (ou média igual a 40), obtenha  $\mathbb{E}(V)$ . OBS: a densidade de uma exponencial com parâmetro  $\lambda$  é dada por

$$f(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t < 0 \\ \lambda e^{-\lambda t}, & \text{se } t \geq 0 \end{cases}$$

# Capítulo 5

## Simulação Monte Carlo



1. Discutimos alguns métodos para geração de v.a.'s em sala tais como aceitação/rejeição e transformada inversa. Eles podem ser usados para gerar números aleatórios com quase qualquer distribuição. No entanto, para as distribuições mais importantes, existem técnicas específicas que são melhores do que estas técnicas mais gerais.

A distribuição normal (ou gaussiana) é uma das mais importantes em probabilidade por causa do Teorema Central do Limite. O método mais conhecido e mais usado para gerar gaussianas é o de Box-Mueller: gere duas v.a.'s  $X_1$  e  $X_2$  i.i.d. com distribuição uniforme em  $[0, 1]$ . Pode-se provar que

$$Y_1 = \sin(2\pi X_1) \sqrt{-2 \ln X_2}$$

e

$$Y_2 = \cos(2\pi X_1) \sqrt{-2 \ln X_2}$$

são gaussianas independentes com  $\mu = 0$  e  $\sigma = 1$ .

Aqui está um código em *R* para gerar `nsim` gaussianas independentes  $N(0, 1)$  (com média 0 e variância 1) com este método de Box-Mueller:

```
minharnorm = function(n) sqrt(rexp(n, 0.5)) * cos(runif(n, 0, 2 * pi))
```

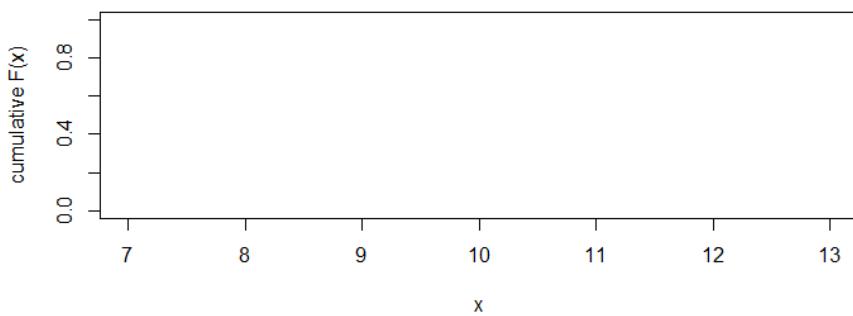
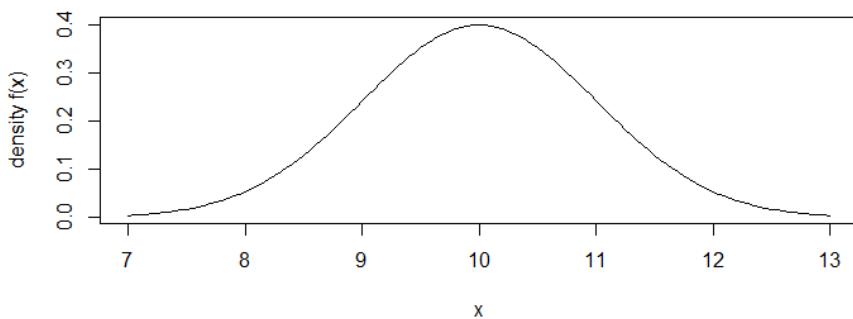


Figura 5.1: Top: A probability density function  $f(x)$ . Bottom: your turn: sketch the cumulative distribution function  $F(x)$  associated with the density  $f(x)$ . No need to

Estamos usando que, se  $X_2 \sim U(0, 1)$ , então  $-2 \log(X_2) \sim \exp(1/2)$ .

Gere 10 mil valores  $N(0, 1)$  com esta função e crie um histograma padronizado (com área 1, argumento `prob=T`). Compare o histograma dos dados simulados com a densidade gaussiana exata sobrepondo a densidade ao histograma (Crie uma grade e calcule `dnorm`; a seguir use `lines`). São parecidos?

2. Here's a fun exercise that will intuitively teach you how the inverse transform method works. Figure 5.1 shows on top a probability density function  $f(x)$ . Imagine what would be a histogram of values sampled from this density function. Let's check if the inverse transform method is able to generate random numbers following this distribution. Sketch freehand on the bottom graph the cumulative distribution function  $F(x)$  associated with that density. There is no need to go overboard with the drawing but try to match the horizontal scales in the top and bottom graphs.

Next, mentally sample some values in the  $(0, 1)$  interval in the vertical axis of the bottom graph. Try to sample following the uniform distribution  $U(0, 1)$ . Use the curve you sketched to obtain the inverse image in the horizontal axis of the points you sampled on the vertical  $(0, 1)$  interval. Do the inverted sampled points seem to come from the density  $f(x)$ ? For example, are they around where the density is centered (at  $x = 10$ )? Are they within the interval where the density is concentrated (the interval  $(7, 13)$ )?

3. Considere a densidade de probabilidade

$$f(x) = \frac{3}{2}\sqrt{x} \quad x \in [0, 1]$$

Escreva uma função em  $R$  para gerar v.a.'s com esta distribuição usando (a) o método da transformada inversa, e (b) um método de aceitação-rejeição usando a densidade uniforme para propor valores. Gere 10000 números com cada um dos dois métodos e mostre seus resultados num histograma. Quantos valores da  $U(0, 1)$  foram necessários gerar pelo método de aceitação-rejeição para obter os 1000 valores da densidade acima?

---

4. Seja  $U \sim U(0, 1)$ . Mostre que  $W = a + (b - a)U \sim U(a, b)$ . A partir desse resultado, como gerar números aleatórios seguindo uma distribuição uniforme no intervalo  $(a, b)$  sabendo-se gerar  $U \sim U(0, 1)$ , uma uniforme no intervalo  $(0, 1)$ ?
- 

5. Exercício com os dogs de Mosteller
- 

6. Exercício com random walk - binomial - Feller. Obter por simulacão a distribuição da proporção do tempo de liderança  $-\zeta$  arc sin  $(p)$
- 

7. Branching process por simulacão. Teorema de extinção de Galton-Watson.
- 

8. Genetic drift
- 

9. Numa companhia de seguros, a tarefa é simular a perda financeira agregada  $L$  que a companhia pode experimentar no próximo ano em um tipo de apólice. A perda é dada por  $L = X_1 + \dots + X_N$  onde  $N$  é o número aleatório de sinistros que irão ocorrer com os muitos segurados e  $X_i$  é a perda monetária associada com o  $i$ -ésimo sinistro.

Supondo que  $N \sim \text{Poisson}(1.7)$  e que os  $X_i$  são i.i.d. com distribuição  $\exp(1/10)$ , obtenha um valor simulado de  $L$  usando os seguintes valores i.i.d.  $U(0, 1)$ : 0.672 para obter o valor simulado  $N$ ; e o que for necessário da sequência 0.936, 0.984, 0.198, 0.659, 0.379 para obter os  $X_i$  e assim obter um valor para  $L$ . Repita o exercício obtendo um segundo valor simulado para  $L$  com a seguinte seqüência de valores i.i.d.  $U(0, 1)$ : 0.013, 0.834, 0.926, 0.648, 0.717, 0.169.

**Solução:** Os valores acumulados  $P(X \leq k)$  para  $k = 0, 1, 2, 3, 4$  de uma Poisson(1.7) são iguais a 0.183, 0.493, 0.757, 0.907, 0.970. Assim, para a primeira simulação, temos  $N = 2$  e  $L = X_1 + X_2$  onde  $X_1 = -10 \log(0.936) = 0.661$  e  $X_2 = -10 \log(0.984) = 0.161$ . Portanto, o valor simulado de  $L$  é  $L = 0.822$ . Na segunda simulação,  $N = 0$  e assim  $L = 0$ .  $\square$

---

10.  $X$  e  $Y$  são duas variáveis aleatórias contínuas com funções distribuições acumuladas distintas e iguais a  $F_1(x)$  e  $F_2(y)$ , respectivamente, com inversas  $F_1^{-1}(u)$  e  $F_2^{-1}(u)$ . Verifique se as afirmações abaixo são verdadeiras para duas distribuições genéricas  $F_1$  e  $F_2$  distintas:

- $F_1(X) \sim U(0, 1)$
- Se um valor  $X$  maior que a mediana de sua distribuição for observado, então o valor  $F_1(X)$  será maior que  $1/2$ .
- Se  $U > 0.5$  então  $F_1^{-1}(U) > F_1^{-1}(0.5)$ .
- $F_2^{-1}(F_1(X))$  tem a mesma distribuição que  $Y$ .
- $F_2(Y)$  e  $F_1(X)$  possuem a mesma distribuição.
- $F_2(X)$  e  $F_1(X)$  possuem a mesma distribuição (atenção: este item é *diferente* do anterior).
- $F_2^{-1}(U)$  e  $F_1^{-1}(U)$  são i.i.d.
- $F_2(Y)$  e  $F_1(X)$  são i.i.d.

**Solução:**

- Correto, demonstrado nestas notas de aula.
- A mediana é  $m = F_1^{-1}(0.5)$ . Como a função  $F_1$  é crescente então  $X > m$  implica que  $F_1(X) > F_1(m) = 0.5$
- Correto, similar ao item acima.
- Correto: Se  $U \sim U(0, 1)$  então  $F_2^{-1}(U) \sim Y$ . Como  $F_1(X) \sim U(0, 1)$ , segue o resultado.
- Correto:  $F_2(Y)$  e  $F_1(X)$  tem distribuição  $U(0, 1)$ .
- Incorreto: A variável aleatória  $F_2(X)$  não possui distribuição  $U(0, 1)$ , em geral. Para enxergar isto, esboce um gráfico de  $F_2$  supondo que ela refere-se a uma distribuição normal padrão e que  $X$  tem distribuição concentrada no intervalo  $(0, 2)$ . Então  $P(F_2(X) < 0.5) = 0$ .
- Incorreto:  $F_2^{-1}(U) \sim Y$  e  $F_1^{-1}(U) \sim X$  e  $X$  e  $Y$  possuem distribuições distintas.
- Incorreto: elas são i.d. pois ambas são  $U(0, 1)$  mas podem não ser independentes se  $X$  e  $Y$  forem correlacionadas. Intuitivamente, imagine que  $X$  e  $Y$  possuem correlação próxima de 1. Então  $F_2(Y) < 0.5$  se  $Y$  estiver abaixo da sua mediana. Neste caso, com alta probabilidade,  $X$  também estará abaixo de sua mediana e assim  $F_1(X)$  também será menor que 0.5.

□

11. Mostrar que razão de densidade de gama sobre Pareto, para quaisquer parâmetros, vai a zero se  $x$  vai a infinito. Isto mostra que Pareto tem caudas mais pesadas que a gama.

**Solução:** A razão das duas densidades, de uma gama com parâmetros  $\alpha > 0$  e  $\beta > 0$ , e uma Pareto com parâmetros  $a > 0$  e  $x_0 > 0$ , para  $x > x_0$ , é dada por

$$\frac{f_g(x)}{f_p(x)} = \frac{k_1 x^{\alpha-1} e^{-\beta x}}{k_2/x^{\alpha+1}} = k x^{\alpha+a} e^{-\beta x} \rightarrow 0$$

quando  $x \rightarrow \infty$  pois o decrescimento exponencial em  $e^{-\beta x}$  domina o crescimento polinomial em  $x^{\alpha+a}$ .

12. Seja  $c > x_0$  uma constante qualquer, possivelmente muito grande. Mostrar que, se  $X$  é Pareto, então  $P(X \leq c)/P(X > c)$  decresce para zero se  $\alpha$  decresce para zero. Assim, efeito de diminuir  $\alpha$  é aumentar a chance relativa de valores grandes (acima de  $c$ ).

**Solução:**

$$\frac{P(X \leq c)}{P(X > c)} = \left(\frac{c}{x_0}\right)^\alpha - 1$$

Como  $c/x_0 > 1$ , se  $\alpha \downarrow 0$  então a razão acima também decresce para zero. Assim, a cauda superior fica mais relativamente com mais massa de probabilidade (mais pesada) que a parte inferior da distribuição. Isto implica que valores maiores que  $c$  podem ter probabilidade de ocorrência bem alta bastando que  $\alpha$  seja suficientemente pequeno.  $\square$

---

13. Podemos usar simulação Monte Carlo para estimar integrais da forma

$$\mathcal{I} = \int_A g(x) dx$$

onde  $g$  é uma função qualquer e  $A$  é uma região do espaço euclidiano  $\mathbb{R}^k$ . Para fazer isto, considere um retângulo  $k$ -dimensional  $D$  que contenha  $A$  e com volume  $\text{vol}(D)$ . Seja  $X$  um vetor uniformemente distribuído no retângulo  $D$  (basta gerar uma v.a. uniforme para cada eixo coordenado do retângulo). Seja  $Y = g(X)$  se  $X \in A$  e  $Y = 0$ , caso contrário. Pode-se mostrar que

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbb{E}(g(X)) = \int_D g(x) \frac{1}{\text{vol}(D)} dx = \int_A g(x) \frac{1}{\text{vol}(D)} dx = \frac{1}{\text{vol}(D)} \mathcal{I}$$

Gere uma grande amostra  $X_1, X_2, \dots, X_n$  de v.a.'s i.i.d com a mesma distribuição que  $X$  e use a aproximação

$$\frac{\mathcal{I}}{\text{vol}(D)} = \mathbb{E}(Y) \approx \frac{1}{n} (Y_1 + \dots + Y_n)$$

Use esta técnica para estimar a integral dupla

$$\mathcal{I} = \iint_{\Omega} e^{-\sqrt{x^2+y^2}} dx dy$$

na região semicircular  $\Omega$  definida por

$$x^2 + y^2 \leq 1, \quad x \geq 0.$$

- 
14. Use simulação Monte Carlo para estimar o volume do elipsóide

$$x^2 + \frac{y^2}{4} + \frac{z^2}{16} \leq 1.$$

Você pode assumir que o elipsóide está contido no paralelepípedo  $[-1, 1] \times [-2, 2] \times [-4, 4]$ . O valor exato do volume é conhecido e é igual a  $32/3 \pi = 33.51$ .

**Solução:** Aqui vai:

```
# D = [-1,1] x [-2, 2] x [-4, 4]
volD = 2*4*8
set.seed(123)
x = runif(10000, -1, 1)
y = runif(10000, -2, 2)
z = runif(10000, -4, 4)
mean(x^2 + y^2/4 + z^2/16 <= 1) * volD
[1] 33.9072
```

- 
15. Use o método de transformada inversa para obter uma amostra Monte Carlo de uma distribuição  $\exp(\lambda)$  que possui densidade de probabilidade

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ \lambda \exp(-\lambda x), & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

Para isto, use a função de densidade acumulada:  $\mathbb{F}(x) = 1 - \exp(-\lambda x)$  se  $x > 0$ . Escolha você mesmo algum valor para  $\lambda$

**Solução:** Aqui vai, com  $\lambda = 5$  (portanto, com  $\mathbb{E}(X) = 1/5 = 0.2$ ):

```
lambda = 5
u = runif(10000)
x = - 1/lambda * log(1 - u)
hist(x)
```

---

16. Você já sabe gerar de uma exponencial com  $\lambda = 1$  e densidade  $g(x)$ . Suponha que você queira gerar números aleatórios de uma distribuição Gama com parâmetros  $\alpha = 3$  e  $\beta = 2$ . Isto é, você quer gerar números aleatórios com uma densidade

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ 4.0x^2 \exp(-2x), & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

Mostre que  $f(x)/g(x)$  atinge seu ponto de máximo em  $x = 2$ . Obtenha então o valor da constante  $c$  tal que  $f(x)/(cg(x)) \leq 1$  para todo  $x$  e use esta razão para encontrar  $c$  e fazer uma amostragem de  $f(x)$  por aceitação-rejeição ( $c = 2.44$  deve ser suficiente, nas minhas contas). Qual a porcentagem de valores gerados que foram rejeitados?

- 
17. Uma seguradora possui uma carteira com 50 mil apólices de seguro de vida. Não é possível prever quanto cada pessoa vai viver mas é possível prever o comportamento estatístico dessa massa de segurados. Atuários estudam este fenômeno e já identificaram uma distribuição excelente para o tempo de vida  $X$  de adultos: a distribuição de Gompertz que possui densidade de probabilidade  $f_X(x)$  dada por:

$$f(x) = Bc^x \exp\left(-\frac{B}{\log(c)}(c^x - 1)\right) = Bc^x S(x)$$

para  $x \geq 0$ , onde  $B > 0$  e  $c \geq 1$  são constantes positivas que alteram o formato da função densidade. Evidentemente,  $f(x) = 0$  para  $x < 0$  pois não existe tempo de vida negativo. A função de distribuição acumulada é igual a

$$\mathbb{F}_X(x) = 1 - e^{-\frac{B(c^x - 1)}{\log(c)}}$$

para  $x \geq 0$  e  $\mathbb{F}_X(x) = 0$  para  $x < 0$ . Usando dados recentes de uma seguradora brasileira, podemos tomar  $B = 1.02 \times 10^{-4}$  e  $c = 1.0855$ .

- Com os parâmetros  $B$  e  $c$  acima, desenhe a curva densidade de probabilidade (use valores  $x$  entre 0 e 100 anos).

- SEM FAZER NENHUMA conta, apenas olhando a curva que você gerou, responda:
  - $\mathbb{P}(X < 40)$  é aproximadamente igual a 0.03, 0.10, ou 0.20?
  - Deslize mentalmente um pequeno intervalo de um ano e considere todas as probabilidades do tipo  $\mathbb{P}(X \in [k, k+1])$  onde  $k$  é um natural. Qual a idade em que esta probabilidade é aproximadamente máxima: aos  $k = 60, 70$  ou  $80$  anos de idade?
  - O que é maior, a probabilidade de morrer com mais de 100 anos ou de morrer antes de completar 10 anos de idade?
- Inverta a função de distribuição acumulada, mostrando que

$$F^{-1}(u) = \log(1 - \log(c) \log(1 - u) / B) / \log(c)$$

onde  $u \in (0, 1)$ .

- Use o método da transformada inversa para gerar 50 mil valores independentes de  $X$ .
- Com estes números simulados, calcule aproximadamente  $\mathbb{P}(X > 80 | X > 50)$ . Isto é, calcule aproximadamente a chance de sobreviver pelo menos mais 30 anos dado que chegou a completar 50 anos de idade.
- A seguradora cobra um prêmio de 2 mil reais por uma apólice de seguro de vida que promete pagar 100 mil reais a um beneficiário no momento exato de morte do segurado. A apólice é vendida no momento em que os 50 mil indivíduos nasceram (alterar esta hipótese para que apenas adultos comprem a apólice dá trabalho e não muda o essencial do exercício). Ela coloca o dinheiro rendendo juros de 5% ao ano de forma que dentro de  $t$  anos os 2 mil reais terão se transformado em  $2 \times \exp(0.05t)$ . Se o indivíduo falecer muito cedo, ela terá uma perda financeira. Se ele sobreviver muito tempo, seu prêmio vai acumular juros suficiente para cobrir o pagamento do benefício.

Para a carteira de 50 mil vidas que você gerou, calcule aproximadamente a probabilidade de perda da seguradora usando simulação Monte Carlo.

18. Use Importance Sampling para estimar valores associados com  $X$ , uma v.a. com distribuição Gama com parâmetros  $\alpha = 3$  e  $\beta = 2$  e densidade:

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ 4.5x^2 \exp(-2x), & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

Use a distribuição exponencial com  $\lambda = 1$  para gerar suas amostras. Você sabe que para gerar  $W \sim \exp(1)$  basta tomar  $W = \log(U)$  onde  $U \sim U(0, 1)$ .

A esperança  $E(X)$  é conhecida analiticamente e é igual a  $E(X) = 1.5$ . Verifique se a média ponderada da sua amostra tem um valor próximo deste valor.

Use sua amostra para obter valores aproximados das seguintes quantidades que, neste caso simples, podem ser obtidas analiticamente (ou com métodos numéricos bem precisos):

- $DP(X) = \sqrt{\mathbb{V}(X)} = 0.75$  onde  $\mathbb{V}(X) = \mathbb{E}(X^2) - \mathbb{E}(X)^2$
- $\mathbb{P}(X > 4.3) = \mathbb{E}(I[X > 4.3]) = 0.0086$
- $\mathbb{E}(10e^{-X} I[2 < X < 3])$  (este número é o valor presente atuarial de um seguro de equipamento que paga 10 unidades se uma certa máquina falhar entre 2 e 3 anos de seu início). Isto é, este seguro cobre apenas falhas que ocorrem entre 2 e 3 anos de vida do equipamento.

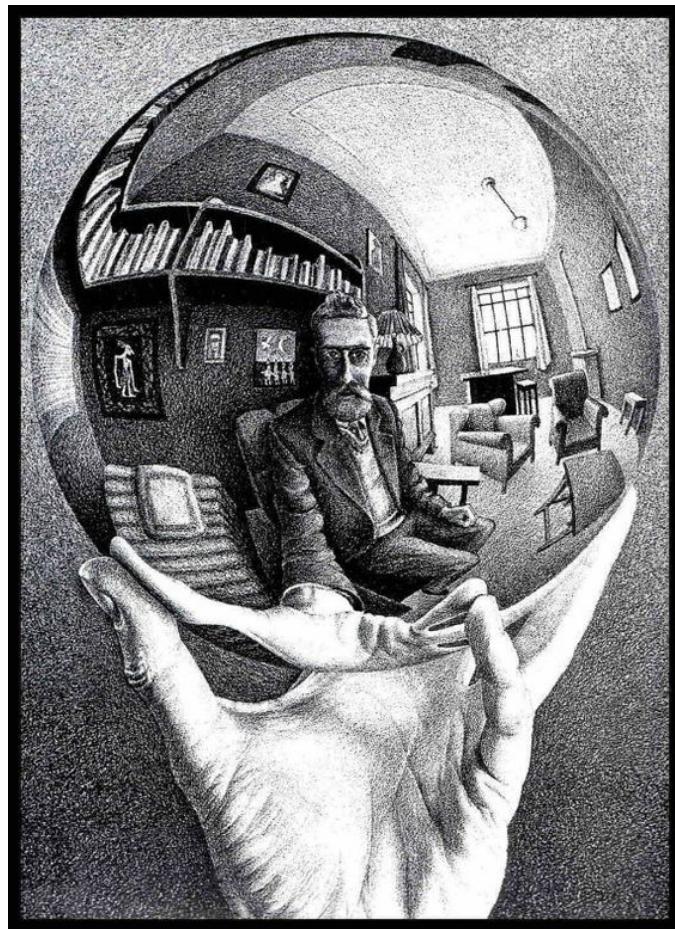
19. No problema anterior, imagine que você não sabe que a constante de normalização da densidade  $f(x)$  seja igual a 4.5. Use SIR (Sampling Importance Resampling) para obter uma amostra de  $f(x)$  e a seguir estime as mesmas quantidades do problema anterior.

---

20. No método de aceitação-rejeição queremos amostra de uma densidade-alvo  $f(x)$  mas usamos uma amostra retirada de uma densidade  $g(x)$  de onde sabemos gerar. Precisamos escolher uma constante  $M$  tal que  $f(x) \leq Mg(x)$  para todo  $x$ . Mostre que  $M \geq 1$ . DICA: integre dos dois lados da desigualdade.

# Capítulo 6

## Vetores Aleatórios



1. Considere a distribuição conjunta sobre três variáveis  $X, Y, Z$ , que assumem possíveis valores  $\{x_1, \dots, x_l\}$ ,  $\{y_1, \dots, y_m\}$  e  $\{z_1, \dots, z_n\}$ , respectivamente.
  - Em geral, quantos números são necessários para especificar a função de massa de probabilidade conjunta  $p(x, y, z) = \mathbb{P}(X = x, Y = y, Z = z)$ ?
  - Suponha que nos seja dada a tabela de valores para  $p(x_i, y_j, z_k)$ . Anote uma equação que especifique o distribuição marginal,  $p(z)$ , em função desta tabela.
  - Agora, suponha que queremos calcular a distribuição condicional  $p(z|x)$ . Descrever como calcular isso a partir de uma tabela com a probabilidade conjunta.
2. Considere as variáveis aleatórias  $X \in \{0, 1\}$  e  $Y \in \{-1, 0, 1\}$  com distribuição de probabilidade conjunta dada pela tabela abaixo:

X	Y		
	-1	0	1
0	0.2	0.4	0.2
1	0.0	0.1	0.1

- O que é  $\mathbb{P}(X = 1|Y = 1)$ ?
- Qual é a probabilidade de que  $Y \geq 0$ , dado que  $X = 0$ ?
- Encontre  $\mathbb{E}(Y)$
- Qual é o valor esperado de  $3X + 1$ ?
- $X$  e  $Y$  são independentes?
- Suponha que tenhamos outra variável aleatória  $Z$  que seja independente de  $Y$  e tenha probabilidades marginais  $\mathbb{P}(Z = 0) = 0.2$  e  $\mathbb{P}(Z = 1) = 0.8$ . Escreva a tabela para a distribuição de probabilidade conjunta do vetor  $(Y, Z)$ .

3. Consideramos um modelo probabilístico para um problema de diagnóstico de falhas. Uma variável binária  $C$  representa a integridade de uma unidade de disco num certo instante de tempo  $t$ :  $C_t = 0$  significa que ela está operando normalmente em  $t$  e  $C_t = 1$  significa que ela está em estado de falha. A unidade é monitorada continuamente usando um sensor de temperatura e um sensor de choque. Em cada instante  $t$ , são registradas duas características binárias,  $X_t$  e  $Y_t$ . Temos  $X_t = 1$  se o drive foi sujeito a choque (por exemplo, caiu), durante o período. E temos  $X_t = 0$ , caso contrário. Definimos  $Y_t = 1$  se a temperatura da unidade de disco esteve acima de 70 graus Celsius no período, e  $Y_t = 0$ , caso contrário. A tabela abaixo define a função de massa de probabilidade conjunta num instante  $t$  dessas três variáveis aleatórias:

$x$	$y$	$c$	$p_{XYC}(x, y, c)$
0	0	0	0.10
0	1	0	0.20
1	0	0	0.20
1	1	0	0.10
0	0	1	0.00
0	1	1	0.10
1	0	1	0.05
1	1	1	0.25

Forneça o valor numérico das probabilidades abaixo:

- Qual é a probabilidade  $\mathbb{P}(C = 1)$ ?
  - Qual é a probabilidade  $\mathbb{P}(C = 0|X = 1, Y = 0)$ ?
  - Qual é a probabilidade  $\mathbb{P}(X = 0, Y = 0)$ ?
  - Qual é a probabilidade  $\mathbb{P}(C = 0|X = 0)$ ?
  - São  $X$  e  $Y$  independentes? Justifique sua resposta.
  - $X$  e  $Y$  são condicionalmente independentes dado  $C$ ? Isto é, temos  $\mathbb{P}(X = x, Y = y|C = c) = \mathbb{P}(X = x|C = c)\mathbb{P}(Y = y|C = c)$ ?
4. Num jogo digital, mamonas assassinas movem-se na tela ao acaso (ver Figura 6.1). Cada mamona movimenta-se de acordo com um modelo probabilístico próprio para não tornar o jogo monótono.



Figura 6.1: Jogo digital com mamonas assassinas perseguinto usuário no chão da imagem.

O movimento de cada uma delas é muito simples: a cada instante  $t$  (em frações de segundo), ela movimenta-se de acordo com uma v.a.  $X_t \sim N(0, 1)$ . Ela movimenta-se na direção norte-sul com probabilidade  $\theta = 1/2$  ou na direção leste-oeste com probabilidade  $1 - \theta = 1/2$ . As direções e tamanhos das movimentações são independentes entre si em cada instante de tempo e em instantes sucessivos também. Qual é a distribuição de probabilidade aproximada da localização de uma mamona assassina num tempo  $t$  se ela partiu da origem  $(0, 0)$ ? Suponha agora que  $\theta > 1/2$  do forma que ela tenha uma tendência a preferir movimentar-se na direção vertical. O que muda no resultado anterior? E se  $X_t \sim N(0, \sigma^2)$ .

5. Num jogo digital, mamonas assassinas movem-se na tela ao acaso (ver Figura 6.1). Cada mamona movimenta-se de acordo com um modelo probabilístico próprio para não tornar o jogo monótono. O movimento de cada uma delas é muito simples: a cada instante  $t$  (em frações de segundo), ela movimenta-se de acordo com uma v.a.  $Z_t \sim N(1, 1)$  na direção norte-sul e de acordo com uma v.a.  $W_t \sim N(0, 1/16)$  na direção leste-oeste. As v.a.s  $Z_t$  e  $W_t$  são independentes entre si. Além disso,  $Z_1, Z_2, \dots$  são independentes bem como  $W_1, W_2, \dots$

- Simule o movimento de uma mamona assassina por 50 instantes de tempo. Repita a simulação algumas vezes para ter uma ideia do tipo de movimento que a mamona assassina faz. Quais as principais características qualitativas da sua movimentação?
- Dado que a manona assassina está numa posição  $(x, y)$  num certo instante de tempo, qual a distribuição de probabilidade de sua posição um, dois e três passos a frente?
- Dado que a mamona estava na posição  $(x, y)$  num certo instante, determine um retângulo  $R$  no plano que tenha eixos paralelos ao sistema de coordenadas e tal que, com probabilidade 95%, a mamona esteja dentro de  $R$
- Usando o teorema do limite central, qual é a distribuição de probabilidade aproximada da localização de uma mamona assassina se ela partiu da origem  $(0, 0)$ ?

6. Considere o conjunto de dados `iris` do R digitando os seguintes comandos:

```

iris
dim(iris)
names(iris)
plot(iris[,3], iris[,4])
plot(iris$Petal.Length, iris$Petal.Width, pch=21,
     bg=c("red", "green3", "blue")[unclass(iris$Species)])
setosa <- iris[iris$Species == "setosa", 1:4]

```

```
plot(setosa)
mean(setosa)
cov(setosa)
cor(setosa)
```

Os dados em `setosa` são uma amostra de exemplos do vetor aleatório  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3, X_4)$  para a espécie *setosa*.  $X_1$  é o Sepal Length,  $X_2$  é o Sepal Width,  $X_3$  é o Petal Length e  $X_4$  é o Petal Width. Assuma que a distribuição conjunta do vetor  $\mathbf{X}$  é uma normal multivariada de dimensão 4 com parâmetros  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4)$  e matriz de covariância  $\Sigma$  de dimensão  $4 \times 4$ . Use os resultados obtidos no R (e apenas DUAS casas decimais) para responder às seguintes questões:

- Forneça uma estimativa para o vetor  $\boldsymbol{\mu}$  e para a matriz  $\Sigma$ .
- A partir da matriz de correlações entre os pares de v.a.'s (e do plot de dispersão dos pontos), quais os grupos que são mais correlacionados?
- Obtenha a distribuição do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$ .
- Obtenha a distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$  quando são conhecidos os valores de  $(X_2, X_4)$ .
- Obtenha agora distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_2$ .
- Obtenha também distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_4$ .
- Comparando as três últimas respostas que você forneceu, qual das duas variáveis isoladamente,  $X_2$  ou  $X_4$ , diminui mais a incerteza acerca de  $X_3$ ? Isto é, se você tivesse de escolher apenas uma delas,  $X_2$  ou  $X_4$ , qual você iria preferir se seu objetivo fosse predizer o valor de  $X_3$ ? A resposta é a mesma se o objetivo for predizer  $X_1$ ?
- Considere a melhor preditora para  $X_3$  que você escolheu, dentre  $X_2$  ou  $X_4$ , na questão anterior. Digamos que tenha sido  $X_4$ . Avalie quanto conhecer a outra variável (neste caso,  $X_2$ ) reduz ADICIONALMENTE a incerteza acerca de  $X_3$ . Isto é, compare  $Var(X_3|X_4)$  com  $Var(X_3|X_2, X_4)$ .

7. Seja  $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2, Z_3)$  um vetor de variáveis i.i.d. (independentes e identicamente distribuídas)  $N(0, 1)$ . Isto é,  $\mathbf{Z}$  segue uma distribuição normal multivariada com valor esperado esperado  $(0, 0, 0)$  e matriz  $3 \times 3$  de covariância igual à identidade  $\mathbf{I}$ . Você aprendeu a gerar estas v.a.'s na lista anterior.

Queremos agora gerar um vetor aleatório  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$  seguindo uma normal multivariada com valor esperado  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3) = (10, 20, -50)$  e com matriz de covariância

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 4 & 9 & -14 \\ 9 & 30 & -44 \\ -14 & -44 & 94 \end{bmatrix}$$

Para isto, siga os seguintes passos em R (em matlab, use comandos similares):

- Encontre uma matriz  $L$  tal que  $\mathbf{L}\mathbf{L}^t = \boldsymbol{\Sigma}$ . Uma matriz com esta propriedade é aquela obtida pela decomposição de Cholesky de matrizes simétricas e definidas positivas. Em R, isto é obtido pelo comando `L = t(chol(Sigma))`.
- Gere  $\mathbf{z}$ , um vetor 3-dim com v.a.'s iid  $N(0, 1)$ .
- A seguir, faça

```
x = mu + L %*% z
```

Gere uma amostra de tamanho 2000 dos vetores  $x$  3-dim e armazene numa matriz `amostra` de dimensão  $2000 \times 3$ . A seguir, calcule a média aritmética dos 2000 valores de cada coordenada de  $x$  e compare com os três valores do vetor  $\mu$ . Eles devem ser parecidos.

Usando a amostra, estime os 9 valores da matriz de covariância  $\Sigma$ . Chame esta matriz estimada de  $S$ . Verifique que as estimativas são próximas dos valores verdadeiros que você usou para gerar seus dados. Por exemplo, estime o elemento  $\sigma_{12}$  da matriz  $\Sigma$  por

$$s_{12} = \frac{1}{2000} \sum_{i=1}^{2000} (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)$$

onde  $\bar{x}_1$  e  $\bar{x}_2$  são as médias aritméticas dos 2000 valores observados das v.a.'s 1 e 2. Os termos  $\sigma_{jj}$  da diagonal principal são estimados por

$$s_{jj} = \frac{1}{2000} \sum_{i=1}^{2000} (x_{ij} - \bar{x}_j)^2$$

O comando `cov(x)` calcula a matriz  $S$  diretamente (usando 1999 no denominador, ao invés de 2000). Procure calcular você os termos da matriz  $S$  para ter certeza de que você está entendendo o que estamos fazendo.

8. A matriz  $\Sigma$  é estimada a partir dos dados substituindo o operador teórico e probabilístico  $\mathbb{E}$  pela média aritmética dos números específicos da amostra. Assim,  $\sigma_{ij}$  é estimado por sua versão empírica  $s_{ij}$ . Qual a diferença entre  $\sigma_{ij}$  e  $s_{ij}$ ? Uma maneira de responder a isto é notar que  $s_{ij}$  vai ter um valor ligeiramente diferente cada vez que uma nova amostra for gerada, mesmo que a distribuição de probabilidade permaneça a mesma. Já  $\sigma_{ij}$  não vai mudar nunca, é fixo e determinado pela distribuição de probabilidade.

Seja  $\rho$  a matriz  $3 \times 3$  de correlação com elemento

$$\rho_{ij} = \text{Corr}(X_i, X_j) = \frac{\text{Cov}(X_i, X_j)}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}.$$

Observe que  $\rho_{ii} = 1$ . Esta matriz  $\rho$  é estimada pela matriz  $R$ , cujos elementos são obtidos a partir dos dados da amostra. Assim,  $\rho_{ij}$  é estimado por

$$r_{ij} = s_{ij} / \sqrt{s_{ii}s_{jj}}$$

Calcule as matrizes  $\rho$  e  $R$  e compare-as.

Este é um dos sentidos que empregamos à expressão *aprendizagem*: usamos os dados observados para aprender (ou inferir) sobre o mecanismo aleatório que gerou estes mesmos dados. Isto é, aprendemos sobre  $\mu$  e  $\Sigma$  através de  $(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$  e de  $S$ .

9. Usando a distribuição de  $\mathbf{X}$  do problema anterior, seja  $\mathbf{b}$  um vetor  $k$ -dimensional e  $\mathbf{C}$  uma matriz  $k \times 3$  formada por constantes. Uma das propriedades da normal multivariada é que a distribuição do vetor  $\mathbf{b} + \mathbf{C}\mathbf{X}$  de dimensão  $k$  é normal com vetor de médias  $\mathbf{b} + \mathbf{C}\mu$  e matriz de  $k \times k$  covariância  $\mathbf{C}\Sigma\mathbf{C}^t$ . Use esta propriedade para obter a distribuição das seguintes variáveis:

- Distribuição marginal de  $X_1$ , de  $X_2$  e de  $X_3$ .
- Distribuição de um indicador composto pelas 3 variáveis:  $T = 0.4X_1 + 0.3X_2 + 0.3X_3$ .
- Distribuição de um indicador composto pelas 3 variáveis normalizadas:  $T = 0.4(X_1 - 10)/2 + 0.3(X_2 - 20)/\sqrt{30} + 0.3(X_3 + 50)/\sqrt{94}$ .

- Distribuição conjunta de  $(X_1 - X_2, 4X_1 + 2X_2 - X_3)$ .
  - Distribuição conjunta de  $(X_1, aX_1 + bX_2 + cX_3)$ . onde  $a, b, c$  são constantes reais. Em particular, encontre a covariância entre  $X_1$  e o indicador  $Y = aX_1 + bX_2 + cX_3$  formado pela combinação linear de  $X_1$ ,  $X_2$  e  $X_3$ .
10. Considere um vetor  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$  com distribuição normal multivariada. É possível mostrar que, com probabilidade  $1 - \alpha$ , o vetor aleatório  $\mathbf{X}$  deve cair dentro da elipse  $D^2 = c$  onde  $c = \chi_p^2(\alpha)$  é o quantil  $(1 - \alpha)100\%$  de uma distribuição qui-quadrado com  $p$  graus de liberdade onde  $p$  é a dimensão do vetor  $\mathbf{X}$ . No caso particular de um vetor bidimensional, o valor de  $c$  associado com a probabilidade  $1 - \alpha = 0.95$  é igual a  $c = 9.21$  ou  $c \approx 9.2$ . Assim, se  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$  estiver fora dessa elipse (isto é, se  $D^2 > 9.2$ ), o ponto pode ser considerado um tanto anômalo ou extremo.
- O arquivo stiffness.txt contém dois tipos de medições da rigidez de pranchas de madeira, a primeira aplicando uma onda de choque através da prancha, e a segunda aplicando uma vibração à prancha. Estime o vetor  $\mu = (\mu_1, \mu_2)$  e a matriz  $\Sigma$  usando os dados da amostra e a seguir calcule o valor de  $D^2$  para cada ponto da amostra. Qual deles parece extremo? Olhando as duas variáveis INDIVIDUALMENTE seria possível detectar estes pontos extremos?
11. Considere um vetor  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$  com distribuição normal bivariada com vetor esperado  $\mu = (\mu_1, \mu_2)$  e matriz de covariância
- $$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} \\ \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} & \sigma_{22} \end{bmatrix}$$
- Usando o resultado dos slides, mostre que a distribuição condicional de  $(X_2|X_1 = x_1)$  é  $N(\mu_c, \sigma_c^2)$  onde
- $$\mu_c = \mu_2 + \rho\sqrt{\frac{\sigma_{22}}{\sigma_{11}}}(x_1 - \mu_1) = \mu_2 + \rho\sqrt{\sigma_{22}}\frac{x_1 - \mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}$$
- e
- $$\sigma_c^2 = \sigma_{22}(1 - \rho^2)$$
- A partir desses resultados, verifique se as afirmações abaixo são V ou F:
- Saber que o valor  $X_1 = x_1$  está dois desvios-padrão acima de seu valor esperado (isto é,  $(x_1 - \mu_1)/\sqrt{\sigma_{11}} = 2$ ) implica que devemos esperar que  $X_2$  também fique dois desvios-padrão acima de seu valor esperado.
  - Dado que  $X_1 = x_1$ , a variabilidade de  $X_2$  em torno de seu valor esperado é maior se  $x_1 < \mu_1$  do que se  $x_1 > \mu_1$ .
  - Conhecer o valor de  $X_1$  (e assim eliminar parte da incerteza existente) sempre diminui a incerteza da parte aleatória permanece desconhecida (isto é, compare a variabilidade de  $X_2$  condicionada e não-condicionada no valor de  $X_1$ ).
  - $\mu_c$  é uma função linear de  $x_1$ .
12. *Regressão linear e distribuição condicional:* Vamos considerar um modelo (na verdade, mais uma caricatura) de como a renda do trabalho  $Y$  de um indivíduo qualquer está associada com o número de anos de estudo  $X$  desse mesmo indivíduo. Vamos supor que, para um indivíduo com  $X = x$  anos de estudo teremos a renda  $Y$  como uma variável aleatória com distribuição normal com esperança  $\mathbb{E}(Y|X = x) = g(x) = 300 + 100 * x$  e variância  $\sigma^2 = 50^2$ . Responda V ou F às afirmações abaixo:
- Se  $X = 10$  para um indivíduo (isto é, se ele possui 10 anos de estudo), então a sua renda é uma variável aleatória com distribuição  $N(1300, 50^2)$ .
  - $\mathbb{E}(Y) = 300 + 100 * x$ .

- $\mathbb{E}(Y|X = x) = 300 + 100 * x$ .
- $\mathbb{V}(Y) = 50^2$ .
- $\mathbb{V}(Y|X = x) = 50^2$ .

13. Duas variáveis aleatórias contínuas com densidade conjunta  $f_{XY}(x, y)$  são *independentes* se, e somente se, a densidade conjunta é o produto das densidades marginais:

$$f_{XY}(x, y) = f_X(x)f_Y(y).$$

Mostre que  $X$  e  $Y$  são independentes se o vetor  $(X, Y)$  seguir uma distribuição uniforme num retângulo  $[a, b] \times [c, d]$  e densidade

$$f_{XY}(x, y) = \begin{cases} 1/A, & \text{se } (x, y) \in [a, b] \times [c, d] \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

onde  $A = (b - a)(d - c)$  é a área do retângulo. Para isto, obtenha as marginais  $f_X(x)$  e  $f_Y(y)$  e mostre que seu produto é igual à densidade conjunta. Verifique também que  $X$  e  $Y$  seguem distribuições uniformes. Assim, no método de aceitação-rejeição, podemos gerar facilmente dessa densidade uniforme: simplesmente gere  $X$  e  $Y$  independentemente com distribuições uniformes.

14. Gerar uma amostra aleatória com 300 instâncias do vetor aleatório  $(X, Y)$  com densidade

$$f(x, y) = \begin{cases} 0.1 (2 + \sin(2\pi x) + \sin(2\pi y)), & \text{se } (x, y) \in D \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

O suporte  $D$  é um polígono dentro do quadrado  $[0, 3] \times [0, 3]$  que pode ser visualizado com estes comandos:

```
poligx = c(1,1,0,1,2,3,2,2,1)
poligy = c(0,1,2,3,3,2,1,0,0)
plot(poligx, poligy, type="l")
```

Gere uma amostra com distribuição uniforme no quadrado, que tem densidade  $g(x, y) = 1/9$  no quadrado  $[0, 3]^2$ , e retenha cada ponto  $((x, y)$  gerado com probabilidade  $p(x, y) = f(x, y)/(Mg(x, y))$ . Verifique que podemos tomar  $M \geq 3.6$ . Vou usar  $M = 3.6$ .

Para visualizar a densidade conjunta  $f(x, y)$  na região maior do quadrado  $[0, 3] \times [0, 3]$ , dentro do qual está a região  $D$ , digite:

```
f <- function(x,y){ 0.1*(2+sin(2*pi*x)+sin(2*pi*y)) }
eixox = eixoy = seq(0,3,length=101)
z = outer(eixox, eixoy, f)
```

Observe que o suporte de  $g$  é maior que o de  $f$ . Teoricamente, isto não é problema: pontos gerados dentro quadrado mas fora do polígono  $D$  devem ser retidos com probabilidade  $p(x, y) = f(x, y)/(Mg(x, y)) = 0/(M/9) = 0$ . Isto é, eles devem ser rejeitados com probabilidade 1. Assim, antes mesmo de calcular  $p(x, y)$ , verifique se cada ponto está dentro de  $D$ : se não estiver, elimine-o. Se  $D$  tiver uma forma muito complicada (como a forma da Lagoa da Pampulha ou o contorno de Minas Gerais), você vai precisar de algoritmos geométricos sofisticados que fazem isto de forma eficiente. No nosso caso, a forma do polígono é muito simples. Complete o código abaixo para obter uma função que testa se  $(x, y) \in [0, 3]^2$  está dentro de  $D$  (ou proponha um código melhor que o meu):

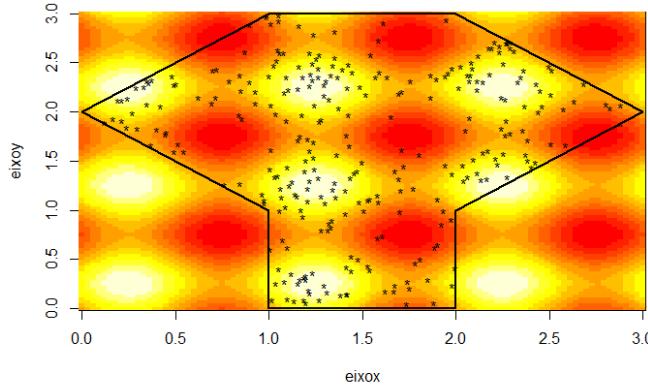


Figura 6.2: Amostra de  $f(x, y)$  junto com polígono  $D$ .

```

dentroD = function(x,y){
  dentro = F
  if(x >= 1 & x <= 2) dentro = T
  else{
    if((x > 2) & (y >= -1+x) & (y <= 5-x)) dentro = T
    else
      if( ??????
    }
  return(dentro)
}
  
```

A seguir, faça a amostragem de  $f(x, y)$ . Você poderá visualizar sua amostra, armazenada na matriz `mat`, junto com a densidade no polígono usando os seguintes comandos, que geram a Figura 6.2:

```

image(eixox, eixoy, z)
lines(poligx, poligy, lwd=2)
points(mat, pch="*")
  
```

Note como as áreas mais claras são aquelas que estão com maior densidade de pontos aleatórios enquanto as áreas mais vermelhas possuem densidade mais baixa.

15. A função `persp` nativa no R desenha gráficos de perspectiva de uma superfície sobre o plano x-y. Digite `demo(persp)` no console para ter uma ideia do que esta função pode fazer. A seguir, faça você mesmo os gráficos de quatro diferentes funções de densidade de probabilidade  $f(x, y)$  de um vetor aleatório bivariado  $(X, Y)$ .

- $f(x, y) = (2\pi)^{-1} \exp(-(x^2 + y^2)/2)$ , a densidade de uma gaussiana bivariada com variáveis independentes e marginais  $X \sim N(0, 1)$  e  $Y \sim N(0, 1)$ . A constante de integração é igual a  $1/(2\pi)$ . Faça a superfície considerando a região  $[-4, 4] \times [-4, 4]$  do plano  $(x, y)$ .
- $f(x, y) = (2\pi\sqrt{0.51})^{-1} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 - 1.4xy}{1.02}\right)$  em  $[-4, 4] \times [-4, 4]$ . Esta é a densidade de uma gaussiana bivariada de variáveis não-independentes, com correlação  $\rho = 0.7$ , e com marginais  $X \sim N(0, 1)$  e  $Y \sim N(0, 1)$ .
- $f(x, y) = |\sin(r)|/(44r)$  onde  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Faça a superfície considerando a região  $[-10, 10] \times [-10, 10]$  do plano  $(x, y)$  dividindo-a em uma grade  $30 \times 30$ .

- $f(x, y) = 0.5 \exp(-(x/3 + y + \sqrt{xy}/4))$  no retângulo  $[0, 6] \times [0, 3]$ .
- $f(x, y) = 0.5*g(x, y) + 0.5*h(x, y)$  em  $[-4, 4] \times [-4, 4]$  onde  $g(x, y) = (2\pi)^{-1} \exp(-(x^2 + y^2)/2)$  (como no item 1) e  $h(x, y) = 2\pi^{-1} \exp(-4(x-2)^2 - 4(y-2)^2)$

O script a seguir exemplifica como fazer o gráfico de uma densidade bivariada usando a primeira densidade da lista acima.

```

x = seq(-4, 4, by = 0.2)      # usando o parametro by
y = seq(-4, 4, length = 41) # usando o parametro length

# use outer:
z <- outer(x, y, FUN = function(x,y) exp(-(x^2 + y^2)/2) /(2*pi) )

# outer retorna uma matriz em que na posicao (i,j) temos o valor
# de FUN avaliado com x=x[i] e y=y[j]

# Faça o grafico 3-dim da superficie
persp(x, y, z)

# mudando alguns parametros de persp
persp(x, y, z, theta = 30, phi = 30, expand = 0.5, col = "lightblue")

# mais algumas mudancas
persp(x, y, z, theta = 30, phi = 30, expand = 0.5, col = "lightblue",
      ltheta = 120, shade = 0.75, ticktype = "detailed",
      xlab = "x", ylab = "y", zlab = "densidade f(x,y)")

#####
# Quando a função a ser passada como argumento de FUN for muito longa ou complexa
# basta defini-la separadamente e passar apenas o seu nome como argumento para FUN.
# Exemplo:

f <- function(x,y){
  exp(-(x^2 + y^2)/2) /(2*pi)
}

z <- outer(x, y, FUN=f)
persp(x, y, z)

#####
# Um procedimento alternativo usando a função mesh do R:
# crie um reticulado no plano (um grid)
M <- mesh(x, y)

# com a função "with", calcule uma função em cada ponto do grid retangular
# o valor de retorno eh uma matriz identica 'a z anterior.

z <- with (M, exp(-(x^2 + y^2)/2) /(2*pi))

```

```
persp(x, y, z)
```

16. Instale o pacote `plot3D`, criado por Karline Soetaert e baseado na função `persp()`. A vinheta (*vignette*, em inglês) do pacote `plot3d` mostra alguns gráficos muito bonitos. Carregue o pacote e digite os seguintes comandos no console: `exemplo(plot3D)`, `exemplo(Surf3D)` e `exemplo(scatter3D)` para ver exemplos. Além disso, tente este código abaixo para ver o belo histograma tri-dimensional da Figura 6.3. (script adaptado de <http://blog.revolutionanalytics.com/2014/02/3d-plots-in-r.html>).

O dataframe `quakes` fornece informações sobre 1000 terremotos com magnitude maior que 4.0 na escala Richter em torno da ilha Fiji na Oceania a partir de 1964. A longitude e latitude do epicentro desses 1000 eventos são as duas primeiras colunas do dataframe. Podemos ver a posição do epicentro como um vetor aleatório  $(X, Y)$  com certa densidade de probabilidade  $f(x, y)$ .

```
# veja alguma informacao sobre o dataframe
help("quakes")

dim(quakes) # verifique a dimensao do dataset

plot(quakes$long, quakes$lat) # scatterplot dos terremotos em lat-long
grid(20,20) # adiciona uma grade 30 x 30 ao plot

# o histograma tri-dim conta o numero de terremotos em cada celula
# do grid e levanta uma pilastra cuja altura e' proporcional a esta contagem
# Este histograma e' uma versao grosseira da densidade de probabilidade f(x,y)
# que gera os pontos aleatorios. Voce ja' consegue imaginar a densidade f(x,y)
# a partir do plot bi-dimensional imaginando alturas maiores nas areas com maior
# densidade de pontos

# agora, o histograma 3-dim
# Carregue o pacote plot3D
require(plot3D)

# particione os eixos x e y
lon <- seq(165.5, 188.5, length.out = 30)
lat <- seq(-38.5, -10, length.out = 30)

# conte o numero de terremotos em cada celula do grid
xy <- table(cut(quakes$long, lon), cut(quakes$lat, lat))

# veja o uso da funcao cut acima.
# aproveite para ler sobre ela pois e' muito util.

?cut

# obtenha o ponto medio em cada celula do grid nos eixos x e y
xmid <- 0.5*(lon[-1] + lon[-length(lon)])
ymid <- 0.5*(lat[-1] + lat[-length(lat)])
```

```

# passando argumentos para os parametros de controle da margem da janela grafica
par (mar = par("mar") + c(0, 0, 0, 2))

# O histograma 3D, na versao default. Cores ajudam a visualizar as alturas das barras
hist3D(x = xmid, y = ymid, z = xy)

# Mudando os parametros que controlam o angulo de visao e a posicao do observador
hist3D(x = xmid, y = ymid, z = xy, phi = 5, theta = 25)

# Tirando as cores, pondo rotulos nos eixos e titulo no grafico
hist3D(x = xmid, y = ymid, z = xy, phi = 5, theta = 25, col = "white", border = "black",
       main = "Earth quakes", ylab = "latitude", xlab = "longitude", zlab = "counts")

# Agora uma visao bem mais trabalhada: aumentando o eixo z para criar espaco para os pontos
hist3D(x = xmid, y = ymid, z = xy,
       ylim = c(-20, 40), main = "Earth quakes",
       ylab = "latitude", xlab = "longitude",
       zlab = "counts", bty= "g", phi = 5, theta = 25,
       shade = 0.2, col = "white", border = "black",
       d = 1, ticktype = "detailed")

# Acrescentando os pontos no grafico acima, agora uma visao realmente linda:
with (quakes, scatter3D(x = long, y = lat,
                        z = rep(-20, length.out = length(long)),
                        colvar = quakes$depth, col = gg.col(100),
                        add = TRUE, pch = 18, clab = c("depth", "m"),
                        colkey = list(length = 0.5, width = 0.5,
                                      dist = 0.05, cex.axis = 0.8, cex.clab = 0.8) ))

```

17. Seja  $f(x, y) = k(x + y + xy)$  uma densidade de probabilidade do vetor contínuo  $(X, Y)$  com suporte na região  $[0, 1] \times [0, 1]$ . O valor de  $k$  é uma constante de normalização que faz a integral ser igual a 1.

- Obtenha  $k$ .
- Faça o gráfico 3-dim da densidade conjunta.
- Obtenha a densidade marginal  $f_X(x)$  e faça seu gráfico. Avalie esta densidade marginal no ponto  $x = 0.2$  e em  $x = 0.5$ .
- Obtenha a densidade condicional  $f_{X|Y}(x|y)$  para  $x$  e  $y$  genéricos. Se  $y = 0.2$ , qual é a densidade condicional  $f_{X|Y}(x|y = 0.2)$ ? Repita com  $y = 0.9$ .

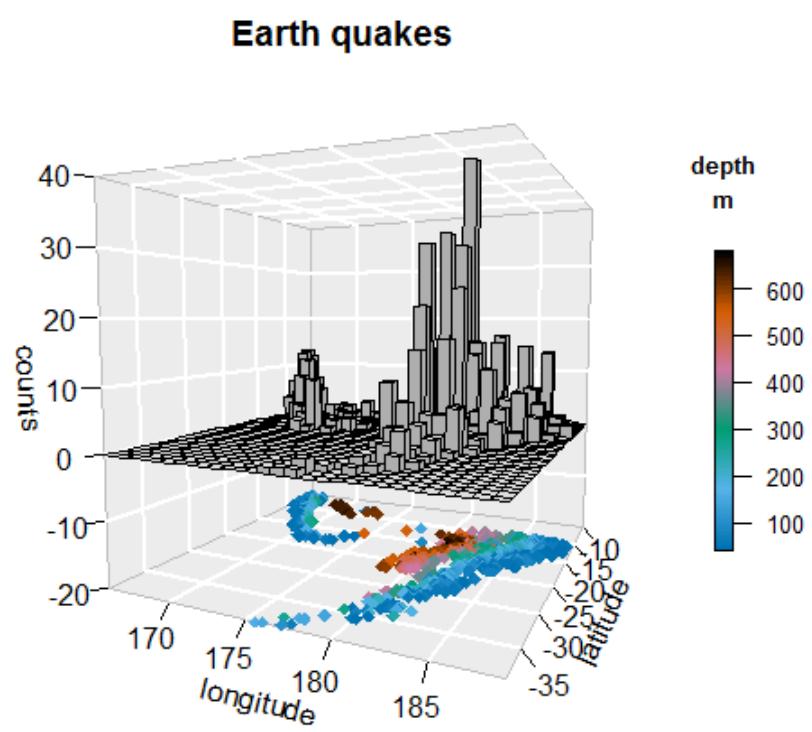


Figura 6.3: Epicentro de terremotos em Fiji com o histograma 3d.

## Capítulo 7

# Distribuição Gaussiana Multivariada



Estes exercícios exploram as distribuições marginais e condicionais associadas com uma normal multivariada. Lembre-se: se  $\mathbf{A}$  é uma matriz de constantes e  $\mathbf{Y}$  um vetor aleatório com  $\mathbb{E}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}$  e matriz de covariância  $\text{Cov}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}$ , então

$$\mathbb{E}(\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{A} \mathbb{E}(\mathbf{Y})$$

e

$$\text{Cov}(\mathbf{A}\mathbf{Y}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}' = \mathbf{A} \text{Cov}(\mathbf{Y}) \mathbf{A}'$$

1. Considere o conjunto de dados `iris` do R digitando os seguintes comandos:

```
iris
dim(iris)
names(iris)
plot(iris[,3], iris[,4])
plot(iris$Petal.Length, iris$Petal.Width, pch=21,
     bg=c("red","green3","blue")[unclass(iris$Species)])
setosa <- iris[iris$Species == "setosa", 1:4]
plot(setosa)
mean(setosa)
cov(setosa)
cor(setosa)
```

Os dados são uma amostra de exemplos do vetor aleatório  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3, X_4)$  onde  $X_1$  é o Sepal Length,  $X_2$  é o Sepal Width,  $X_3$  é o Petal Length e  $X_4$  é o Petal Width. Assuma que a distribuição conjunta do vetor  $\mathbf{X}$  é uma normal multivariada de dimensão 4 com parâmetros  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4)$  e matriz de covariância  $\Sigma$  de dimensão  $4 \times 4$ . Use os resultados obtidos no R (e apenas DUAS casas decimais) para responder às seguintes questões:

- Forneça uma estimativa para o vetor  $\boldsymbol{\mu}$  e para a matriz  $\Sigma$ .
- A partir da matriz de correlações entre os pares de v.a.'s (e do plot de dispersão dos pontos), quais os grupos que são mais correlacionados?
- Obtenha a distribuição do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$ .
- Obtenha a distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$  quando são conhecidos os valores de  $(X_2, X_4)$ .
- Obtenha agora distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_2$ .
- Obtenha também distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_3)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_4$ .
- Comparando as três últimas respostas que você forneceu, qual das duas variáveis isoladamente,  $X_2$  ou  $X_4$ , diminui mais a incerteza acerca de  $X_3$ ? Isto é, se você tivesse de escolher apenas uma delas,  $X_2$  ou  $X_4$ , qual você iria preferir se seu objetivo fosse predizer o valor de  $X_3$ ? A resposta é a mesma se o objetivo for predizer  $X_1$ ?
- Considere a melhor preditora para  $X_3$  que você escolheu, dentre  $X_2$  ou  $X_4$ , na questão anterior. Digamos que tenha sido  $X_4$ . Avalie quanto conhecer a outra variável (neste caso,  $X_2$ ) reduz ADICIONALMENTE a incerteza acerca de  $X_3$ . Isto é, compare  $Var(X_3|X_4)$  com  $Var(X_3|X_2, X_4)$ .

- 
2. Seja  $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2, Z_3)$  um vetor de variáveis i.i.d. (independentes e identicamente distribuídas)  $N(0, 1)$ . Isto é,  $\mathbf{Z}$  segue uma distribuição normal multivariada com valor esperado  $(0, 0, 0)$  e matriz  $3 \times 3$  de covariância igual à identidade  $\mathbf{I}$ . Você aprendeu a gerar estas v.a.'s na lista anterior.

Queremos agora gerar um vetor aleatório  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$  seguindo uma normal multivariada com valor esperado  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3) = (10, 20, -50)$  e com matriz de covariância

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 4 & 9 & -14 \\ 9 & 30 & -44 \\ -14 & -44 & 94 \end{bmatrix}$$

Para isto, siga os seguintes passos em R (em matlab, use comandos similares):

- Encontre uma matriz  $L$  tal que  $\mathbf{L}\mathbf{L}^t = \boldsymbol{\Sigma}$ . Uma matriz com esta propriedade é aquela obtida pela decomposição de Cholesky de matrizes simétricas e definidas positivas. Em R, isto é obtido pelo comando  $L = t(chol(Sigma))$ .
- Gere  $\mathbf{z}$ , um vetor 3-dim com v.a.'s iid  $N(0, 1)$ .
- A seguir, faça

`x = mu + L %*% z`

Gere uma amostra de tamanho 2000 dos vetores  $x$  3-dim e armazene numa matriz `amostra` de dimensão  $2000 \times 3$ . A seguir, calcule a média aritmética dos 2000 valores de cada coordenada de  $x$  e compare com os três valores do vetor  $\mu$ . Eles devem ser parecidos.

Usando a amostra, estime os 9 valores da matriz de covariância  $\Sigma$ . Chame esta matriz estimada de  $S$ . Verifique que as estimativas são próximas dos valores verdadeiros que você usou para gerar seus dados. Por exemplo, estime o elemento  $\sigma_{12}$  da matriz  $\Sigma$  por

$$s_{12} = \frac{1}{2000} \sum_{i=1}^{2000} (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)$$

onde  $\bar{x}_1$  e  $\bar{x}_2$  são as médias aritméticas dos 2000 valores observados das v.a.'s 1 e 2. Os termos  $\sigma_{jj}$  da diagonal principal são estimados por

$$s_{jj} = \frac{1}{2000} \sum_{i=1}^{2000} (x_{ij} - \bar{x}_j)^2$$

O comando `cov(x)` calcula a matriz  $S$  diretamente (usando 1999 no denominador, ao invés de 2000). Procure calcular você os termos da matriz  $S$  para ter certeza de que você está entendendo o que estamos fazendo.

---

3. (INCOMPLETO) A matriz  $\Sigma$  é estimada a partir dos dados substituindo o operador teórico e probabilístico  $\mathbb{E}$  pela média aritmética dos números específicos da amostra. Assim,  $\sigma_{ij}$  é estimado por sua versão empírica  $s_{ij}$ . Qual a diferença entre  $\sigma_{ij}$  e  $s_{ij}$ ? Uma maneira de responder a isto é notar que  $s_{ij}$  vai ter um valor ligeiramente diferente cada vez que uma nova amostra for gerada, mesmo que a distribuição de probabilidade permaneça a mesma. Já  $\sigma_{ij}$  não vai mudar nunca, é fixo e determinado pela distribuição de probabilidade.

Seja  $\rho$  a matriz  $3 \times 3$  de correlação com elemento

$$\rho_{ij} = \text{Corr}(X_i, X_j) = \frac{\text{Cov}(X_i, X_j)}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}.$$

Observe que  $\rho_{ii} = 1$ . Esta matriz  $\rho$  é estimada pela matriz  $R$ , cujos elementos são obtidos a partir dos dados da amostra. Assim,  $\rho_{ij}$  é estimado por

$$r_{ij} = s_{ij} / \sqrt{s_{ii}s_{jj}}$$

Gerando por Monte Carlo uma amostra de tamanho 200, calcule as matrizes  $R$  e  $\rho$  e compare-as. Repita gerando uma nova amostra de tamanho 200 e compare novamente as duas matrizes.

Este é um dos sentidos que empregamos à expressão *aprendizagem*: usamos os dados observados para aprender (ou inferir) sobre o mecanismo aleatório que gerou estes mesmos dados. Isto é, aprendemos sobre  $\mu$  e  $\Sigma$  através de  $(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$  e de  $S$ .

---

4. *Entendendo a variabilidade de  $R$ .* Você viu no exercício anterior que  $\rho \neq R$ . A matriz  $\rho$  não muda enquanto sua estimativa  $R$  depende da amostra instanciada da distribuição. Até onde  $R$  pode ir? Quão diferentes podem ser  $\rho$  e  $R$ ?

Simule a matriz de dados `amostra` de dimensão  $200 \times 3$  um grande número de vezes. Digamos, simule `amostra` 5000 vezes. Em cada uma dessas simulações de `amostra`, calcule a matriz de correlação empírica  $R$ . Faça um histograma dos 5000 valores obtidos para  $R_{ij}$ , um gráfico-histograma separado para cada par  $(i, j)$ .

Os valores de  $R_{ij}$  oscilam em torno do correspondente  $\rho_{ij}$ ? Qual o desvio-padrão aproximado de cada  $R_{ij}$ ? Pode obter este DP no olhômetro.

---

5. Seja  $\mathbf{X}' = (X_1, X_2, X_3, X_4)$  um vetor aleatório com vetor esperado  $\mathbb{E}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu} = (0, 1, 0, -1)'$  e matriz de covariância

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 9 & -2 \\ 2 & 0 & -2 & 4 \end{bmatrix}$$

Particione  $\mathbf{X}$  como

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{(1)} \\ \mathbf{X}^{(2)} \end{bmatrix}.$$

onde  $\mathbf{X}^{(1)}$  e  $\mathbf{X}^{(2)}$  possuem dimensão 2. Defina

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

e as combinações lineares  $\mathbf{AX}^{(1)}$  e  $\mathbf{BX}^{(2)}$ . Obtenha os seguintes elementos:

- A matriz de correlação  $\boldsymbol{\rho}$  de  $\mathbf{X}$ .
- $\mathbb{E}(\mathbf{X}^{(1)})$
- $\mathbb{E}(\mathbf{AX}^{(1)})$
- $\text{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})$
- $\text{Cov}(\mathbf{AX}^{(1)})$
- $\mathbb{E}(\mathbf{X}^{(2)})$
- $\mathbb{E}(\mathbf{BX}^{(2)})$
- $\text{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})$
- $\text{Cov}(\mathbf{BX}^{(2)})$

**Solução:** Seja  $\mathbf{V} = \text{diag}(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{44})$  a matriz diagonal  $4 \times 4$  formada pelas variâncias de cada uma das 4 variáveis de  $\mathbf{X}$ . Então a matriz de correlação  $\boldsymbol{\rho}$  de  $\mathbf{X}$  é dada por

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho} &= \mathbf{V}^{-1/2} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^{-1/2} \\ &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & & & \\ & 1 & & \\ & & 1/\sqrt{9} & \\ & & & 1/\sqrt{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 9 & -2 \\ 2 & 0 & -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & & & \\ & 1 & & \\ & & 1/\sqrt{9} & \\ & & & 1/\sqrt{4} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0.38 & 0.58 \\ 0 & 1 & 0.33 & 0 \\ 0.38 & 0.33 & 1.0 & -0.33 \\ 0.58 & 0 & -0.33 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Em R:

```
mat = matrix(c(3, 0, 2, 2, 0, 1, 1, 0, 2, 1, 9, -2, 2, 0, -2, 4), ncol=4)
round(diag(1/sqrt(diag(mat))) %*% (mat %*% diag(1/sqrt(diag(mat)))), 2)
```

- $\mathbb{E}(\mathbf{X}^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
- $\mathbb{E}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)}) = \mathbb{E}(X_1 - X_2) = 0 - 1 = -1$
- $\text{Cov}(\mathbf{X}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
- Observe que  $\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)} = X_1 - X_2$  é um escalar, uma variável aleatória, um vetor de dimensão 1. Portanto, a sua matriz de covariância é de dimensão  $1 \times 1$  contendo simplesmente a variância da v.a.:  $\text{Cov}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)}) = \text{Cov}(X_1 - X_2) = \mathbb{V}(X_1 - X_2)$ . Podemos obter esta variância com nossa fórmula geral para obter a matriz de covariância de uma transformação linear de um vetor aleatório:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)}) &= \mathbf{A}\text{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})\mathbf{A}' \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \\ &= 4 = \mathbb{V}(X_1 - X_2) \end{aligned}$$

- $\mathbb{E}(\mathbf{X}^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

- Temos

$$\mathbf{B}\mathbf{X}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_3 - X_4 \\ X_3 + 2X_4 \end{pmatrix}$$

e

$$\mathbb{E}(\mathbf{B}\mathbf{X}^{(2)}) = \mathbf{B}\mathbb{E}(\mathbf{X}^{(2)}) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mu_3 \\ \mu_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 - (-1) \\ 0 + 2(-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

- $\text{Cov}(\mathbf{X}^{(2)}) = \begin{bmatrix} 9 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}$

- Temos

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\mathbf{B}\mathbf{X}^{(2)}) &= \mathbf{B}\text{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})\mathbf{B}' \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 17 & -1 \\ -1 & 17 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

6. Seja  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)'$  um vetor aleatório com distribuição normal multivariada com  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)' = [-1, 0, 2]'$  e

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Obtenha a distribuição marginal de cada uma das v.a.'s

$$Y_1 = \frac{1}{4}X_1 - \frac{1}{4}X_2 + \frac{1}{2}X_3$$

e de

$$Y_2 = \frac{1}{4}X_1 + \frac{1}{4}X_2 - \frac{1}{2}X_3$$

Obtenha também a distribuição conjunta de  $Y_1, Y_2$ .

DICA: Escreva  $(Y_1, Y_2)$  como  $\mathbf{AX}$  onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz  $2 \times 3$  de constantes.

**Solução:**  $Y_1$  possui distribuição gaussiana. Se  $\mathbf{c}_1 = (1/4, -1/4, 1/2)'$  então o valor esperado é igual a

$$\mathbb{E}(Y_1) = \mathbb{E}(\mathbf{c}_1' \mathbf{X}) = \mathbf{c}_1' \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{4}\mu_1 - \frac{1}{4}\mu_2 + \frac{1}{2}\mu_3 = -1/4 + 0 + 2/2 = 3/4$$

e a variância é

$$\mathbb{V}(Y_1) = \mathbf{c}_1' \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{c}_1 = \begin{bmatrix} 1/4 & -1/4 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/4 \\ -1/4 \\ 1/2 \end{bmatrix} = 9/8$$

Similarmente, fazendo  $\mathbf{c}_2 = (1/4, 1/4, -1/2)'$ , encontramos  $Y_2 \sim N(-5/4, 5/8)$ .

O vetor  $(Y_1, Y_2)$  possui distribuição normal bivariada com quase todos os seus parâmetros já calculados. Falta apenas a correlação (ou covariância) entre  $Y_1$  e  $Y_2$ :

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} \sim N_2 \left( \begin{bmatrix} 3/4 \\ -5/4 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 7/8 & ?? \\ ?? & 5/8 \end{bmatrix} \right)$$

O valor faltante é obtido facilmente como o elemento 21 da matriz:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1' \\ \mathbf{c}_2' \end{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 & \mathbf{c}_2 \end{bmatrix}$$

que é igual a  $-3/4$ .

Outra opção mais simples é usar a propriedade da bilinearidade do operador covariância:

$$\text{Cov}\left(\sum_i a_i X_i, \sum_j b_j X_j\right) = \sum_{i,j} a_i b_j \text{Cov}(X_i, X_j) = \mathbf{a}' \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{b}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y_1, Y_2) &= \text{Cov}(X_1/4 - X_2/4 + X_3/2, X_1/4 + X_2/4 - X_3/2) \\ &= \mathbf{c}_1' \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{c}_2 \\ &= \begin{bmatrix} 1/4 & -1/4 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ -1/2 \end{bmatrix} \\ &= -3/4 \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} \sim N_2 \left( \begin{bmatrix} 3/4 \\ -5/4 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 7/8 & -3/4 \\ -3/4 & 5/8 \end{bmatrix} \right)$$

7. Seja  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)'$  um vetor aleatório com distribuição normal multivariada com  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)' = [-1, 0, 2]$  e

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Quais das seguintes variáveis aleatórias são independentes?

- $X_1$  e  $X_2$

- $X_2$  e  $X_3$
- $(X_1, X_2)$  e  $X_3$
- $(X_1 + X_2)/2$  e  $X_3$
- $X_2$  e  $X_2 + 5X_1/2 - X_3$

**Solução:** Numa normal multivariada  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_p)'$ , duas de suas variáveis aleatórias  $i$  e  $j$  são independentes se, e somente se, o elemento  $(i, j)$  da matriz de covariâncias (ou de correlações) é igual a zero. Para sub-vetores de  $\mathbf{Y}$  o mesmo resultado vale olhando-se para a matriz  $\Sigma$  particionada. Assim,

- $X_1$  e  $X_2$ : não são independentes
- $X_2$  e  $X_3$ : são independentes
- $(X_1, X_2)$  e  $X_3$ : são independentes pois o bloco formado por  $\Sigma_{1,3}$  e  $\Sigma_{2,3}$  é igual a zero.
- $(X_1 + X_2)/2$  e  $X_3$ : são independentes pois  $g(X_1, X_2) = (X_1 + X_2)/2$  é uma função apenas de  $X_1$  e  $X_2$ , que são independentes de  $X_3$ .
- $X_2$  e  $g(X_1, X_2, X_3) = X_2 + 5X_1/2 - X_3$ : são independentes. Usando a bilinearidade da covariância, calculamos

$$\text{Cov}(X_2, X_2 + 5X_1/2 - X_3) = \text{Cov}(X_2, X_2) + (5/2)\text{Cov}(X_2, X_1) - \text{Cov}(X_2, X_3) = 5 + (5/2)(-2) - 0 = 0$$


---

8. Leia os slides 165 e seguintes do material `Top09-NormalMult.pdf`. Eles apresentam o uso da distância aleatória de Mahalanobis para detecção de anomalias. A distância de Mahalanobis entre um ponto aleatório gaussiano  $\mathbf{X}$  em  $\mathbb{R}^p$  e o seu perfil esperado  $\mathbb{E}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu}$  é dada por

$$D^2 = (\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}).$$

onde  $\boldsymbol{\Sigma}$  é a matriz  $p \times p$  de covariância de  $\mathbf{X}$ . Lembre-se que a densidade da normal multivariada é baseada nesta medida de distância.

Como  $\mathbf{X}$  é um vetor aleatório gaussiano, a medida  $D^2$  é um número aleatório: possui uma faixa de valores possíveis e probabilidades associadas.

- A quantidade  $D^2$  tem um valor típico (ou valor esperado):  $\mathbb{E}(D^2) = ??$ .
- $D^2$  possui um afastamento típico de seu valor esperado, seu DP. O desvio-padrão de  $D^2$  é:  $\sqrt{\text{V}(D^2)} = ??$ .
- Mais que isto, não somente estes dois resumos da distribuição de  $D^2$  são conhecidos mas a própria distribuição de  $D^2$  é conhecida.  $D^2 \sim ??$ .
- Fixando uma constante  $c$  qualquer, o conjunto de pontos  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$  que satisfazem  $D^2 = c$  formam um elipsóide em  $p$  dimensões. Isto é, os pontos  $\mathbf{x}$  que estão a uma distância  $D^2$  igual a  $c$  do seu perfil esperado formam um elipsóide. Quais são os eixos deste elipsóide e os seus tamanhos relativos?
- É possível mostrar que, com probabilidade  $1 - \alpha$ , o vetor aleatório  $\mathbf{X}$  deve cair dentro da elipse  $D^2 = c$  onde  $c = \chi_p^2(\alpha)$  é o quantil  $(1 - \alpha)100\%$  de uma distribuição qui-quadrado com  $p$  graus de liberdade onde  $p$  é a dimensão do vetor  $\mathbf{X}$ . No caso particular de um vetor bidimensional, o valor de  $c$  associado com a probabilidade  $1 - \alpha = 0.95$  é igual a  $c = 9.21$ . Assim, se  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$  estiver fora dessa elipse (isto é, se  $D^2 > 9.21$ ), o ponto pode ser considerado um tanto anômalo ou extremo.

O arquivo stiffness.txt contém quatro tipos de medições da rigidez de pranchas de madeira. A primeira é obtida aplicando-se uma onda de choque através da prancha, a segunda aplicando-se uma vibração à prancha e as outras duas são obtidas por meio de testes estáticos. Assuma que cada as 4 medições em uma prancha são instâncias de um vetor  $N_4(\mu, \Sigma)$ . Estime o vetor  $\mu$  e a matriz  $4 \times 4 \Sigma$  usando os dados do amostra. A seguir, usando estes valores estimados como se fossem os verdadeiros valores de  $\mu$  e  $\Sigma$ , calcule o valor de  $D^2$  para cada ponto da amostra. Quais pontos parecem extremos? Olhando as variáveis INDIVIDUALMENTE ou em pares através de scatterplots seria possível detectar estes pontos extremos? Faça scatterplot dos dados para entender sua resposta.

**Solução:** É possível deduzir que, se  $\mathbf{X} \sim N_p(\mu, \Sigma)$ , então  $D^2$  segue uma distribuição qui-quadrado com  $p$  graus de liberdade. Isto permite obter  $\mathbb{E}(D^2) = p$  e também  $\mathbb{V}(D^2) = 2p$ . Os eixos do elipsóide estão na direção dos autovetores da matriz  $\Sigma$  e com tamanhos proporcionais à raiz quadrada de seus autovalores.

```

stiffness = matrix(scan("stiffness.txt"), ncol=5, byrow=T)
x = stiffness[,1:4]
mu = apply(x, 2, mean)
sigma = cov(x)

n = nrow(x)
desvio = x - matrix(mu, nrow=nrow(x), ncol=ncol(x), byrow=T)
d2meu = diag(desvio %*% (solve(sigma) %*% t(desvio)))
# comando acima calcula D2
# R possui um comando próprio (e mais eficiente) para isto: mahalanobis
d2 = mahalanobis(x, mu, sigma)

# verificando que meu comando ineficiente calculou a mesma coisa
plot(d2, d2meu)

# identificando as anomalias
anomalias = d2 > qchisq(0.95, 4)

x[anomalias,]
nanom = sum(anomalias)
# plotando e marcando em vermelho as anomalias
pairs(rbind(x, x[anomalias,]), pch="*", col=rep(c("black", "red"), c(n, nanom)))

```

Scatterplot das 4 variáveis com as anomalias marcadas em vermelho estão na Figura 7.1.

9. Considere os dados do data frame `iris` do R. Este é um famoso conjunto de dados na comunidade de aprendizagem de máquina. Ele foi analisado inicialmente por Ronald Fisher quando desenvolveu em 1936 a técnica de análise de componentes principais (PCA). Ele contém medições de 150 flores *iris*. Em cada flor, foram feitas quatro medidas: o comprimento e a largura das pétalas e das sépalas em centímetros. Além disso, cada uma das 150 flores pertence a uma de três espécies distintas: *Iris setosa*, *Iris virginica* e *Iris versicolor*. São 50 flores de cada espécie. Veja detalhes em [https://en.wikipedia.org/wiki/Iris\\_flower\\_data\\_set](https://en.wikipedia.org/wiki/Iris_flower_data_set).

Os seguintes comandos geram um primeira visão dos dados:

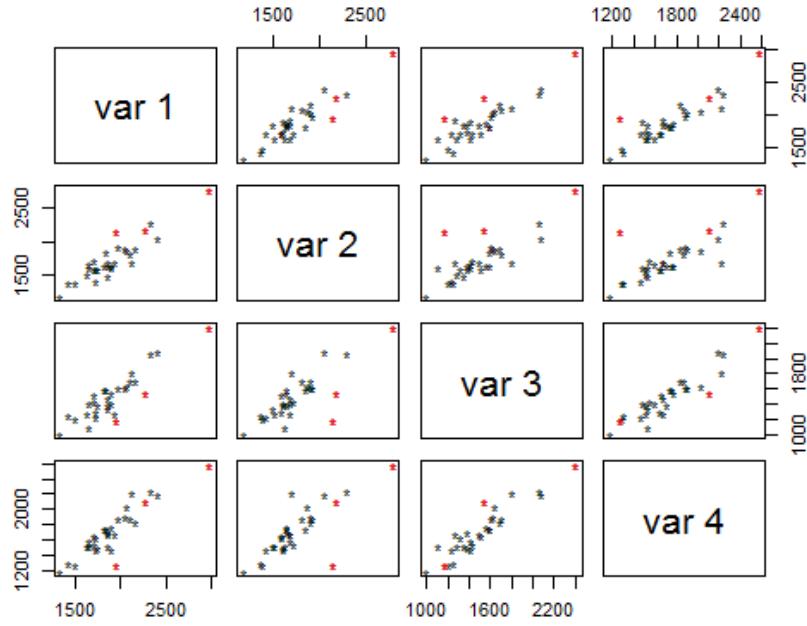


Figura 7.1: Scatterplot das variáveis de stiffness. Anomalias estão marcadas em vermelho.

```
head(iris) # 1as linhas do data frame iris
dim(iris) # dimensao do data frame
?iris      # help sobre o data frame
pairs(iris[,1:4]) # matriz de pares de scatterplots com as 150 flores
```

Notamos que em cada gráfico existem dois agrupamentos de dados. Provavelmente, estes agrupamentos correspondem a diferentes espécies de flores. Medidas de diferentes espécies costumam ter diferentes distribuições de probabilidade, com seus valores concentrados em diferentes intervalos. Para verificar esta afirmação, vamos colorir cada flor de acordo com sua espécie:

```
titulo = "Iris Data (red=setosa,green=versicolor,blue=virginica)"
pairs(iris[,1:4],main=titulo, pch=21, bg = iris$Species)
```

A espécie *virginica* é bem diferente das outras duas. Embora menos discrepantes, vemos claramente que cada uma dessas duas, *setosa* e *versicolor*, possuem medidas ocupando regiões diferentes em cada plot. Vamos analisar apenas uma das espécies, *setosa*, colocando os seus dados num novo data frame.

```
setosa <- iris[iris$Species == "setosa", 1:4]
pairs(setosa)      # plots de pares das 4 variaveis
apply(setosa, 2, mean) # media aritmetica de cada variavel
cov(setosa)        # estimativa da matriz de covariancia
cor(setosa)         # estimativa da matriz de correlacao
round(cor(setosa),2) # valores arredondados em duas casas decimais
```

Estes dados são uma amostra de 50 exemplos do vetor aleatório  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3, X_4)$  onde  $X_1$  é o comprimento da sépala,  $X_2$  é a largura da sépala,  $X_3$  é o comprimento da pétala e  $X_4$  é a

largura da pétala. Assuma que a distribuição conjunta do vetor  $\mathbf{X}$  é uma normal multivariada de dimensão 4 com parâmetros  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4)$  e matriz de covariância  $\Sigma$  de dimensão  $4 \times 4$ . Use os resultados obtidos no R como estimativas para os valores desconhecidos do vetor  $\boldsymbol{\mu}$  e da matriz de covariância  $\Sigma$  e da matriz de correlação  $\boldsymbol{\Sigma}$ . A seguir, responda às seguintes questões:

- Forneça uma estimativa para o vetor  $\boldsymbol{\mu}$  e para a matriz  $\Sigma$  e  $\rho$ .
- A partir da matriz de correlação entre os pares de v.a.'s (e do plot de dispersão dos pontos), quais as variáveis que são mais correlacionadas? E quais são menos correlacionadas?
- Obtenha a distribuição MARGINAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$ , o comprimento e largura da sépala.
- Obtenha a distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$  quando são conhecidos os valores  $x_3$  e  $x_4$  das v.a.'s ( $X_3, X_4$ ). Obtenha esta distribuição para dois valores genéricos  $x_3$  e  $x_4$ . A seguir use dois valores específicos:  $x_3 = 1.8$  e  $x_4 = 0.6$ , dois valores relativamente altos para estas variáveis. Compare  $DP_1 = \sqrt{\mathbb{V}(X_1)}$  com  $\sqrt{\mathbb{V}(X_1|X_3 = 1.8, X_4 = 0.6)}$ , o desvio padrão da variável  $X_1$  condicionada nos valores de  $X_3$  e  $X_4$ .
- Obtenha agora a distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_3$ .
- Obtenha também distribuição CONDICIONAL do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_4$ .
- Comparando as três últimas respostas que você forneceu, qual das duas variáveis isoladamente,  $X_3$  ou  $X_4$ , diminui a incerteza acerca de  $X_2$  mais fortemente? Isto é, se você tivesse de escolher apenas uma delas,  $X_3$  ou  $X_4$ , qual você iria preferir se seu objetivo fosse predizer o valor de  $X_2$ ?
- Considere a melhor preditora para  $X_2$  que você escolheu, dentre  $X_3$  ou  $X_4$ , na questão anterior. Digamos que tenha sido  $X_4$ . Avalie quanto conhecer a outra variável (neste caso,  $X_3$ ) reduz ADICIONALMENTE a incerteza acerca de  $X_3$ . Isto é, compare  $\mathbb{V}(X_2|X_4)$  com  $\mathbb{V}(X_2|X_3, X_4)$ .

**Solução:** Para o problema das flores *setosa*:

- Estimativas de  $\boldsymbol{\mu}$  e  $\Sigma$ :

```
> apply(setosa, 2, mean) # estimativa de mu
Sepal.Length  Sepal.Width  Petal.Length  Petal.Width
      5.006      3.428      1.462      0.246
> round(cov(setosa),3)          # estimativa de Sigma
                                Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length          0.124      0.099      0.016      0.010
Sepal.Width           0.099      0.144      0.012      0.009
Petal.Length          0.016      0.012      0.030      0.006
Petal.Width           0.010      0.009      0.006      0.011
```

- A partir da matriz de correlação `cor(setosa)`, o comprimento  $X_1$  e a largura  $X_2$  das sépalas são as variáveis mais correlacionadas:  $\rho_{12} = 0.74$ . A largura da sépala  $X_2$  e o comprimento da pétala  $X_3$  são as menos correlacionadas, com  $\rho_{23} = 0.18$ .
- A distribuição do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$ , o comprimento e largura da sépala, vem diretamente dos elementos 1 e 2 de  $\boldsymbol{\mu}$  e do bloco da matriz  $\Sigma$ :

$$\mathbf{X}^* = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \sim N_2(\boldsymbol{\mu}[1 : 2], \Sigma[1 : 2, 1 : 2]) = N_2 \left( \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix}, \begin{bmatrix} 0.124 & 0.099 \\ 0.099 & 0.144 \end{bmatrix} \right)$$

- A distribuição condicional de  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$  quando são conhecidos os valores  $(x_3, x_4)$  das v.a.'s  $(X_3, X_4)$ .

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \mid \begin{pmatrix} X_3 = x_3 \\ X_4 = x_4 \end{pmatrix} \sim N_2(\mathbf{m}, \mathbf{V})$$

onde, usando a notação das notas de aula,

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \begin{pmatrix} x_3 - \mu_3 \\ x_4 - \mu_4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0.016 & 0.010 \\ 0.012 & 0.009 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.030 & 0.006 \\ 0.006 & 0.011 \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} x_3 - 1.462 \\ x_4 - 0.246 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0.399 & 0.712 \\ 0.247 & 0.702 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_3 - 1.462 \\ x_4 - 0.246 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Para  $x_3 = 1.8$  e  $x_4 = 0.6$  temos

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.387 \\ 0.332 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.393 \\ 3.760 \end{pmatrix}$$

Quanto a matriz de covariância  $\mathbf{V}$  para a distribuição condicional, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21} \\ &= \begin{bmatrix} 0.124 & 0.099 \\ 0.099 & 0.144 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.016 & 0.010 \\ 0.012 & 0.009 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.030 & 0.006 \\ 0.006 & 0.011 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0.016 & 0.012 \\ 0.010 & 0.009 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.110 & 0.088 \\ 0.088 & 0.134 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Temos  $DP_1 = \sqrt{\mathbb{V}(X_1)} = \sqrt{0.124} = 0.352$  e  $\sqrt{\mathbb{V}(X_1|X_3 = 1.8, X_4 = 0.6)} = \sqrt{0.110} = 0.332$ .

- Queremos a distribuição condicional do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$  quando é conhecido apenas o valor de  $X_3 = 1.8$ . Neste caso, é como se a variável  $X_4$  não existisse: ela não está envolvida. Vamos obter a distribuição conjunta do vetor  $(X_1, X_2, X_3)$  e então usar a nossa fórmula de condicional da normal mutivariada. Para obter a distribuição marginal de  $(X_1, X_2, X_3)$ , basta olhar  $\boldsymbol{\mu}$  e  $\boldsymbol{\Sigma}$  e ignorar as entradas associadas com  $X_4$ .

Temos

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \sim N_3 \left( \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \right) = N_3 \left( \begin{bmatrix} 5.006 \\ 3.428 \\ 1.462 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0.124 & 0.099 & 0.016 \\ 0.099 & 0.144 & 0.012 \\ 0.016 & 0.012 & 0.030 \end{bmatrix} \right)$$

Dividindo este vetor em dois blocos, representados por letras em negrito e com indexação ligada aos blocos (e não às variáveis), podemos usar as fórmulas derivadas em sala de aula:

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \sim N_3 \left( \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \right) = \sim N_3 \left( \begin{bmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{bmatrix} \right)$$

Temos

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \mid X_3 = 1.8 \sim N_2(\mathbf{m}, \mathbf{V})$$

onde, usando a notação das notas de aula,

$$\begin{aligned}
\mathbf{m} &= \mathbf{m}_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{m}_2) \\
&= \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} [\sigma_{33}]^{-1} (1.8 - \mu_3) \\
&= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0.016 \\ 0.012 \end{bmatrix} [0.030]^{-1} (1.8 - 1.462) \\
&= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0.533 \\ 0.400 \end{bmatrix} (1.8 - 1.462) \\
&= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.180 \\ 0.135 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.186 \\ 3.563 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathbf{V} &= \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \\
&= \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} [\sigma_{33}]^{-1} \begin{bmatrix} \sigma_{31} & \sigma_{32} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0.124 & 0.099 \\ 0.099 & 0.144 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.016 \\ 0.012 \end{bmatrix} [0.030]^{-1} \begin{bmatrix} 0.016 & 0.012 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0.115 & 0.093 \\ 0.093 & 0.139 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

- A distribuição condicional do sub-vetor  $\mathbf{X}^* = (X_1, X_2)$  quando  $X_4 = 0.6$  é obtida de forma idêntica ao item anterior: Temos

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \mid X_4 = 0.6 \sim N_2(\mathbf{m}, \mathbf{V})$$

onde

$$\begin{aligned}
\mathbf{m} &= \mathbf{m}_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{m}_2) \\
&= \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_{14} \\ \sigma_{24} \end{bmatrix} [\sigma_{44}]^{-1} (0.6 - \mu_4) \\
&= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0.010 \\ 0.009 \end{bmatrix} [0.011]^{-1} (0.6 - 0.246) \\
&= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0.909 \\ 0.818 \end{bmatrix} (0.6 - 0.246) \\
&= \begin{pmatrix} 5.006 \\ 3.428 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.322 \\ 0.290 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.328 \\ 3.718 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathbf{V} &= \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \\
&= \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sigma_{14} \\ \sigma_{24} \end{bmatrix} [\sigma_{44}]^{-1} \begin{bmatrix} \sigma_{41} & \sigma_{42} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0.124 & 0.099 \\ 0.099 & 0.144 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.010 \\ 0.009 \end{bmatrix} [0.011]^{-1} \begin{bmatrix} 0.010 & 0.009 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0.115 & 0.091 \\ 0.091 & 0.136 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

- Temos  $\mathbb{V}(X_2|X_4 = 0.6) = 0.136 < 0.139 = \mathbb{V}(X_2|X_3 = 1.8)$ . Assim, saber que  $X_4 = 0.6$  leva a uma menor incerteza acerca do valor de  $X_2$  que aquela que resta quando  $X_3 = 1.8$ . Para predizer  $X_2$ , saber o valor de  $X_4$  é melhor que saber o valor de  $X_3$ . Observe que  $0.139 = \mathbb{V}(X_2|X_3 = 1.8) = \mathbb{V}(X_2|X_3 = x)$  para todo  $x$ , bem como  $0.136 = \mathbb{V}(X_2|X_4 = 0.6) = \mathbb{V}(X_2|X_4 = x)$  para todo  $x$ . Portanto, a conclusão sobre a maior redução da incerteza de  $X_2$  alcançada pelo conhecimento do valor de  $X_3$ , não depende dos valores específicos  $x_3 = 1.8$  e  $x_4 = 0.6$  usados no exercício. Teríamos a mesma conclusão com quaisquer dois valores para  $x_3$  e  $x_4$  pois as variâncias condicionais não variam com  $x_3$  e  $x_4$ .
- Entre  $X_3$  e  $X_4$ , a melhor preditora de  $X_2$  é  $X_4$ . Acrescentar o conhecimento sobre o valor de  $X_3$  ao conhecimento de que  $X_4 = 0.6$  reduz pouco a variabilidade (ou incerteza) acerca de  $X_2$ :

$$0.134 = \mathbb{V}(X_2|X_3 = 1.8, X_4 = 0.6) < \mathbb{V}(X_2|X_4 = 0.6) = 0.136 < \mathbb{V}(X_2) = 0.144$$


---

10. Seja  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)'$  um vetor aleatório com distribuição normal multivariada com  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)' = [-1, 0, 2]'$  e

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Seja  $\mathbf{b}$  um vetor  $k$ -dimensional e  $\mathbf{C}$  uma matriz  $k \times 3$  formada por constantes. Uma das propriedades da normal multivariada é que a distribuição do vetor  $\mathbf{b} + \mathbf{C}\mathbf{X}$  de dimensão  $k$  é normal com vetor de médias  $\mathbf{b} + \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}$  e matriz de  $k \times k$  covariância  $\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}^t$ . Use esta propriedade para obter a distribuição das seguintes variáveis:

- Distribuição marginal de  $X_1$ , de  $X_2$  e de  $X_3$ .
  - Distribuição de um indicador composto pelas 3 variáveis:  $T = 0.4X_1 + 0.3X_2 + 0.3X_3$ .
  - Distribuição de um indicador composto pelas 3 variáveis normalizadas:  $T = 0.4(X_1 - 10)/2 + 0.3(X_2 - 20)/\sqrt{30} + 0.3(X_3 + 50)/\sqrt{94}$ .
  - Distribuição conjunta de  $(X_1 - X_2, 4X_1 + 2X_2 - X_3)$ .
  - Distribuição conjunta de  $(X_1, aX_1 + bX_2 + cX_3)$ . onde  $a, b, c$  são constantes reais. Em particular, encontre a covariância entre  $X_1$  e o indicador  $Y = aX_1 + bX_2 + cX_3$  formado pela combinação linear de  $X_1$ ,  $X_2$  e  $X_3$ .
- 

11. Considere um vetor  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$  com distribuição normal multivariada. É possível mostrar que, com probabilidade  $1 - \alpha$ , o vetor aleatório  $\mathbf{X}$  deve cair dentro da elipse  $D^2 = c$  onde  $c = \chi_p^2(\alpha)$  é o quantil  $(1 - \alpha)100\%$  de uma distribuição qui-quadrado com  $p$  graus de liberdade onde  $p$  é a dimensão do vetor  $\mathbf{X}$ . No caso particular de um vetor bidimensional, o valor de  $c$  associado com a probabilidade  $1 - \alpha = 0.95$  é igual a  $c = 9.21$  ou  $c \approx 9.2$ . Assim, se  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$  estiver fora dessa elipse (isto é, se  $D^2 > 9.2$ ), o ponto pode ser considerado um tanto anômalo ou extremo.

O arquivo stiffness.txt contém dois tipos de medições da rigidez de pranchas de madeira, a primeira aplicando uma onda de choque através da prancha, e a segunda aplicando uma vibração à prancha. Estime o vetor  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2)$  e a matriz  $\boldsymbol{\Sigma}$  usando os dados da amostra e a seguir calcule o valor de  $D^2$  para cada ponto da amostra. Qual deles parece extremo? Olhando as duas variáveis INDIVIDUALMENTE seria possível detectar estes pontos extremos?

---

12. Considere um vetor  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$  com distribuição normal bivariada com vetor esperado  $\mu = (\mu_1, \mu_2)$  e matriz de covariância

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} \\ \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} & \sigma_{22} \end{bmatrix}$$

Use a propriedade geral que fornece a distribuição condicional em *vetores*  $k$ -dimensionais gaussianos para obter o caso especial em que temos vetores bi-dimensionais como neste exercício. Mostre que a distribuição condicional de  $(X_2|X_1 = x_1)$  é  $N(\mu_c, \sigma_c^2)$  onde

$$\mu_c = \mu_2 + \rho\sqrt{\frac{\sigma_{22}}{\sigma_{11}}}(x_1 - \mu_1) = \mu_2 + \rho\sqrt{\sigma_{22}}\frac{x_1 - \mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}$$

e

$$\sigma_c^2 = \sigma_{22}(1 - \rho^2)$$

A partir desses resultados, verifique se as afirmações abaixo são V ou F:

- Saber que o valor  $X_1 = x_1$  está dois desvios-padrão acima de seu valor esperado (isto é,  $(x_1 - \mu_1)/\sqrt{\sigma_{11}} = 2$ ) implica que devemos esperar que  $X_2$  também fique dois desvios-padrão acima de seu valor esperado.
- Dado que  $X_1 = x_1$ , a variabilidade de  $X_2$  em torno de seu valor esperado é maior se  $x_1 < \mu_1$  do que se  $x_1 > \mu_1$ .
- Conhecer o valor de  $X_1$  (e assim eliminar parte da incerteza existente) sempre diminui a incerteza da parte aleatória permanece desconhecida (isto é, compare a variabilidade de  $X_2$  condicionada e não-condicionada no valor de  $X_1$ ).
- $\mu_c$  é uma função linear de  $x_1$ .

**Solução:** Usando a fórmula matricial para a distribuição condicional no caso bivariado, temos  $(X_2|X_1 = x_1) \sim N(\mu_c, \sigma_c^2)$  onde

$$\begin{aligned} \mu_c &= \mu_2 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(x_1 - \mu_1) \\ &= \mu_2 + \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} (1/\sigma_{11}) (x_1 - \mu_1) \\ &= \mu_2 + \rho\sqrt{\sigma_{22}} \frac{x_1 - \mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_c^2 &= \Sigma_{22} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \\ &= \sigma_{22} - \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} (1/\sigma_{11}) \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} \\ &= \sigma_{22} - \rho^2\sigma_{22} \\ &= \sigma_{22}(1 - \rho^2) \end{aligned}$$

Quanto às afirmações:

- F: Se  $(x_1 - \mu_1)/\sqrt{\sigma_{11}} = 2$ , o valor de  $X_2$  vai oscilar em torno de seu valor esperado condicional que será  $\mu_c = \mu_2 + \rho 2\sqrt{\sigma_{22}}$ . Como  $|\rho| < 1$ , temos o incremento  $|\rho 2\sqrt{\sigma_{22}}| < 2\sqrt{\sigma_{22}}$ , ou seja, menor que 2 desvios-padrões.
- F: pois  $\mathbb{V}(X_2|X_1 = x) = \sigma_c^2 = \sigma_{22}(1 - \rho^2)$  não depende de  $x$ .
- V: pois  $\mathbb{V}(X_2|X_1 = x) = \sigma_{22}(1 - \rho^2) < \sigma_{22} = \mathbb{V}(X_2)$  já que  $\rho^2 < 1$ .
- V: pois

$$\mathbb{E}(X_2|X_1 = x_1) = \mu_c = \mu_2 + \rho\sqrt{\sigma_{22}} \frac{x_1 - \mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}} = a + b(x_1 - \mu_1),$$

uma função linear de  $x_1$ .

- 
13. Considerando o exercício anterior, mapeie a fórmula da distribuição condicional de um sub-vetor dados os valores do restante do vetor de uma normal multivariada pode ser interpretada de forma similar que no caso bivariado. (COMPLETAR AQUI)
- 
14. *Regressão linear e distribuição condicional:* Vamos considerar um modelo (na verdade, mais uma caricatura) de como a renda do trabalho  $Y$  de um indivíduo qualquer está associada com o número de anos de estudo  $X$  desse mesmo indivíduo. Vamos supor que, para um indivíduo com  $X = x$  anos de estudo teremos a renda  $Y$  como uma variável aleatória com distribuição normal com esperança  $\mathbb{E}(Y|X = x) = g(x) = 300 + 100 * x$  e variância  $\sigma^2 = 50^2$ . Responda V ou F às afirmações abaixo:
- Se  $X = 10$  para um indivíduo (isto é, se ele possui 10 anos de estudo), então a sua renda é uma variável aleatória com distribuição  $N(1300, 50^2)$ .
  - $\mathbb{E}(Y) = 300 + 100 * x$ .
  - $\mathbb{E}(Y|X = x) = 300 + 100 * x$ .
  - $\mathbb{V}(Y) = 50^2$ .
  - $\mathbb{V}(Y|X = x) = 50^2$ .



# Capítulo 8

## Modelos multivariados gaussianos



### 8.1 PCA: Componentes Principais

1. Este exercício é praticamente a mesma coisa que foi feito para o exemplo das faces (ver capítulo de PCA no livro-texto). Ele foi extraído da página web do livro *The Elements of Statistical Learning*, por Hastie, Tibshirani e Friedman. Este excelente livro está disponível para download gratuito e legal na página <http://statweb.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/>.

O objetivo é construir um algoritmo em R para a classificação de dígitos escritos à mão. Os dados são uma parte da base *US Postal Service Database* e correspondem à digitalização de números de CEP escritos à mão em correspondências enviadas pelo correio americano. Estes dados estão na página do livro, onde é chamado de **ZIP code** (é o último da lista de datasets).

O conjunto de dados refere-se a dados numéricos obtidos a partir da digitalização de dígitos escritos à mão a partir dos envelopes pelo Serviço Postal dos EUA. Imagens em preto e branco foram normalizadas em termos de seu tamanho de forma a caber em uma caixa de pixels  $20 \times 20$ , preservando a sua razão de aspecto (aspect ratio). As imagens resultantes contêm níveis de cinza como um resultado da técnica de anti-aliasing usada pelo algoritmo de normalização. As imagens foram centradas em uma imagem  $28 \times 28$  calculando o centro de massa dos pixels e traduzindo a imagem de modo a posicionar este ponto no centro da matriz  $28 \times 28$ . O resultado final são imagens  $28 \times 28$

$k$	precisão média	revocação média
5	??	??
6	??	??
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
20	??	??

Tabela 8.1: Precisão e revocação do método de classificação de dígitos como função do número  $k$  de autovetores.

em tons de cinza.

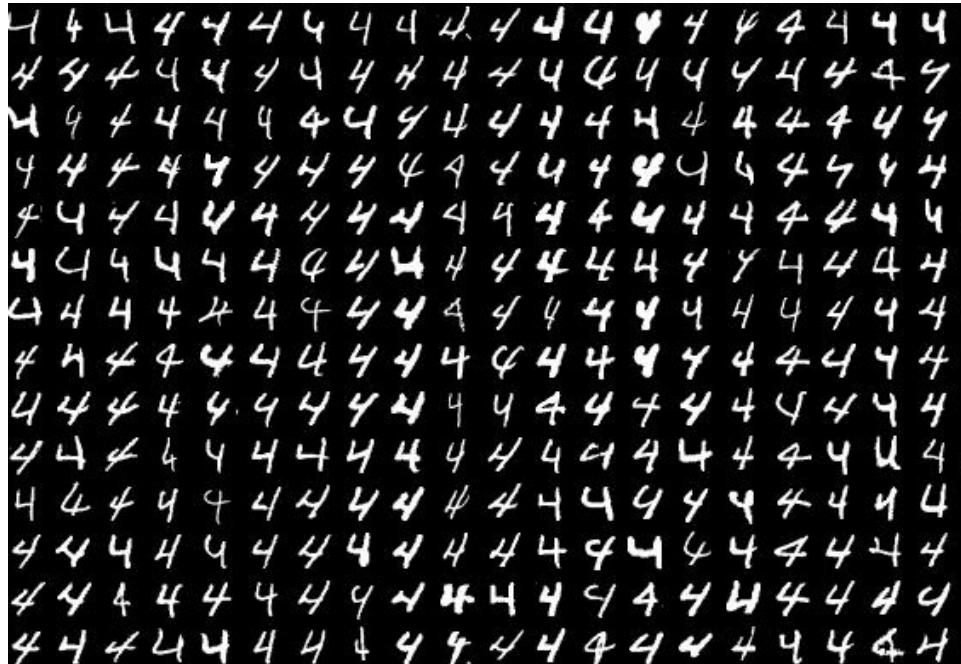


Figura 8.1: Imagens dos dígitos 4 da base USPS.

A Figura 8.1 mostra os dígitos 4 da base de dados. O objetivo do exercício é inteiramente análogo ao de reconhecimento de faces. Queremos um método de classificação de novas imagens de dígitos manuscritos. Assim, você deverá:

- Usando um conjunto de treinamento, criar uma regra de classificação de novas imagens de dígitos. Use os primeiros  $k$  autovetores da matriz de covariância entre os pixels para fazer esta regra de classificação. Você deve fazer seus cálculos com  $k = 5, 10, 15, 20$ .
- Usando apenas a amostra de TESTE, crie uma tabela de contingência  $10 \times 10$  de confusão  $C$ . Nesta matriz  $C$  as linhas representam a classe verdadeira do dígito (de 0 a 9) e a coluna a classe em que ele foi alocado. Na entrada  $C_{ij}$  você deve colocar o número de itens (ou imagens) que caíram naquela categoria cruzada. Crie esta tabela com os quatro valores distintos de  $k = 5, 10, 15, 20$ .
- Calcule a proporção total das imagens da amostra de teste que caem na diagonal principal. Esta é uma medida global de classificação correta do método. Para qual valor de  $k$  esta proporção foi máxima?
- Preencha uma tabela como a que está abaixo:

Precisão média é a média aritmética da precisão das 10 classes e definida como:

$$pm = \frac{1}{10} \sum_{i=0}^9 \frac{C_{ii}}{C_{i+}}$$

com  $C_{i+}$  sendo a soma da linha  $i$  na matriz de confusão. Revocação média é a média aritmética da revocação das 10 classes e definida como:

$$rm = \frac{1}{10} \sum_{i=0}^9 \frac{C_{ii}}{C_{+i}}$$

com  $C_{+i}$  sendo a soma da coluna  $i$  na matriz de confusão. Mais detalhes sobre precisão (precision) e revocação (recall) podem ser vistos no verbete *Precision and recall* na wikipedia. Ver também <http://www.text-analytics101.com/2014/10/computing-precision-and-recall-for.html>.

---

2. Neste exercício, você vai gerar alguns vetores gaussianos tri-dimensionais que, de fato vivem em duas dimensões.

```
require(MASS)
nsims=200
Sigma = matrix(c(3,2,2,4),2,2)
pts = mvrnorm(nsims, c(1, 2), Sigma)

pts = cbind(pts, 3*pts[,1]+4*pts[,2])
pairs(pts)

library(scatterplot3d)
scatterplot3d(pts)

library(rgl)
plot3d(pts, col="red", size=3)

A = matrix(c(1, 0, 0, 1, 3, 4), 3, 2, byrow=T)
var pts = A %*% Sigma %*% t(A)
var pts

round(cov(pts),2)

eigen(var pts)
eigen(cov(pts))
```

- Quais os parâmetros  $\mu$  e  $\Sigma$  da distribuição gaussiana do vetor `pts`?
- Por que o comando `round(cov(pts),2)` não gera exatamente  $\Sigma$  (ignore o erro de aproximação puramente numérico, não estocástico).
- Qual o menor autovalor de  $\Sigma$ ?

Agora, um conjunto de dados simulado que está quase completamente contido num plano do  $\mathbb{R}^3$ .

```

x <- rnorm(1000)
y <- rnorm(1000)
z <- 3 + 1.2*x - 1.2*y + rnorm(1000, sd=0.3)
d2 <- data.frame(x,y,z)
open3d()
plot3d(d2)

```

Isto mostra que não precisamos realmente de 3 dimensões. Esta massa de pontos vive praticamente num espaço de dimensão 2. Este espaço de dimensão 2 é aquele gerado pelas 2 primeiras componentes principais.

Agora, um exemplo com dados reais:

```

?trees  # girth = circunferencia
pairs(trees)

x= log(trees)
pairs(x)
scatterplot3d(x)
plot3d(x, col="red", size=3)
eigen(cov(x))

```

**Solução:** O vetor  $(X_1, X_2)$  possui distribuição normal bivariada com vetor esperado  $\mu = (1, 2)$  e matriz de covariância

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

O vetor  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$  possui distribuição normal multivariada de dimensão 3 com vetor esperado

$$\mathbb{E}(\mathbf{X}) = \mathbb{E}\left(\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix}\right) = \mathbf{A}\mathbb{E}\left(\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 11 \end{bmatrix}$$

e matriz de covariância dada por

$$\mathbf{A}\Sigma\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 17 \\ 2 & 4 & 22 \\ 17 & 22 & 139 \end{bmatrix} =$$

O objeto `cov(pts)` contém a matriz  $\mathbf{A}\Sigma\mathbf{A}'$ . O objeto `var.pts` contém uma estimativa empírica desta matriz, uma estimativa baseada nas 200 instâncias de dados que você gerou. Para a amostra de tamanho `nsims`, estas duas matrizes são similares.

O comando `round(cov(pts), 2)` calcula a estimativa empírica da matriz `var.pts = AΣA'`. Esta última matriz é fixa. A estimativa `cov(pts)` varia de amostra para amostra. Se `nsims` não for muito pequeno, `cov(pts)` e  $\mathbf{A}\Sigma\mathbf{A}'$  devem ser parecidas, como é o caso neste exercício.

Com a amostra gerada por mim, obtive `min(eigen(var.pts)$values)` igual a  $9.841374 \times 10^{-15}$  e `min(eigen(cov(pts))$values)` igual a  $6.915267 \times 10^{-15}$ . Os valores são próximos, ambos próximos de zero. O menor autovalor de `cov.pts` é exatamente zero, e isto pode ser verificado se tentamos fazer uma decomposição de Cholesky:

```

> chol(var.pts)
Error in chol.default(var.pts) :
  the leading minor of order 3 is not positive definite

```

O algoritmo implementado em *R* para obter os autovalores de *var.pts* obtém apenas uma aproximação numérica para os reais autovalores e autovetores. De acordo com a página de help da função *eigen*, temos: Computing the eigendecomposition of a matrix is subject to errors on a real-world computer: the definitive analysis is Wilkinson (1965). All you can hope for is a solution to a problem suitably close to *x*. So even though a real asymmetric *x* may have an algebraic solution with repeated real eigenvalues, the computed solution may be of a similar matrix with complex conjugate pairs of eigenvalues.

O segundo bloco de comandos gera também uma gaussiana tri-dimensional. Como *x1 = rnorm(1000)* e *x2 = rnorm(1000)* geram independentemente vetores gaussianos  $N(0, 1)$  então  $(X_1, X_2) \sim N_2(\mathbf{0}_2, bsI_2)$  onde  $bs = (0, 0)'$  e  $\mathbf{I}_2$  é a matriz identidade  $2 \times 2$ .

O vetor  $(X_1, X_2, X_3)$  tem a distribuição de suas duas primeiras coordenadas já determinadas acima:

$$\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} \sim N_3 \left( \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 1 & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \right)$$

A terceira coordenada  $X_3 = 3 + 1.2X_1 - 2.3X_2 + \epsilon$  onde  $\epsilon \sim N(0, 0.3^2)$ , independente de  $X_1$  e  $X_2$ . Assim, os elementos que faltam para determinar a distribuição de  $(X_1, X_2, X_3)$  são os seguintes:

$$\mathbb{E}(X_3) = \mathbb{E}(3 + 1.2X_1 - 2.3X_2 + \epsilon) = 3 + 1.2\mathbb{E}(X_1) + 2.3\mathbb{E}(X_2) + \mathbb{E}(\epsilon) = 3 + 0 + 0 + 0 = 3$$

e, pela independência entre  $X_1$ ,  $X_2$  e  $\epsilon$ ,

$$\begin{aligned} \sigma_{33} &= \mathbb{V}(X_3) = \mathbb{V}(3 + 1.2X_1 - 2.3X_2 + \epsilon) \\ &= (1.2)^2\mathbb{V}(X_1) + (-2.3)^2\mathbb{V}(X_2) + \mathbb{V}(\epsilon) \\ &= 1.44 + 5.29 + 1.0 = 7.73 \end{aligned}$$

enquanto que

$$\begin{aligned} \sigma_{13} &= \sigma_{31} = \text{Cov}(X_1, X_3) \\ &= \text{Cov}(X_1, 3 + 1.2X_1 - 2.3X_2 + \epsilon) \\ &= (1.2)\text{Cov}(X_1, X_1) - 2.3\text{Cov}(X_1, X_2) + \text{Cov}(X_1, \epsilon) \\ &= 1.2\mathbb{V}(X_1) - 2.3 \times (0) + 0 = 1.2 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_{23} &= \sigma_{32} = \text{Cov}(X_2, X_3) \\ &= \text{Cov}(X_2, 3 + 1.2X_1 - 2.3X_2 + \epsilon) \\ &= 1.2\text{Cov}(X_2, X_1) - 2.3\text{Cov}(X_2, X_2) + \text{Cov}(X_2, \epsilon) \\ &= 1.2 \times 0 - 2.3\mathbb{V}(X_2) + 0 = -2.3 \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} \sim N_3 \left( \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1.2 \\ 0 & 1 & -2.3 \\ 1.2 & -2.3 & 7.73 \end{bmatrix} \right)$$

## 8.2 Análise Fatorial

1. Neste exercício, você vai analisar os dados de uma análise química de vinhos. Você vai ler uma matriz com 178 amostras de diferentes vinhos. Haverá uma linha para cada vinho. A primeira coluna indica o cultivar do vinho (entenda como o tipo de uva usada na fabricação do vinho) tal como Sauvignon Blanc, Cabernet ou Chardonnay (rotulados como 1, 2 ou 3). As 13 colunas seguintes contêm as concentrações de 13 diferentes compostos químicos na amostra.

O objetivo é diferenciar entre os 3 tipos de vinho com base na sua composição química representada pelo vetor 13-dimensional  $\mathbf{X}$ . Você precisa criar uma regra para predizer o tipo de vinho (a primeira coluna) a partir das 13 variáveis de composição química. Vamos verificar que, ao invés de usarmos as 13 variáveis, poderemos nos basear em dois índices, os dois primeiros PCAs, que resumem toda a variabilidade simultânea das 13 variáveis.

Estude o script R abaixo. De propósito, ele tem uma quantidade *mínima* de comentários. Procure identificar o que cada linha está fazendo.

WARNING: o help da função `prcomp` é confuso, misturando PCA e análise fatorial nas explicações.

```
arq = "http://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/wine/wine.data"
wine=read.table(arq, sep=",")

head(wine)
pairs(wine[,2:6])
round(100*cor(wine[,2:14]))
round(apply(wine[,2:14], 2, sd),2)

wine.pca = prcomp(wine[,2:14, scale. = TRUE)
summary(wine.pca)
wine.pca$sdev
sum((wine.pca$sdev)^2)
screeplot(wine.pca, type="lines")

# Barplot das variancias acumuladas
barplot(cumsum(wine.pca$sdev^2)/sum(wine.pca$sdev^2))
# os dois primeiros PCA's explicam aprox 60% da variancia total
# os 5 primeiros explicam aprox 80%

# Os autovetores
dim(wine.pca$rot)

# 0 1o autovetor
wine.pca$rot[,1]

# 0 2o autovetor
wine.pca$rot[,2]

# Coordenadas dos pontos ao longo do primeiro componente
fscore1 = wine.pca$x[,1]

# Coordenadas dos pontos ao longo do segundo componente
```

```

fscore2 = wine.pca$x[,2]

# plot dos pontos projetados
plot(fscore1, fscore2, pch="*", col=wine[,1]+8)

```

Seja  $\mathbf{X}_i = (X_{i1}, \dots, X_{i,13})$  a *linha i* da matriz `wine`. Seja  $\mathbf{Z}_i = (Z_{i1}, \dots, Z_{i,13})$  a *linha i* da matriz `wine` PADRONIZADA. Isto é,  $Z_{ij} = (X_{ij} - \bar{x}_j)/s_j$  onde  $\bar{x}_i$  é a média aritmética e  $s_j$  é o desvio-padrão da coluna  $j$  da matriz `wine`. Esta matriz padronizada é obtida com o comando `z = scale(wine[2:14])`:

```

z = scale(wine[2:14])
round(apply(z, 2, mean), 5)
round(apply(z, 2, sd), 5)

```

Vamos considerar  $\mathbf{Z}_i$  como um *vetor-coluna* 13-dimensional. Ao invés de usarmos o vetor  $\mathbf{Z}_i$ , estamos usando apenas o vetor  $\mathbf{Y}_i$  composto pelos dois índices formados pelos dois primeiros componentes principais:

$$\mathbf{Y}_i = \begin{bmatrix} Y_{i1} \\ Y_{i2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}'_1 \mathbf{Z}_i \\ \mathbf{v}'_2 \mathbf{Z}_i \end{bmatrix}$$

onde  $\mathbf{v}_1$  e  $\mathbf{v}_2$  são os dois primeiros autovetores da matriz de correlação de  $\mathbf{X}$ .

- Preencha os locais com (??) com os valores numéricos corretos (duas casa decimais apenas):

$$\begin{aligned} Y_{i1} &= (??)Z_{i1} + (??)Z_{i2} + (??)Z_{i3} + \dots + (??)Z_{i,13} \\ Y_{i2} &= (??)Z_{i1} + (??)Z_{i2} + (??)Z_{i3} + \dots + (??)Z_{i,13} \end{aligned}$$

- O último gráfico do acript R acima é um plot dos pontos  $\mathbf{Y}_i$  dos 178 vinhos. Identifique três regiões do plano  $Y_1, Y_2$  que podem ser usadas para classificar futuras amostras de vinhos em uma das três categorias. Pode apenas esboçar grosseiramente no gráfico a mão livre.
- Suponha que uma nova amostra de vinho tem sua composição química medida e encontra-se

$$\mathbf{x} = (13.95, 3.65, 2.25, 18.4, 90.18, 1.55, 0.48, 0.5, 1.34, 10.2, 0.71, 1.48, 587.14)$$

Obtenha seu vetor  $\mathbf{z}$ , as suas coordenadas  $(y_1, y_2)$  e prediga o seu tipo. Confira sua resposta no final desta lista.

**Solução:** Para o problema do vinho:

```

x = c(13.95, 3.65, 2.25, 18.4, 90.18, 1.55, 0.48, 0.5, 1.34, 10.2, 0.71, 1.48, 587.14)
z = (x - apply(wine[,2:14], 2, mean))/apply(wine[,2:14], 2, sd)
y1 = sum( wine.pca$rot[,1] * z)
y2 = sum( wine.pca$rot[,2] * z)
plot(fscore1, fscore2, pch="*", col=wine[,1]+8)
points(y1, y2, pch="*", cex=4)

```



Figura 8.2: Para quem gosta de cerveja, uma Indian Pale Ale de alta qualidade produzida em BH.

2. Cerveja de excelente qualidade começa a ser produzida no Brazil em pequenas cervejarias e um dos centros mais ativos é a região metropolitana de Belo Horizonte, em especial Nova Lima. Se você gosta, experimente a Kud Kashmir (Figura 8.2).

O arquivo `beer.txt` é um dataset da página de Karl Wuensch, East Carolina University. Uma nova cervejaria está interessada em conhecer o comportamento de escolha do consumidor de cerveja artesanal. Um grupo de 231 consumidores avaliaram a importância de sete qualidades ao decidir se deve ou não comprar uma cerveja. Para cada qualidade, foi dada uma nota numa escala de 0 a 100 para sua importância. As sete qualidades ou variáveis são as seguintes:

- COST: baixo custo por volume (300ml de cerveja)
- SIZE: grande tamanho da garrafa (volume)
- ALCOHOL: alto percentual de álcool da cerveja
- REPUTATION: boa reputação da marca
- COLOR: a cor da cerveja
- AROMA: agradável aroma da cerveja
- TASTE: gosto saboroso da cerveja

A variável SES é uma categoria de status socioeconômico (valores maiores significam status mais elevados). A variável grupo não é explicada, não sei do que se trata. Ignore-a durante o exercício.

O script abaixo executa o seguinte: Leia os dados numa matriz. Use `summary(beer)` (ou olhe os dados na tela) para verificar que existem 11 NAs na variável AROMA. Obtenha a matriz de covariância  $S$  das 7 variáveis de qualidade e verifique que os seus desvios-padrão não são muito distintos. Obtenha a matriz de correlação  $R$ .

```

beer = as.matrix(read.table("beer.txt", header=T))
summary(beer)

S = var(beer[,1:7], na.rm=T)
S
sqrt(diag(S)) # sd's not very different

R = cor(beer[,1:7], use ="complete.obs")

round(100*R)

```

Você deve gastar um tempo olhando a matriz de correlação  $R$ , a menos que ela seja muito grande. Você está planejando usar PCA ou FA para capturar a essência das correlações nesta matriz. Observe que há muitas correlações grandes e médias em  $R$ . Todas as variáveis tem algumas correlações grandes, com a exceção de `reputation` que é moderadamente (e negativamente) correlacionada com todo o resto. É óbvio que existe uma estrutura de correlação entre as variáveis.

O pacote `corrplot` permite visualizar a matriz de correlação  $R$  de um jeito muito legal. Veja em <http://cran.r-project.org/web/packages/corrplot/vignettes/corrplot-intro.html>. Instale e carregue este pacote. Faça um gráfico na forma da matriz  $R$  em que cada célula possui uma elipse representando grau de correlação entre as duas variáveis. Quanto mais achatada e parecida com uma linha reta, mais correlacionadas são as duas variáveis. Se a elipse for parecida com um círculo, é sinal de que a correlação é próxima de zero. Neste caso, a imagem estará quase transparente. Correlações positivas são azuis, negativas são vermelhas.

```
library(corrplot)
corrplot(R, method = "ellipse")
# plotando as elipses e os valores das correlações
corrplot.mixed(R, upper = "ellipse")
# rearranjando as linhas e colunas para agrupar variáveis com correlações parecidas
corrplot.mixed(R, order = "AOE", upper = "ellipse", cl.align = "r")
```

Parece haver dois grupos de variáveis, um formado por `COST`, `ALCOHOL`, `SIZE` e outro formado por `COLOR`, `AROMA`, `TASTE`. Elas são bem positivamente correlacionadas dentro de cada grupo e, ao mesmo tempo, pouco correlacionadas com as variáveis do outro grupo. Uma variável, `REPUTATION`, forma um grupo à parte, sendo fracamente e negativamente correlacionada com todas as outras seis.

Gere uma nova matriz eliminando as poucas linhas em que existem NAs. A seguir, obtenha os autovetores e autovalores da matriz de covariância  $S$  com a função `eigen`. Vamos trabalhar com matriz de covariância porque os desvios-padrão das setes variáveis são parecidos.

```
newbeer = na.omit(beer)
S = cov(newbeer[,1:7])
fit = eigen(S) # usa o algoritmo QR em cima da matriz S
# autovalores
fit$values
# autovetores
fit$vectors
```

Na análise acima, tivemos de gerar a matriz de covariância e, a seguir, passá-la à função `eigen`. A função `eigen` não enxerga mais os dados originais, somente a matriz  $R$ . Outra maneira é fornecer diretamente a matriz  $X$  de dados  $n \times p$  e pedir que os componentes principais da matriz de covariância induzida (ou da matriz de correlação) seja calculada. A função `prcomp` faz isto através da decomposição SVD de  $X$ .

```
pca.beer = prcomp(newbeer[,1:7])

# Se quiser obter PCA da matriz de correlação, use
# pca.beer = prcomp(newbeer[,1:7], scale. = TRUE)
```

```

# Os 7 autovetores
pca.beer$rot

# Os 7 autovalores
(pca.beer$sdev)^2

# verifique que os autovetores acima sao os mesmos daqueles retornados por eigen.
# verifique que os autovetores tem norma euclidiana = 1.
# Por exemplo, o 1o PCA:
sum(pca.beer$rot[,1]^2)

# Grafico scree com os 7 autovalores (ou variancias de cada PCA)
plot(pca.beer)

# Barplot das variancias acumuladas indicando a escolha de 2 PCAs
barplot(cumsum(pca.beer$sdev^2))

# Resumo
summary(pca.beer)

# Note que o quadrado da linha Standard deviation acima eh igual aos autovalores
# obtidos com fit$values

# Vamos usar apenas os dois 1os PCs para representar R com dois fatores
# Carga do Fator = sqrt(LAMBDA) * EIGENVECTOR

cargafat1 = pca.beer$sdev[1] * pca.beer$rot[,1]
cargafat2 = pca.beer$sdev[2] * pca.beer$rot[,2]

# matriz de cargas
L = cbind(cargafat1, cargafat2)

rownames(L) = rownames(R)[1:7]

round(L, 2)

plot(L, type="n", xlim=c(-40, 20), ylim=c(-10, 25))
text(L, rownames(L))
abline(h=0)
abline(v=0)

```

A interpretação dos resultados obtidos não é simples. Com os eixo rotacionados conseguiremos um resultado bem mais interpretável. Não existe uma rotina nativa em R para obter a rotação ótima dos fatores no caso da estimação pelo método de componentes principais. Em R, a rotação ótima está implementada apenas para a estimação das cargas  $L$  por meio do método de máxima verossimilhança, um método que veremos em breve. Para o caso do método de componentes principais, o último gráfico mostra que uma rotação horária de aproximadamente  $90^\circ + 15^\circ$  ou  $\pi/2 + 15(\pi/180)$  deve colocar a maioria dos pontos em apenas um dos dois eixos ortogonais:

```

# Fazendo manualmente uma rotacao horaria de pi/2+15*pi/180
phi = pi/2 + 15*(pi/180)
T = matrix(c(cos(phi), -sin(phi), sin(phi), cos(phi)), ncol=2, byrow=T)

Lstar = L %*% T # usando a multiplicacao por linha da matriz L

plot(Lstar, type="n", xlim=c(-20, 30), ylim=c(-15, 35))
text(Lstar, rownames(L))
abline(h=0); abline(v=0)

round(Lstar,2)

```

A interpretação dos fatores é bem mais simples agora. O primeiro fator tem cargas positivas e grandes em **COLOR**, **AROMA**, **TASTE** e uma carga negativa moderada em **REPUTATION**. Algém com uma nota (ou escore) muito elevado neste fator é alguém que preza e diferencia qualidades ligadas ao paladar da cerveja e também seus seus aspectos estéticos. Este componente poderia ser chamado de *Degustador*.

Os indivíduos que tiverem seu segundo fator muito positivo terão dado notas altas para os aspectos de **COST**, **ALCOHOL**, **SIZE** e, ao mesmo tempo, dado uma nota moderadamente baixa para **REPUTATION**. Alguém que possui uma nota muito alta neste segundo fator é alguém que gosta de muita cerveja barata e com muito álcool, e não se importa muito com a reputação da cerveja. Este componente poderia ser chamado de *Bebum Barato*.

Para obter uma estimativa das variâncias dos fatores específicos (isto é, da matriz  $\Psi$ ), usamos o código abaixo:

```

matpsi = diag(diag(S - Lstar %*% t(Lstar)))
round(matpsi, 2)

sum( (S - Lstar %*% t(Lstar) - matpsi)^2 )/sum(S^2)

```

O último comando mostra que a matriz residual  $\Sigma - \mathbf{L}^*(\mathbf{L}^*)' - \Psi$  tem uma soma de suas entradas (ao quadrado) muito pequena em comparação com a soma das entradas na matriz de covariância  $\Sigma$  (apenas 0.005303857 ou 0.5%).

No nosso modelo, os indivíduos recebem escores *independentes* destes dois fatores. Eles não são fatores competidores, um indivíduo pode receber altas doses dos dois fatores. Ele pode gostar de tomar muita cerveja com muito álcool e que seja barata. Isto é, ter um escore alto no fator 2. Ao mesmo tempo, este mesmo indivíduo pode apreciar também as cervejas mais refinadas, mais caras e com mais sabor e aroma. Isto é, ter um escore alto também no fator 1. Em suma, ele pode ser um esteta que adora se embebedar.

Para encontrar uma estimativa dos escores dos dois fatores para cada um dos 220 indivíduos que restaram na matriz **newbeer** após eliminar as 11 linhas com NAs, usamos o procedimento de regressão linear. Lembre-se que o modelo de análise factorial estabelece que as 7 notas do indivíduo  $i$  é representada por

$$\mathbf{X}_i = \boldsymbol{\mu}_{(7 \times 1)} + \mathbf{L}^*_{(7 \times 2)} \mathbf{F}_i_{(2 \times 1)} + \boldsymbol{\epsilon}_i_{(7 \times 1)}$$

onde  $\mathbf{F}'_i = (F_{1i}, F_{2i})$  são os escores (ou as doses) que o indivíduo  $i$  possui dos fatores 1 e 2. Como observamos diretamente  $\mathbf{X}_i$  e como estimamos a média populacional  $\boldsymbol{\mu}$  e a matriz de cargas rotacionadas  $\mathbf{L}^*$ , podemos usar mínimos quadrados ou regressão linear para estimar os escores  $F_{1i}$  e  $F_{2i}$ .

Por exemplo, o primeiro indivíduo na matriz `newbeer` tem a sua representação fatorial estimada por

$$\mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} 90 \\ 80 \\ 70 \\ 20 \\ 50 \\ 70 \\ 60 \end{bmatrix} = \hat{\boldsymbol{\mu}} + \hat{\mathbf{L}}^* \hat{\mathbf{F}}_1 + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1 = \begin{bmatrix} 47.25 \\ 43.50 \\ 46.50 \\ 48.25 \\ 51.00 \\ 44.75 \\ 67.25 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.11 & 31.74 \\ 4.84 & 32.07 \\ 3.09 & 30.19 \\ -12.95 & -10.83 \\ 25.81 & 0.05 \\ 24.79 & -1.37 \\ 22.94 & -2.28 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{1i} \\ F_{2i} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\epsilon}_{11} \\ \hat{\epsilon}_{21} \\ \hat{\epsilon}_{31} \\ \hat{\epsilon}_{41} \\ \hat{\epsilon}_{51} \\ \hat{\epsilon}_{61} \\ \hat{\epsilon}_{71} \end{bmatrix}$$

A matriz  $\hat{\mathbf{L}}^*$  está na matriz `Lstar` no final do script R e é a mesma para todos os indivíduos. O vetor  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  também é o mesmo para todos os indivíduos e é obtido simplesmente tomando a média aritmética de cada uma das sete qualidades de modo que  $\boldsymbol{\mu}$  é aproximadamente igual ao resultado do comando `mu = apply(newbeer[,1:7], 2, mean)`.

```
> apply(newbeer[,1:7], 2, mean)
  COST      SIZE ALCOHOL REPUTAT COLOR   AROMA   TASTE
 47.25    43.50   46.50   48.25   51.00   44.75   67.25
```

Assim, para o indivíduo  $i$  podemos estimar seus escores  $F_{1i}$  e  $F_{2i}$  pelos valores  $\hat{F}_{1i}$  e  $\hat{F}_{2i}$  que minimizam o comprimento (ao quadrado) da diferença entre  $\mathbf{X}_i$  e  $\hat{\boldsymbol{\mu}} + \hat{\mathbf{L}}^* \mathbf{F}_i$ :

$$\underset{\mathbf{F}_i}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{X}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}} - \hat{\mathbf{L}}^* \mathbf{F}_i\|^2$$

Ou seja, para o indivíduo  $i = 1$ , queremos o vetor  $\mathbf{F}_1$  que minimize a norma euclidiana (ao quadrado) do vetor

$$\mathbf{X}_1 - \hat{\boldsymbol{\mu}} - \hat{\mathbf{L}}^* \mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 90 - 47.25 \\ 80 - 43.50 \\ 70 - 46.50 \\ 20 - 48.25 \\ 50 - 51.00 \\ 70 - 44.75 \\ 60 - 67.25 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.11 & 31.74 \\ 4.84 & 32.07 \\ 3.09 & 30.19 \\ -12.95 & -10.83 \\ 25.81 & 0.05 \\ 24.79 & -1.37 \\ 22.94 & -2.28 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11} \\ F_{21} \end{bmatrix}$$

O seguinte código em R faz isto através de loop sobre as linhas da matriz `newbeer`:

```
## Factor scores dos n=220 individuos
factors = matrix(0, nrow=nrow(beer), ncol=2)
mu = apply(newbeer[,1:7], 2, mean)
for(i in 1:nrow(newbeer)){
  y = newbeer[i, 1:7] - mu
  factors[i,] = lm(y ~ 0 + Lstar)$coef
}
```

Podemos visualizar os fatores de cada um dos 220 indivíduos pedindo um plot da matriz `factors`:

```
plot(factors, xlab="fator 1", ylab="fator2")

# mas... onde estao os 220 individuos?
# Varios individuos poduziram o MESMO vator x --> estimamos com os mesmos fatores

plot(jitter(factors, amount=0.05), xlab="fator 1", ylab="fator2")
```

Como vários indivíduos produziram o mesmo vetor  $\mathbf{X}_i$  seus fatores  $\mathbf{F}_i$  também coincidem. Assim, o comando `jitter` foi usado. Ele perturba as coordenadas de cada ponto aleatoriamente com um ruído uniforme entre `-amount` e `+amount`. No novo plot, podemos enxergar todos os indivíduos.

## Respostas

- Para o problema do vinho:

```
x = c(13.95, 3.65, 2.25, 18.4, 90.18, 1.55, 0.48, 0.5, 1.34, 10.2, 0.71, 1.48, 587.14)
z = (x - apply(wine[,2:14], 2, mean))/apply(wine[,2:14], 2, sd)
y1 = sum( wine.pca$rot[,1] * z)
y2 = sum( wine.pca$rot[,2] * z)
plot(fscore1, fscore2, pch="*", col=wine[,1]+8)
points(y1, y2, pch="*", cex=4)
```

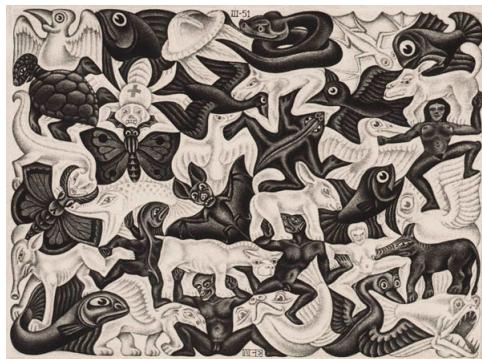
## 8.3 Análise Discriminante

COMPLETAR



# Capítulo 9

## Classificação



1. Replicar a análise de classificação usando a função LDA de Fisher em duas páginas da web (uma sendo a sequência da seguinte): <http://www.aaronschlegel.com/discriminant-analysis/> e <https://www.r-bloggers.com/classification-with-linear-discriminant-analysis/>. Os dados não estão imediatamente visíveis apontado pelas páginas mas eu os coloquei na página da nossa disciplina.

---

2. Replicar a análise usando LDA de Fisher que está na seguinte página da web: <https://www.datascienceblog.net/post/machine-learning/linear-discriminant-analysis/>.

---

3. Existem duas classes ou populações, 1 e 2, presentes nas proporções positivas  $\pi_1$  e  $\pi_2$  com  $\pi_1 + \pi_2 = 1$ . Suponha que o vetor aleatório contínuo  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$  com  $p$  variáveis possua as densidades  $f_1(\mathbf{x})$  e  $f_2(\mathbf{x})$  quando o indivíduo pertence à população 1 ou 2, respectivamente. Sejam  $c(1|2)$  o custo do erro de classificar erradamente no grupo 1 um indivíduo que seja do grupo 2. Analogamente, defina o custo do outro erro  $c(2|1)$ . A região ótima  $R_1$  de classificação no grupo 1 é dada pela seguinte região do espaço  $\mathbb{R}^p$ :

$$R_1 = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p \text{ tais que } \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} > \frac{c(1|2) \pi_2}{c(2|1) \pi_1} \right\}$$

Note que a ordem das populações na última fração é oposta à ordem na razão das densidades. Isto é, comparamos  $f_1/f_2$  com  $\pi_2/\pi_1$ .

- Suponha que  $c(1|2) = c(2|1)$  e que  $\pi_1 = \pi_2$ . Neste caso, a regra ótima fica reduzida a uma simples comparação. Qual é esta regra de classificação?
- Imagine agora que  $\pi_1 = 0.01$  e que  $c(1|2) = c(2|1)$ . Para tornar as coisas mais concretas, suponha que a população 1 sejam portadores de certo vírus e a população 2, os demais. A

regra simples do item acima fica modificada. Agora não basta que  $f_1(\mathbf{x})$  seja maior que  $f_2(\mathbf{x})$ . Ela precisa ser bem maior que  $f_2(\mathbf{x})$ . Quantas vezes maior  $f_1(\mathbf{x})$  deve ser para que classifiquemos o item com característica  $\mathbf{x}$  em 1?

- Suponha que os custos de má-classificação sejam muito diferentes. O custo de classificar o portador do vírus como não pode custar-lhe a vida ou a vida de outras pessoas. Por outro lado, o indivíduo saudável ser classificado como infectado custa mais exames confirmatórios, algumas medidas de isolamento e outras coisas que são relativamente menos custosas. Suponha que  $c(1|2)$  seja 10 vezes menor que  $c(2|1)$ . Neste caso, com  $\pi_1 = 0.01$ , como a regra do item acima fica modificada?

4. Um programa é usado para classificar fotos de gatos (população 1) versus fotos de não-gatos (população 2). As fotos da população 1 (fotos de gatos) são chamadas de *relevantes*. O classificador seleciona algumas fotos para classificar no grupo 1 baseado em features aleatórias no vetor  $\mathbf{X}$ . A regra de classificação é representada pela função binária  $D(\mathbf{X})$  que assume os valores 1 ou 2 dependendo do vetor aleatório  $\mathbf{X}$  cair ou não na região  $R_1$  de classificação no grupo 1.

Haverá erros nesta classificação e queremos torná-los pequenos. Duas métricas muito populares para avaliar a qualidade de um classificador são: *precisão* (precision, em inglês) e *revocação* (recall, em inglês). A palavra revocação não é muito usada na linguagem diária. Ela significa “fazer voltar, retornar, chamar novamente”. Pode significar também revogação, anulamento de um contrato mas não é este o significado relevante para nosso contexto.

- Precisão:  $\mathbb{P}(\text{foto} \in \text{gatos} \mid \text{classificado como gato}) = \mathbb{P}(\mathbf{X} \in 1 \mid D(\mathbf{x}) = 1)$
- Revocação:  $\mathbb{P}(\text{classificado como gato} \mid \text{foto} \in \text{gatos}) = \mathbb{P}(D(\mathbf{x}) = 1 \mid \mathbf{X} \in 1)$

É claro que, tanto para precisão quanto para revocação, quanto maior, melhor. Precisão e revocação são probabilidades condicionais usando os mesmos eventos  $A$  e  $B$  mas um deles é  $\mathbb{P}(A|B)$  enquanto o outro é simplesmente  $\mathbb{P}(B|A)$ . Sabemos que estas probabilidades podem ser muito diferentes. A Figura 9.1, retirada da página [Precision\\_and\\_recall](#) na Wikipedia, mostra itens nas suas classes reais: relevante (pop 1) ou não (pop 2). Mostra também a sua classificação na classe 1 (os itens dentro da elipse central) ou na classe 2 (os restantes). A Figura ainda mostra as probabilidades precisão e revocação como diagramas de Venn dos eventos envolvidos.

Marque V ou F nas afirmativas a seguir:

- A precisão mede o quanto os resultados da classificação são úteis.
- A revocação mede o quanto os resultados da aplicação da regra de classificação são completos.
- A soma de precisão e revocação é igual a 1.
- Precisão = Revocação  $\times \frac{\mathbb{P}(\mathbf{X} \in 1)}{\mathbb{P}(D(\mathbf{x}) = 1)}$ .
- Existe um trade-off entre precisão e revocação: se aumentarmos uma métrica, a outra tem de diminuir.

**Solução:** VVFVF

5. Existem duas classes ou populações, 1 e 2, presentes nas proporções positivas  $\pi_1$  e  $\pi_2$  com  $\pi_1 + \pi_2 = 1$ . Suponha que  $\pi_1 \approx 0$ . O vetor aleatório contínuo  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$  com  $p$  variáveis possui as densidades  $f_1(\mathbf{x})$  e  $f_2(\mathbf{x})$  quando o indivíduo pertence à população 1 ou 2, respectivamente. Seja

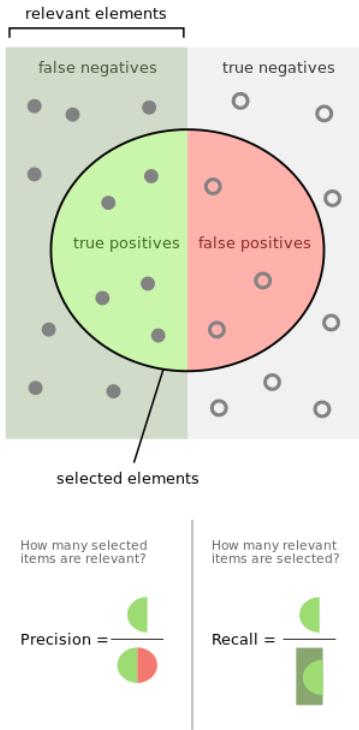


Figura 9.1: Retirado da Wikipedia.

$c(1|2)$  o custo do erro de classificar erradamente no grupo 1 um indivíduo que seja do grupo 2. Analogamente, defina o custo do outro erro  $c(2|1)$ . A regra de classificação é representada pela função binária  $D(\mathbf{X})$  que assume os valores 1 ou 2 dependendo do vetor aleatório  $\mathbf{X}$  cair ou não na região  $R_1$  de classificação no grupo 1.

- Uma regra de decisão que vai errar pouco será atribuir a classe 2 a todo e qualquer item:  $D(\mathbf{X}) \equiv 2$  para todo valor de  $\mathbf{X}$ . Obtenha a probabilidade de classificação errada. A probabilidade é próxima de zero?
- Se o custo de má-clasificação for também desbalanceado, com  $c(2|1) >> c(1|2)$ , a estratégia anterior pode ser muito ruim. Obtenha o custo esperado de má-classificação (ECM) da regra anterior.

**Solução:**  $\pi_1$  e  $ECM = c(2|1)\pi_1$

- 
6. Você quer classificar objetos em duas classes, 1 ou 2, com base numa única variável  $X$ , um vetor de dimensão 1, usando a regra de classificação ótima. Seja  $f_1(x) = (1 - |x|)/2$  para  $x \in (-1, 1)$  a densidade de  $X$  na população 1 e  $f_2(x) = (1 - |x - 0.5|)/2$  para  $-0.5 < x < 1.5$  a densidade de  $X$  na população 2. Suponha que os custos de classificação errada são  $c(2|1) = a$  e  $c(1|2) = 2a$ . Além disso, assuma que  $p_1 = 0.3$  e  $p_2 = 1 - p_1 = 0.7$ .

- Esboce as duas densidades de probabilidade num gráfico.
- Identifique as regiões de classificação ótima  $R_1$  e  $R_2$ .
- Assumindo que  $p_1 = p_2$ , identifique as regiões.
- Assuma agora que, além das probabilidades a priori, os custos também são iguais.

7. Na população 1, o vetor  $\mathbf{X}$  possui distribuição  $N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1)$  e distribuição  $N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2)$  na população 2. Seja  $d_k^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}_k)$  a distância de Mahalanobis avaliada com os parâmetros  $\boldsymbol{\mu}_k$  e  $\boldsymbol{\Sigma}_k$  da população  $k$ . Mostre que a regra de classificação ótima implica que um novo objeto com medições  $\mathbf{x}$  é alocado a população 1 se

$$d_1^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}_1) - d_2^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}_2) + \log \left( \frac{|\boldsymbol{\Sigma}_1|}{|\boldsymbol{\Sigma}_2|} \right) \leq k$$

onde  $|A| = \det(A)$ . Encontre a constante  $k$  em função dos custos e probabilidades a priori  $p_1$  e  $p_2 = 1 - p_1$ . Obtenha esta constante no caso de custos iguais e  $p_1 = p_2$ .

---

8. Quando temos  $g > 2$  populações, a regra de classificação ótima aloca  $\mathbf{x}$  à população  $j$  para a qual

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^g p_i f_i(\mathbf{x}) c(j| \in i)$$

é mínimo. As probabilidades *a priori*  $p_1, \dots, p_g$  somam 1 e  $c(j| \in i)$  é o custo de classificar em  $j$  um indivíduo da população  $i$ . Mostre que a regra vista em sala de aula é equivalente a esta no caso de  $g = 2$  populações.

---

9. Suponha que  $f(\mathbf{x})$  é a densidade de uma gaussiana  $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$  para  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ . Sejam  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_p$  os autovalores de  $\boldsymbol{\Sigma}$  com os correspondentes autovetores  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_p$ . Responda V ou F:

- A chance de observar um valor  $\mathbf{x}$  distante do perfil médio  $\boldsymbol{\mu}$  decresce mais rápido se nos afastarmos de  $\boldsymbol{\mu}$  ao longo da direção  $\mathbf{e}_1$ .
  - Se os autovalores  $\lambda_i$  forem todos iguais, os pontos  $\mathbf{x}$  que tem a mesma chance de serem selecionados ficam localizados em esferas centradas em  $\boldsymbol{\mu}$ .
  - A regra de classificação ótima para duas populações com  $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2$  projeta ortogonalmente cada dado  $\mathbf{x}$  ao longo do autovetor com menor autovalor.
- 

10. Thomson e Randall-Maciver (1905) escavaram e obtiveram crânios que, de acordo com o local em que foram encontrados, puderam ser datados em cinco períodos distintos da história do império egípcio.

- the early predynastic period (circa 4000 BC)
- the late predynastic period (circa 3300 BC)
- the 12th and 13th dynasties (circa 1850 BC)
- the Ptolemaic period (circa 200 BC)
- the Roman period (circa 150 BC)

Measurements in mm on of 30 male Egyptian skulls from each period were taken. The variables are:

- MB: Maximal Breadth of Skull
- BH: Basibregmatic Height of Skull
- BL: Basialveolar Length of Skull
- NH: Nasal Height of Skull

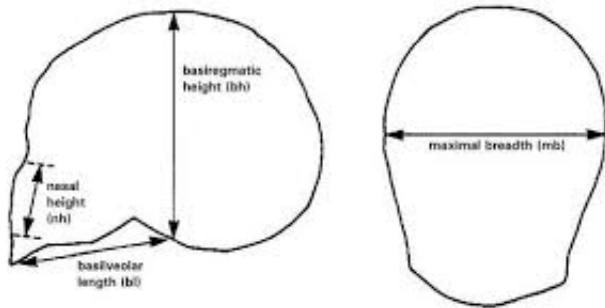


Figura 9.2: Medições em crânios encontrados em sítios arqueológicos.

Queremos analisar os dados para determinar se existem diferenças na distribuição de probabilidade dos tamanhos dos crânio ao longo do tempo. Isto é, a distribuição estatística dos tamanhos de crânios variou ao longo do tempo? Antropólogos teorizam que uma mudança no tamanho do crânio ao longo do tempo é uma evidência da miscigenação dos egípcios com populações de imigrantes ao longo dos séculos.

REF: Thomson, A. and Randall-MacIver, R. (1905) *Ancient Races of the Thebaid*, Oxford: Oxford University Press. Data also found in: Manly, B.F.J. (1986) *Multivariate Statistical Methods*, New York: Chapman & Hall.

Leia os dados do arquivo `EgyptianSkull.txt`, crie duas classes (ou populações) agregando as duas primeiras e as duas últimas e deletando os crânios do período intermediário, das 12a. e 13a. dinastias (cerca de 1850 a.C.).

Separar 4 dos crânios para alojar a uma das duas populações. Crie a regra de classificação com os crânios restantes em duas situações: com  $\Sigma_1 = \Sigma_2$  e com  $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$ . (solução no final do capítulo).

- 
11. Examples of the character images generated by these procedures are presented in Figure 9.3. Each character image was then scanned, pixel by pixel, to extract 16 numerical attributes. These attributes represent primitive statistical features of the pixel distribution. To achieve compactness, each attribute was then scaled linearly to a range of integer values from 0 to 15. This final set of values was adequate to provide a perfect separation of the 26 classes. That is, no feature vector mapped to more than one class. The attributes (before scaling to 0-15 range) are:

- (a) The horizontal position, counting pixels from the left edge of the image, of the center of the smallest rectangular box that can be drawn with all on pixels inside the box.
- (b) The vertical position, counting pixels from the bottom, of the above box.
- (c) The width, in pixels, of the box.
- (d) The height, in pixels, of the box.
- (e) The total number of “on” pixels in the character image.
- (f) The mean horizontal position of all “on” pixels relative to the center of the box and divided by the width of the box. This feature has a negative value if the image is “leftheavy” as would be the case for the letter L.
- (g) The mean vertical position of all “on” pixels relative to the center of the box and divided by the height of the box.
- (h) The mean squared value of the horizontal pixel distances as measured in 6 above. This attribute will have a higher value for images whose pixels are more widely separated in the horizontal direction as would be the case for the letters W or M.



Figura 9.3: Examples of the character images from which features were extracted.

- (i) The mean squared value of the vertical pixel distances as measured in 7 above.
- (j) The mean product of the horizontal and vertical distances for each "on" pixel as measured in 6 and 7 above. This attribute has a positive value for diagonal lines that run from bottom left to top right and a negative value for diagonal lines from top left to bottom right.
- (k) The mean value of the squared horizontal distance times the vertical distance for each "on" pixel. This measures the correlation of the horizontal variance with the vertical position.
- (l) . The mean value of the squared vertical distance times the horizontal distance for each "on" pixel. This measures the correlation of the vertical variance with the horizontal position.
- (m) The mean number of edges (an "on" pixel immediately to the right of either an "on" pixel or the image boundary) encountered when making systematic scans from left to right at all vertical positions within the box. This measure distinguishes between letters like "W" or "M" and letters like "T" or "L".
- (n) The sum of the vertical positions of edges encountered as measured in 13 above. This feature will give a higher value if there are more edges at the top of the box, as in the letter "Y".
- (o) The mean number of edges (an "on" pixel immediately above either an "off" pixel or the image boundary) encountered when making systematic scans of the image from bottom to top over all horizontal positions within the box.
- (p) The sum of horizontal positions of edges encountered as measured in 15 above. A data file of the 16 attribute values and outcome category for each of the 20,000 stimulus items is on file with David Aha ([aha@ics.uci.edu](mailto:aha@ics.uci.edu)). The set of 20,000 unique letter images was organized into two files. Sixteen thousand items were used as a learning set and the remaining 4000 items were used for testing the accuracy of the rules.

12. Este exercício foi extraído da página web do livro *The Elements of Statistical Learning* de Hastie, Tibshirani e Friedman (2009), editado pela Springer-Verlag: <http://statweb.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/> Este é um dos melhores livros de Machine Learning no momento. Clique no link *Data* e no link *ZIP code* para encontrar os dados e a sua descrição .

Normalized handwritten digits, automatically scanned from envelopes by the U.S. Postal Service. The original scanned digits are binary and of different sizes and orientations; the images here have been deslanted and size normalized, resulting in 16 x 16 grayscale images (Le Cun et al., 1990).

The data are in two gzipped files, and each line consists of the digit id (0-9) followed by the 256 grayscale values.

There are 7291 training observations and 2007 test observations, distributed as follows: 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 Total Train 1194 1005 731 658 652 556 664 645 542 644 7291 Test 359 264 198 166 200 160 170 147 166 177 2007

or as proportions: 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 Train 0.16 0.14 0.1 0.09 0.09 0.08 0.09 0.09 0.07 0.09 Test 0.18 0.13 0.1 0.08 0.10 0.08 0.07 0.08 0.09

Encare cada Assim, as porporções Alternatively, the training data are available as separate files per digit (and hence without the digit identifier in each row)

The test set is notoriously “difficult”, and a 2.5% error rate is excellent. These data were kindly made available by the neural network group at AT&T research labs (thanks to Yann Le Cunn).

## Soluções

Problema dos crânios:

```
# R script for some basic classification and
# lda = linear discriminant analysis

skull <- read.table(file="EgyptianSkull.txt",header=T)

dim(skull)
head(skull)

period = skull[,5]
period[skull[,5] < -3000] = 1
period[skull[,5] < -1000 & skull[,5] > -3000] = 2
period[skull[,5] > -1000] = 3

colsk = c("red","green","blue")[period]
pairs(skull[,1:4], main="Egyptian skull", pch=21, bg=colsk)

# pch=21 specifies the marker type. See help(pch)
# bg = background colour of the marker
# In our example we want a different colour for each period.

# Os pontos das tres classes parecem bem misturados.
# Parece dificil ser capaz de classifica-los sem muito erro.
```

```

# Vamos fixar a atencao nos dois periodos mais extremos para
# trabalhar apenas com duas classes

skull = skull[period == 1 | period == 3, 1:4]
row.names(skull) = 1:120
period = period[period == 1 | period == 3]
period[period==3] = 2

colsk = c("red","blue")[period]
pairs(skull[,1:4], main="Egyptian skull, 2 periods", pch=21, bg=colsk)

# separando alguns dados, 2 de cada periodo,
# para classificar posteriormente:

teste = skull[c(23, 52, 88, 111), ]
treino = skull[-c(23, 52, 88, 111), ]
period.treino = rep(1:2, c(58,58))

# Visualizando os conjuntos de teste e treino
colsk = c("red","blue")[period]
colsk[c(23, 52, 88, 111)] = "green"
mark = rep(21, nrow(skull))
mark[c(23, 52, 88, 111)] = 22
pairs(skull[,1:4], pch=mark, bg=colsk)

# Regra de classificacao otima supondo Sigma_1 = Sigma_2
# vetor de medias das 4 variaveis
mu1 = apply(treino[period.treino ==1, ], 2, mean)
mu2 = apply(treino[period.treino ==2, ], 2, mean)
matcov1 = cov(treino[period.treino ==1, ])
matcov2 = cov(treino[period.treino ==2, ])
matcov = (matcov1 + matcov2)/2
maha1 = mahalanobis(teste, mu1, matcov)
maha2 = mahalanobis(teste, mu2, matcov)

maha1 - maha2
# O segundo ponto eh alocado a pop1, os demais a pop2
# Assim, cometemos um erro com o primeiro ponto, que
# deveria ser alocado a pop1

# Agora, vamos refazer os calculos supondo Sigma_1 != Sigma_2
mu1 = apply(treino[period.treino ==1, ], 2, mean)
mu2 = apply(treino[period.treino ==2, ], 2, mean)
matcov1 = cov(treino[period.treino ==1, ])
matcov2 = cov(treino[period.treino ==2, ])
det1 = log(det(matcov1))
# este termo adicional, log da matriz de covariancia,
# precisa ser subtraido da distancia de Mahalanobis
det2 = log(det(matcov2))

```

```

d1 = mahalanobis(teste, mu1, matcov) - det1
d2 = mahalanobis(teste, mu2, matcov) - det2

d1-d2

# Como a amostra e' muito pequena, vamos avaliar a classificacao
# omitindo um ponto x de cada vez da base, ajustando os parametros
# mu e Sigma SEM ESTE ponto x e calculando
# a distancia de Mahalanobis entre x e mu
# Esta seia a distancia que usariamos caso quisesssemos alocar
# o novo ponto x usando os outros dados.
# Vamos avaliar as taxas de erro cometidos.
# Assumimos custo iguais e proporcoes iguais nas
# duas populacoes

maha = matrix(0, nrow=nrow(skull), ncol=2)

pop1 = skull[period == 1, ]
pop2 = skull[period == 2, ]
mu1 = apply(pop1, 2, mean); mu2 = apply(pop2, 2, mean)
matcov1 = cov(pop1); matcov2 = cov(pop2)
det1 = log(det(mtcov1)); det2 = log(det(mtcov2))

for(i in 1:60){
  aux1 = pop1[-i,]
  aux2 = pop2[-i,]
  mu1i = apply(aux1, 2, mean)
  mu2i = apply(aux2, 2, mean)
  matcov1i = cov(pop1[-i,])
  matcov2i = cov(pop2[-i,])
  det1i = log(det(mtcov1i))
  det2i = log(det(mtcov2i))
  mahा[i,1] = mahalanobis(pop1[i,], mu1i, matcov1i) - det1i
  mahा[i,2] = mahalanobis(pop2[i,], mu2i, matcov2i) - det2i
}
maha[i+60,1] = mahalanobis(pop1[i,], mu1, matcov1) - det1
maha[i+60,2] = mahalanobis(pop2[i,], mu2, matcov2) - det2

difmaha = mahा[,1] - mahा[,2]
boxplot(difmaha ~ period)

## Vemos que a maioria dos pontos da pop1 possuem distancia de
## Mahalanobis a pop1 menor que a distancia a pop 2 (isto eh,
## difmaha < 0 quando pop1 ==1), enquanto o oposto ocorre
## com os pontos da pop2.

# binaria indicando quem seria classificado em pop2
class2 = difmaha > 0

```

```
tabmaha = table(class2, period)
tabmaha

# proporcao de acerto global
sum(diag(tabmaha)) / sum(tabmaha)
# acerta 65.8% dos dados, independentemente de onde venham

# propocao de acerto dentro de cada populacao, estimativa de
#  $P(\text{classif em } k \mid \text{pertence a } k)$ 
prop.table(table(class2, period), margin = 2)
# Acerta 61.7% para x vindo da pop1 e acerta 70% para x vindo de pop2

# A probab reversa:  $P(\text{pertence a } k \mid \text{classif em } k)$ 
prop.table(table(class2, period), margin = 1)
# 67.3% dos classificados na pop 1 sao, de fato, da pop1
# 64.6% dos classificados na pop 2 sao, de fato, da pop2
```

---

# Capítulo 10

## Iterated Expectation



1. Suppose that  $X$  and  $Y$  are independent random variables. Prove that

$$\mathbb{V}(XY) = \sigma_X^2 \sigma_Y^2 + \mu_X^2 \sigma_Y^2 + \mu_Y^2 \sigma_X^2$$

**Solução:** We have

$$\begin{aligned}\mathbb{V}(XY) &= \mathbb{E}(\mathbb{V}(XY | X)) + \mathbb{V}(\mathbb{E}(XY | X)) \\ &= \mathbb{E}(X^2 \mathbb{V}(Y | X)) + \mathbb{V}(X \mathbb{E}(Y | X)) \\ &= \mathbb{E}(X^2 \sigma_Y^2) + \mathbb{V}(X \mu_Y) \\ &= \sigma_Y^2 \mathbb{E}(X^2) + \mu_Y^2 \mathbb{V}(X) \\ &= \sigma_Y^2 (\sigma_X^2 + \mu_X^2) + \mu_Y^2 \sigma_X^2 \\ &= \sigma_Y^2 \sigma_X^2 + \mu_X^2 \sigma_Y^2 + \mu_Y^2 \sigma_X^2\end{aligned}$$

Note that the  $\mathbb{V}(XY) = \sigma_Y^2 \sigma_X^2$  when  $\mu_X = \mu_Y = 0$ .

---

2. The variance of a random variable  $Y$  can be decomposed into two parts:

$$\mathbb{V}(Y) = \mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X)) + \mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X))$$

Consider the i.i.d. samples of the vector  $(X, Y)$  in Figure 10.1 representing six different joint distributions  $f(x, y)$ . Without doing any calculations, tell which of these six distributions have  $\mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X))$  substantially larger than  $\mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X))$ . That is, in which cases do we have the first component dominating the overall  $\mathbb{V}(Y)$ ? Verify in which cases we have the opposite inequality, and when we have the two terms approximately equal.

**Solução:** Considering the plot in position  $(i, j)$  in the Figure, we have:

- $\mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X)) >> \mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X))$ : plots in (1, 3); (2, 1); (2, 3)
- $\mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X)) << \mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X))$ : plots in (1, 1); (2, 1); (2, 2)

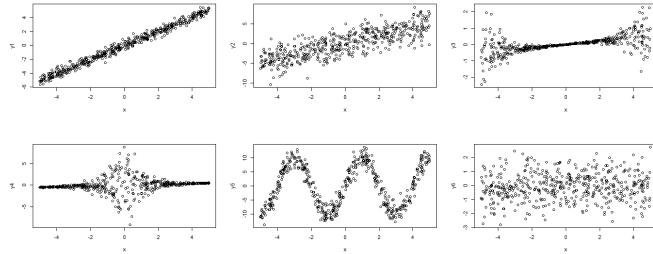


Figura 10.1: Samples from 6 different joint distributions  $f(x, y)$ . In each of them, compare the relative sizes of  $\mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X))$  and  $\mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X))$ .

3. The table below shows the joint distribution of the discrete random vector  $(X, Y)$ .

	$x = 0$	$x = 1$	$x = 2$
$y = 0$	0.1	0.2	0.20
$y = 1$	0.1	0.05	0.25
$y = 2$	0.05	0.0	0.05

- Obtain the marginal distribution of the variables  $Y$  and  $X$ .
- Using the marginal distribution of  $Y$ , obtain  $\mathbb{E}(Y)$  and  $\mathbb{V}(Y)$ .
- Obtain the three conditional distributions  $(Y|X = x)$ . That is, find conditional distributions  $(Y|X = 0)$ ,  $(Y|X = 1)$ , and  $(Y|X = 2)$ .
- Obtain the three values  $\mathbb{E}(Y|X = x)$  for  $x = 0, 1, 2$ .
- $\mathbb{E}(Y|X)$  is a random variable. Provide the two lists that describes its distribution.
- Find  $\mathbb{E}(Y)$  again by using  $\mathbb{E}[\mathbb{E}(Y|X)]$ .
- Likewise, find again  $\mathbb{V}(Y)$  by using  $\mathbb{E}[\mathbb{V}(Y|X)] + \mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|X)]$ .

4. Write a code to simulate  $n = 1000$  values of the random vector  $(X, Y)$ . It has a joint distribution specified in two steps. First,  $X \sim U(0, 10)$ . Next,  $(Y|X = x) \sim U(x/3, 2x)$ .

- What is the set of possible values for  $Y$ ? That is, what is the support set of the continuous random variable  $Y$ ?
- Execute your code and plot the generated sample.
- Make a histogram of the simulated  $Y$  values. Does it look like a uniform distribution? If not, how is the density spread over the support set? Which region has higher density?
- Based on the simulated sample, estimate  $\mathbb{E}(Y)$  and  $\mathbb{V}(Y)$ .

5. Considering the random vector  $(X, Y)$  of the previous exercise:

- Obtain the theoretical expressions for  $\mathbb{E}(Y|X = x)$  and  $\mathbb{V}(Y|X = x)$ .
- Visualize these expressions in your plot with the generated sample.
- Use the theoretical expressions above to obtain  $\mathbb{E}(Y)$  using  $\mathbb{E}[\mathbb{E}(Y|X)]$ .

- Obtain  $\mathbb{V}(Y)$  calculating  $\mathbb{E}[\mathbb{V}(Y|X)] + \mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|X)]$ .
  - Compare these exact values for  $\mathbb{E}(Y)$  and  $\mathbb{V}(Y)$  with the estimated values you obtained in the previous exercise based on your sample.
- 

6. A source transmits signals, and a single signal requires a random number  $N$  of time units to be transmitted. Let  $N$  be a geometric random variable with  $\mathbb{P}(N = j) = a(1 - a)^{j-1}$  for  $j = 1, 2, \dots$  and  $a \in (0, 1)$ . This source also receives messages, and they arrive randomly. During a time unit, at most one message arrives with probability  $p$  and no new message arrives with probability  $1 - p$ . The possible arrival of a message in a given time unit is independent of the possible arrival in the other time intervals. Let  $K$  be the number of new messages that arrived during the transmission of a single signal. Find  $\mathbb{E}(K)$  and  $\mathbb{V}(K)$  using iterated expectation.

**Solução:** Given  $N = n$ , we have  $(K|N = n) \sim \text{Bin}(n, p)$ . Therefore,  $\mathbb{E}(K|N = n) = np$  and  $\mathbb{V}(K|N = n) = np(1 - p)$ . We have then

$$\mathbb{E}(K) = \mathbb{E}[\mathbb{E}(K|N)] = \mathbb{E}[Np] = \frac{p}{a}$$

and

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(K) &= \mathbb{E}[\mathbb{V}(K|N)] + \mathbb{V}[\mathbb{E}(K|N)] \\ &= \mathbb{E}[Np(1 - p)] + \mathbb{V}[Np] \\ &= p(1 - p)\mathbb{E}[N] + p^2\mathbb{V}[N] \\ &= p(1 - p)\frac{1}{a} + p^2\frac{1 - a}{a^2} \\ &= \frac{ap(1 - p) + p^2(1 - a)}{a^2} \end{aligned}$$


---

7. Someone argued that intuitively we can obtain  $\mathbb{V}(Y)$  in two steps. First, obtain  $v(x) = \mathbb{V}(Y|X = x)$  for each possible value of  $X$ . Next, average these  $v(x)$  values by taking their weighted average using the probabilities associated with  $X$  as weights. That is, take

$$\mathbb{E}[v(X)] = \mathbb{E}[\mathbb{V}(Y|X)] = \int \mathbb{V}(Y|X = x)f_X(x)dx = \int v(x)f_X(x)dx$$

However, this is not correct. Show that, in fact,  $\mathbb{V}(Y) \geq \mathbb{E}[\mathbb{V}(Y|X)]$  for any two random variables  $X$  and  $Y$ .

**Solução:** We already learned that

$$\mathbb{V}(Y) = \mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X)) + \mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X)) \geq \mathbb{E}(\mathbb{V}(Y | X))$$

because, being a variance, we must have  $\mathbb{V}(\mathbb{E}(Y | X)) \geq 0$

---

8. Some of the following are *VALID* conditional expectations, some are not. Which ones are valid?

- $\mathbb{E}[Y|X] = 1$
- $\mathbb{E}[Y|X] = X$
- $\mathbb{E}[Y|X] = Y$
- $\mathbb{E}[Y|X] = X * \cos(X)$
- $\mathbb{E}[Y|X] = XY$

**Solução:**

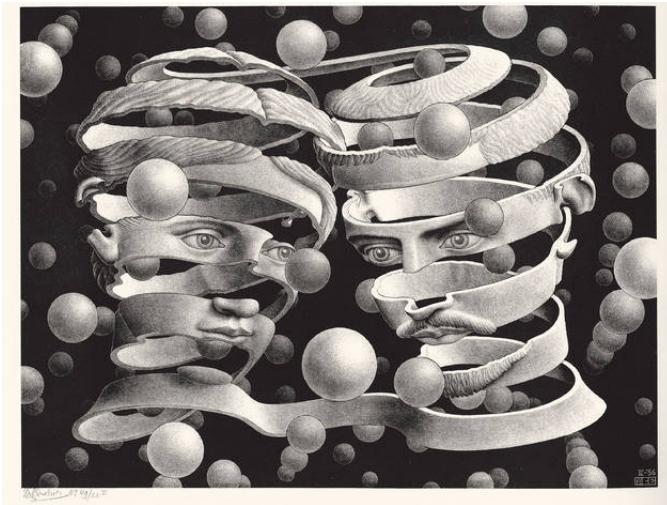
- $\mathbb{E}[Y|X] = 1$ : valid. The conditional expectation of  $Y$  is constant and equal to 1, it does not depend on  $X$ .
- $\mathbb{E}[Y|X] = X$ : valid. The conditional distribution of  $Y$  values varies around  $X$ .
- $\mathbb{E}[Y|X] = Y$ : invalid. The conditional expectation of  $Y$  must be a function of  $X$ , not of  $Y$ .
- $\mathbb{E}[Y|X] = X * \cos(X)$ : valid, a function of  $X$ .
- $\mathbb{E}[Y|X] = XY$ : invalid. It can not depend on  $Y$ .

9. Some of the following are *VALID* conditional variances, some are not. Which ones are valid? Suppose that  $X \sim U(-1, 1)$ .

- $\mathbb{V}[Y|X] = 1$
- $\mathbb{V}[Y|X] = X$
- $\mathbb{V}[Y|X] = Y$
- $\mathbb{V}[Y|X] = X * \cos(X)$
- $\mathbb{V}[Y|X] = XY$

# Capítulo 11

## Teoremas Limite: LGN e TCL



Os exercícios abaixo são do curso de Patrick Breheny na Univ de Kentucky, o autor do material que usei em sala de aula: <https://myweb.uiowa.edu/pbreheny/4120/s20/notes.html>. Veja as notas de aula desse professor sobre o TCL (uns 12 slides apenas). Por favor, leia o material para entender algumas das questões. São exercícios básicos, que exigem simples manipulação da distribuição normal. O fato fundamental que precisa ser usado várias vezes é o seguinte: se  $\bar{X} \sim N(\mu, \sigma^2/n)$  então  $\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim N(0, 1)$ . Portanto, para qualquer valor  $a$ , temos

$$\mathbb{P}(\bar{X} > a) = \mathbb{P}\left(\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} > \frac{a - \mu}{\sigma/\sqrt{n}}\right) \approx \mathbb{P}\left(N(0, 1) > \frac{a - \mu}{\sigma/\sqrt{n}}\right) = 1 - \text{pnorm}(b)$$

onde  $b = \sqrt{n}(a - \mu)/\sigma$ .

- 
- (a) Você quer selecionar uma amostra para estimar a porcentagem  $\theta$  de pessoas que vai votar num candidato  $X$ . Imagine que a resposta é uma v.a.  $X$  de Bernoulli com valores 1 e 0 (vai e não vai votar, respectivamente) e a probabilidade de sucesso é  $\theta$ . As respostas de  $n$  indivíduos serão  $X_1, X_2, \dots, X_n$  e você vai estimar  $\theta$  usando  $\hat{\theta} = (X_1 + \dots + X_n)/n$ , a proporção amostral. Se você assumir que as respostas são variáveis aleatórias i.i.d., determine o tamanho  $n$  da amostra necessário para que o erro de estimação  $|\hat{\theta} - \theta|$  seja menor que 0.02 com probabilidade 0.99. Para isto, assuma que você sabe que seu candidato está estacionado entre 15% e 35% dos eleitores (baseado em outras pesquisas mais antigas). Esta é uma faixa de variação enorme, muito pouco precisa, mas que você está bem seguro de que ela contém a verdadeira proporção de eleitores que votam no candidato em questão.

**Solução:** Queremos encontrar  $n$  de forma que a probabilidade de ocorrer o evento  $|\hat{\theta} - \theta| < 0.02$  seja 0.99. Isto é, queremos  $n$  de forma que  $\mathbb{P}(|\hat{\theta} - \theta| < 0.02) < 0.99$ . Veja que  $\hat{\theta} = (X_1 + \dots + X_n)/n$  e portanto podemos usar o TCL. Temos  $X_i \sim \text{Bernoulli}(\theta)$  (binária) independentes, com  $\mathbb{E}(X_i) = \theta$  e  $\mathbb{V}(X_i) = \theta(1 - \theta)$ . Assim, pelo TCL,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(|\hat{\theta} - \theta| < 0.02) &= \mathbb{P}(|\bar{X} - \theta| < 0.02) \\ &= \mathbb{P}(-0.02 < \bar{X} - \theta < 0.02) \\ &= \mathbb{P}\left(-\sqrt{n} \frac{0.02}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} < \sqrt{n} \frac{\bar{X} - \theta}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} < \sqrt{n} \frac{0.02}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}}\right) \\ &\approx \mathbb{P}\left(-\sqrt{n} \frac{0.02}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} < N(0, 1) < \sqrt{n} \frac{0.02}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}}\right)\end{aligned}$$

Sabemos que, no caso de uma v.a.  $N(0, 1)$ , o valor  $a$  tal que  $\mathbb{P}(-a < N(0, 1) < a) = 0.99$  é igual  $a = 2.58$  (pois, em  $R$ , o comando `qnorm(0.01/2)` retorna  $-2.575829$ ). Assim, devemos ter  $0.02\sqrt{n}/\sqrt{\theta(1 - \theta)} = 2.58$ . O valor de  $\theta$  é desconhecido mas sabemos que ele está no intervalo  $(0.15, 0.35)$ . Como  $\theta(1 - \theta)$  é crescente com  $\theta$  nesta região (cheque isto fazendo o gráfico desta função parabólica no intervalo  $(0, 1)$ ), tomamos o pior caso, em que  $\theta = 0.35$ , para calcular  $n$ . Queremos  $0.02\sqrt{n}/\sqrt{0.35(1 - 0.35)} = 2.58$ , o que implica em  $n = 3785.827$ . Basta tomar então uma amostra de tamanho 3786 para garantir o resultado.

- 
- (b) No problema acima, usando uma amostra de tamanho  $n = 500$ , determine um intervalo da forma  $I = (\hat{\theta} - c, \hat{\theta} + c)$  tal que a probabilidade  $\mathbb{P}(\hat{\theta} - c \leq \theta \leq \hat{\theta} + c)$  seja aproximadamente igual ou maior que 0.95. Este tipo de intervalo é chamado de intervalo de confiança.

**Solução:** Um ponto fundamental é perceber que

$$\hat{\theta} - c \leq \theta \leq \hat{\theta} + c \iff -c \leq \hat{\theta} - \theta \leq c \iff |\hat{\theta} - \theta| \leq c$$

Assim, com  $\hat{\theta} = (X_1 + \dots + X_{500})/500$ , queremos encontrar  $c$  tal que

$$\begin{aligned}0.95 &= \mathbb{P}(-c \leq \hat{\theta} - \theta \leq c) \\ &= \mathbb{P}\left(-\sqrt{500} \frac{c}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} \leq \sqrt{500} \frac{\hat{\theta} - \theta}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} \leq \sqrt{500} \frac{c}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}}\right) \\ &\approx \mathbb{P}\left(-\sqrt{500} \frac{c}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}} \leq N(0, 1) \leq \sqrt{500} \frac{c}{\sqrt{\theta(1 - \theta)}}\right)\end{aligned}$$

Mas, no caso de uma  $N(0, 1)$ , temos  $\mathbb{P}(-1.96 \leq N(0, 1) \leq 1.96) = 0.95$  (verifique digitando `qnorm(0.05/2)`). Assim, devemos fazer  $c\sqrt{500}/\sqrt{\theta(1 - \theta)} = 1.96$ . Como  $\theta$  é desconhecido (mas dentro do intervalo  $(0.15, 0.35)$ ), pegamos o pior caso ( $\theta = 0.35$ ) para obter  $c\sqrt{500}/\sqrt{0.35 \times 0.65} = 1.96$  o que implica em  $c = 0.0418$ .

- 
- (c) An article in the New England Journal of Medicine reported that among adults living in the United States, the average level of albumin in cerebrospinal fluid is 29.5 mg/dl, with a standard deviation of 9.25 mg/dl. We are going to select a sample of size 20 from this population.
- How does the variability of our sample mean compare with the variability of albumin levels in the population?
  - What is the probability that our sample mean will be greater than 33 mg/dl?
  - What is the probability that our sample mean will lie between 29 and 31 mg/dl?
  - What two values will contain the middle 50

- (d) The unemployment rate  $\theta$  is the proportion of people actively looking for jobs and not finding them. Assume that it is known for sure that this rate is some number between 0.03 and 0.08 (or between 3% and 8%). Find the sample size need to estimate this rate  $\theta$  in such a way that the estimation error is below 0.005 with probability 0.95. That is, we want an estimate  $\hat{\theta}$  such that  $|\hat{\theta} - \theta| < 0.005$  with probability 0.95.
- (e) According to an article in the American Journal of Public Health, the distribution of birth weights in a certain population is approximately normal with mean 3500 grams and standard deviation 430 grams.
- What is the probability that a newborn's weight will be less than 3200 grams?
  - Suppose we take a sample of 9 newborns. What is the probability that their average weight will be less than 3200 grams?
  - In the aforementioned sample of 9 newborns, how many newborns would you expect to weigh under 3200 grams?
  - What is the probability that our sample of 9 newborns will contain exactly 3 newborns who weigh less than 3200 grams?
  - Suppose we take 5 samples of 9 newborns. What is the probability that at least one of the sample averages will be less than 3200 grams?
  - How large must our sample be in order to ensure a 95% probability that the sample mean will be within 50 grams of the population mean?

- (f) In a 2006 study published in The New England Journal of Medicine, 78 pairs of patients with Parkinson's disease were randomly assigned to receive *treatment* (which consisted of deep-brain stimulation of a region of the brain affected by the disease) or *control* (which consisted of taking a prescription drug). The pairs were composed by individuals similar with respect to several risk factors such as sex, age, occupation, etc. This ensured that, within each pair, we could consider the individuals more or less coming from the same population except by the possible effect of the treatment.

The researchers found that in 50 of 78 pairs, the patients who received deep-brain stimulation had improved more than their partner in the control group. We are interested in conducting a hypothesis test of these findings.

For each pair, define the random variable

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{if treatment improves more} \\ 0 & \text{if control improves more} \end{cases}$$

*The key rationale is: IF INDEED THE TREATMENT HAS NO EFFECT AT ALL, the probability that the treatment individual is 1/2.* Let us call this hypothesis or model the *null hypothesis*, represented by  $H_0$ .

- Conduct a z-test of the null hypothesis that deep-brain stimulation has no effect on the disease by calculating the probability that you can observe something as large as 50 in 78 successes when indeed the "coin" has probability 1/2. That is, use the TCL to calculate approximately

$$\mathbb{P}(X_1 + \dots + X_{78} \geq 50 \mid H_0 \text{ is true})$$

- Construct a 95% confidence level for the proportion of patients who would do better on deep-brain stimulation than control (see the slides).

- (g) An irregularly shaped object of unknown area A is located in the unit square  $0 \leq x \leq 1$  and  $0 \leq y \leq 1$ . Consider a random point distributed uniformly over the square. Let  $Z = 1$  if

the point lies inside the object and  $Z = 1$  otherwise. Show that  $E[Z] = A$ . How could  $A$  be estimated from a sequence of  $n$  independent points uniformly distributed on the square?

Hint 1: Imagine this is actually a coin tossing experiment with unknown probability of getting Head, that is, the coin lands on  $H$  if the point is inside the object and on  $T$  otherwise. How will you estimate the probability of getting  $H$ ?

Hint 2: Solution in <http://bit.ly/1T206Rf>

- (h) Suppose that a basketball player can score on a particular shot with probability  $p = 0.3$ . Use the central limit theorem to find the approximate distribution of  $S$ , the number of successes out of 25 independent shots. Find the approximate probabilities that  $S$  is less than or equal to 5, 7, 9, and 11 and compare these to the exact probabilities.

Hint 1 : Let  $X_1, X_2, \dots, X_{25}$  be the indicator random variables of the 25 shots, that is,  $X_i = 1$  if the player scores on the  $i$ -th shot and  $X_i = 0$ , otherwise.

Hint 2: Solution in <http://bit.ly/1T206Rf>

- (i) The amount of mineral water consumed by a person per day on the job is normally distributed with mean 19 ounces and standard deviation 5 ounces. A company supplies its employees with 2000 ounces of mineral water daily. The company has 100 employees.

- Find the probability that the mineral water supplied by the company will not satisfy the water demanded by its employees.
- Find the probability that in the next 4 days the company will not satisfy the water demanded by its employees on at least 1 of these 4 days. Assume that the amount of mineral water consumed by the employees of the company is independent from day to day.
- Find the probability that during the next year (365 days) the company will not satisfy the water demanded by its employees on more than 15 days.

- (j) Supply responses true or false with an explanation to each of the following:

- The probability that the average of 20 values will be within 0.4 standard deviations of the population mean exceeds the probability that the average of 40 values will be within 0.4 standard deviations of the population mean.
- $\mathbb{P}(\bar{X} \geq 4)$  is larger than  $\mathbb{P}(X \geq 4)$  if  $X \sim N(8, \sigma)$  and  $\bar{X}$  is the sample mean of  $n > 1$  instances of  $X$ .
- If  $\bar{X}$  is the average of  $n$  values sampled from a normal distribution with mean  $\mu$  and if  $c$  is any positive number, then  $\mathbb{P}(\mu - c \leq \bar{X} \leq \mu + c)$  decreases as  $n$  gets large.

---

Os próximos exercícios são todos copiados diretamente do livro *Introduction to Probability*, de Charles M. Grinstead e J. Laurie Snell.

- (a) A researcher wants her sample mean to be twice as accurate; how much does she have to increase her sample size by?
- 
- (b) An article in the New England Journal of Medicine reported that among adults living in the United States, the average level of albumin in cerebrospinal fluid is 29.5 mg/dl, with a standard deviation of 9.25 mg/dl. We are going to select a sample of size 20 from this population.
- How does the variability of our sample mean compare with the variability of albumin levels in the population?
  - What is the probability that our sample mean will be greater than 33 mg/dl?

- What is the probability that our sample mean will lie between 29 and 31 mg/dl?
  - What two values will contain the middle 50
- 

- (c) The unemployment rate  $\theta$  is the proportion of people actively looking for jobs and not finding them. Assume that it is known for sure that this rate is some number between 0.03 and 0.08 (or between 3% and 8%). Find the sample size need to estimate this rate  $\theta$  in such a way that the estimation error is below 0.005 with probability 0.95. That is, we want an estimate  $\hat{\theta}$  such that  $|\hat{\theta} - \theta| < 0.005$  with probability 0.95.
- 
- (d) According to an article in the American Journal of Public Health, the distribution of birth weights in a certain population is approximately normal with mean 3500 grams and standard deviation 430 grams.
- What is the probability that a newborn's weight will be less than 3200 grams?
  - Suppose we take a sample of 9 newborns. What is the probability that their average weight will be less than 3200 grams?
  - In the aforementioned sample of 9 newborns, how many newborns would you expect to weigh under 3200 grams?
  - What is the probability that our sample of 9 newborns will contain exactly 3 newborns who weigh less than 3200 grams?
  - Suppose we take 5 samples of 9 newborns. What is the probability that at least one of the sample averages will be less than 3200 grams?
  - How large must our sample be in order to ensure a 95% probability that the sample mean will be within 50 grams of the population mean?
- 

- (e) In a 2006 study published in The New England Journal of Medicine, 78 pairs of patients with Parkinson's disease were randomly assigned to receive *treatment* (which consisted of deep-brain stimulation of a region of the brain affected by the disease) or *control* (which consisted of taking a prescription drug). The pairs were composed by individuals similar with respect to several risk factors such as sex, age, occupation, etc. This ensured that, within each pair, we could consider the individuals more or less coming from the same population except by the possible effect of the treatment.

The researchers found that in 50 of 78 pairs, the patients who received deep-brain stimulation had improved more than their partner in the control group. We are interested in conducting a hypothesis test of these findings.

For each pair, define the random variable

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{if treatment improves more} \\ 0 & \text{if control improves more} \end{cases}$$

*The key rationale is: IF INDEED THE TREATMENT HAS NO EFFECT AT ALL, the probability that the treatment individual is 1/2.* Let us call this hypothesis or model the *null hypothesis*, represented by  $H_0$ .

- Conduct a z-test of the null hypothesis that deep-brain stimulation has no effect on the disease by calculating the probability that you can observe something as large as 50 in 78 successes when indeed the "coin" has probability 1/2. That is, use the TCL to calculate approximately

$$\mathbb{P}(X_1 + \dots + X_{78} \geq 50 \mid H_0 \text{ is true})$$

- Construct a 95% confidence level for the proportion of patients who would do better on deep-brain stimulation than control (see the slides).
- 
- (f) An irregularly shaped object of unknown area  $A$  is located in the unit square  $0 \leq x \leq 1$  and  $0 \leq y \leq 1$ . Consider a random point distributed uniformly over the square. Let  $Z = 1$  if the point lies inside the object and  $Z = 0$  otherwise. Show that  $E[Z] = A$ . How could  $A$  be estimated from a sequence of  $n$  independent points uniformly distributed on the square?
- Hint 1: Imagine this is actually a coin tossing experiment with unknown probability of getting Head, that is, the coin land on  $H$  if the point is inside the object and on  $T$  otherwise. How will you estimate the probability of getting  $H$ ?
- Hint 2: Solution in <http://bit.ly/1T206Rf>
- 
- (g) Suppose that a basketball player can score on a particular shot with probability  $p = 0.3$ . Use the central limit theorem to find the approximate distribution of  $S$ , the number of successes out of 25 independent shots. Find the approximate probabilities that  $S$  is less than or equal to 5, 7, 9, and 11 and compare these to the exact probabilities.
- Hint 1 : Let  $X_1, X_2, \dots, X_{25}$  be the indicator random variables of the 25 shots, that is,  $X_i = 1$  if the player scores on the  $i$ -th shot and  $X_i = 0$ , otherwise.
- Hint 2: Solution in <http://bit.ly/1T206Rf>
- 
- (h) The amount of mineral water consumed by a person per day on the job is normally distributed with mean 19 ounces and standard deviation 5 ounces. A company supplies its employees with 2000 ounces of mineral water daily. The company has 100 employees.
- Find the probability that the mineral water supplied by the company will not satisfy the water demanded by its employees.
  - Find the probability that in the next 4 days the company will not satisfy the water demanded by its employees on at least 1 of these 4 days. Assume that the amount of mineral water consumed by the employees of the company is independent from day to day.
  - Find the probability that during the next year (365 days) the company will not satisfy the water demanded by its employees on more than 15 days.
- 
- (i) Supply responses true or false with an explanation to each of the following:
- The probability that the average of 20 values will be within 0.4 standard deviations of the population mean exceeds the probability that the average of 40 values will be within 0.4 standard deviations of the population mean.
  - $\mathbb{P}(\bar{X} \geq 4)$  is larger than  $\mathbb{P}(X \geq 4)$  if  $X \sim N(8, \sigma)$  and  $\bar{X}$  is the sample mean of  $n > 1$  instances of  $X$ .
  - If  $\bar{X}$  is the average of  $n$  values sampled from a normal distribution with mean  $\mu$  and if  $c$  is any positive number, then  $\mathbb{P}(\mu - c \leq \bar{X} \leq \mu + c)$  decreases as  $n$  gets large.
- 
- (j) A fair coin is tossed 100 times. The expected number of heads is 50, and the standard deviation for the number of heads is  $(100 \cdot 1/2 \cdot 1/2)^{1/2} = 5$ . What does Chebyshev's Inequality tell you about the probability that the number of heads that turn up deviates from the expected number 50 by three or more standard deviations (i.e., by at least 15)?
-

- (k) Write a program that uses the function  $\text{binomial}(n, p, x)$  to compute the exact probability that you estimated in Exercise ???. Compare the two results.
- 

- (l) Write a program to toss a coin 10,000 times. Let  $S_n$  be the number of heads in the first  $n$  tosses. Have your program print out, after every 1000 tosses,  $S_n - n/2$ . On the basis of this simulation, is it correct to say that you can expect heads about half of the time when you toss a coin a large number of times?
- 

- (m) A 1-dollar bet on craps has an expected winning of  $-.0141$ . What does the Law of Large Numbers say about your winnings if you make a large number of 1-dollar bets at the craps table? Does it assure you that your losses will be small? Does it assure you that if  $n$  is very large you will lose?
- 

- (n) Let  $X$  be a random variable with  $E(X) = 0$  and  $V(X) = 1$ . What integer value  $k$  will assure us that  $P(|X| \geq k) \leq .01$ ?
- 

- (o) Let  $S_n$  be the number of successes in  $n$  Bernoulli trials with probability  $p$  for success on each trial. Show, using Chebyshev's Inequality, that for any  $\epsilon > 0$

$$P\left(\left|\frac{S_n}{n} - p\right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{p(1-p)}{n\epsilon^2}.$$

---

- (p) Find the maximum possible value for  $p(1-p)$  if  $0 < p < 1$ . Using this result and Exercise ??, show that the estimate

$$P\left(\left|\frac{S_n}{n} - p\right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{1}{4n\epsilon^2}$$

is valid for any  $p$ .

---

- (q) A fair coin is tossed a large number of times. Does the Law of Large Numbers assure us that, if  $n$  is large enough, with probability  $> .99$  the number of heads that turn up will not deviate from  $n/2$  by more than 100?
- 

- (r) In Exercise ??., you showed that, for the hat check problem, the number  $S_n$  of people who get their own hats back has  $E(S_n) = V(S_n) = 1$ . Using Chebyshev's Inequality, show that  $P(S_n \geq 11) \leq .01$  for any  $n \geq 11$ .
- 

- (s) Let  $X$  by any random variable which takes on values  $0, 1, 2, \dots, n$  and has  $E(X) = V(X) = 1$ . Show that, for any positive integer  $k$ ,

$$P(X \geq k+1) \leq \frac{1}{k^2}.$$

---

- (t) We have two coins: one is a fair coin and the other is a coin that produces heads with probability  $3/4$ . One of the two coins is picked at random, and this coin is tossed  $n$  times. Let  $S_n$  be the number of heads that turns up in these  $n$  tosses. Does the Law of Large Numbers allow us to predict the proportion of heads that will turn up in the long run? After we have observed a large number of tosses, can we tell which coin was chosen? How many tosses suffice to make us 95 percent sure?
-

- (u) (Chebyshev<sup>1</sup>) Assume that  $X_1, X_2, \dots, X_n$  are independent random variables with possibly different distributions and let  $S_n$  be their sum. Let  $m_k = E(X_k)$ ,  $\sigma_k^2 = V(X_k)$ , and  $M_n = m_1 + m_2 + \dots + m_n$ . Assume that  $\sigma_k^2 < R$  for all  $k$ . Prove that, for any  $\epsilon > 0$ ,

$$P\left(\left|\frac{S_n}{n} - \frac{M_n}{n}\right| < \epsilon\right) \rightarrow 1$$

as  $n \rightarrow \infty$ .

- 
- (v) A fair coin is tossed repeatedly. Before each toss, you are allowed to decide whether to bet on the outcome. Can you describe a betting system with infinitely many bets which will enable you, in the long run, to win more than half of your bets? (Note that we are disallowing a betting system that says to bet until you are ahead, then quit.) Write a computer program that implements this betting system. As stated above, your program must decide whether to bet on a particular outcome before that outcome is determined. For example, you might select only outcomes that come after there have been three tails in a row. See if you can get more than 50% heads by your “system.”

- 
- (w) Prove the following analogue of Chebyshev’s Inequality:

$$P(|X - E(X)| \geq \epsilon) \leq \frac{1}{\epsilon} E(|X - E(X)|) .$$

- 
- (x) We have proved a theorem often called the “Weak Law of Large Numbers.” Most people’s intuition and our computer simulations suggest that, if we toss a coin a sequence of times, the proportion of heads will really approach  $1/2$ ; that is, if  $S_n$  is the number of heads in  $n$  times, then we will have

$$A_n = \frac{S_n}{n} \rightarrow \frac{1}{2}$$

as  $n \rightarrow \infty$ . Of course, we cannot be sure of this since we are not able to toss the coin an infinite number of times, and, if we could, the coin could come up heads every time. However, the “Strong Law of Large Numbers,” proved in more advanced courses, states that

$$P\left(\frac{S_n}{n} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = 1 .$$

Describe a sample space  $\Omega$  that would make it possible for us to talk about the event

$$E = \left\{ \omega : \frac{S_n}{n} \rightarrow \frac{1}{2} \right\} .$$

Could we assign the equiprobable measure to this space?

- 
- (y) In this exercise, we shall construct an example of a sequence of random variables that satisfies the weak law of large numbers, but not the strong law. The distribution of  $X_i$  will have to depend on  $i$ , because otherwise both laws would be satisfied. (This problem was communicated to us by David Maslen.)

Suppose we have an infinite sequence of mutually independent events  $A_1, A_2, \dots$ . Let  $a_i = P(A_i)$ , and let  $r$  be a positive integer.

---

<sup>1</sup>P. L. Chebyshev, “On Mean Values,” *J. Math. Pure. Appl.*, vol. 12 (1867), pp. 177–184.

- i. Find an expression of the probability that none of the  $A_i$  with  $i > r$  occur.
- ii. Use the fact that  $x - 1 \leq e^{-x}$  to show that

$$P(\text{No } A_i \text{ with } i > r \text{ occurs}) \leq e^{-\sum_{i=r}^{\infty} a_i}$$

- iii. (The first Borel-Cantelli lemma) Prove that if  $\sum_{i=1}^{\infty} a_i$  diverges, then

$$P(\text{infinitely many } A_i \text{ occur}) = 1.$$

Now, let  $X_i$  be a sequence of mutually independent random variables such that for each positive integer  $i \geq 2$ ,

$$P(X_i = i) = \frac{1}{2i \log i}, \quad P(X_i = -i) = \frac{1}{2i \log i}, \quad P(X_i = 0) = 1 - \frac{1}{i \log i}.$$

When  $i = 1$  we let  $X_1 = 0$  with probability 1. As usual we let  $S_n = X_1 + \dots + X_n$ . Note that the mean of each  $X_i$  is 0.

- iv. Find the variance of  $S_n$ .
- v. Show that the sequence  $\langle X_i \rangle$  satisfies the Weak Law of Large Numbers, i.e. prove that for any  $\epsilon > 0$

$$P\left(\left|\frac{S_n}{n}\right| \geq \epsilon\right) \rightarrow 0,$$

as  $n$  tends to infinity.

We now show that  $\{X_i\}$  does not satisfy the Strong Law of Large Numbers. Suppose that  $S_n/n \rightarrow 0$ . Then because

$$\frac{X_n}{n} = \frac{S_n}{n} - \frac{n-1}{n} \frac{S_{n-1}}{n-1},$$

we know that  $X_n/n \rightarrow 0$ . From the definition of limits, we conclude that the inequality  $|X_i| \geq \frac{1}{2}i$  can only be true for finitely many  $i$ .

- vi. Let  $A_i$  be the event  $|X_i| \geq \frac{1}{2}i$ . Find  $P(A_i)$ . Show that  $\sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$  diverges (use the Integral Test).
- vii. Prove that  $A_i$  occurs for infinitely many  $i$ .
- viii. Prove that

$$P\left(\frac{S_n}{n} \rightarrow 0\right) = 0,$$

and hence that the Strong Law of Large Numbers fails for the sequence  $\{X_i\}$ .

- (z) Let us toss a biased coin that comes up heads with probability  $p$  and assume the validity of the Strong Law of Large Numbers as described in Exercise ???. Then, with probability 1,

$$\frac{S_n}{n} \rightarrow p$$

as  $n \rightarrow \infty$ . If  $f(x)$  is a continuous function on the unit interval, then we also have

$$f\left(\frac{S_n}{n}\right) \rightarrow f(p).$$

Finally, we could hope that

$$E\left(f\left(\frac{S_n}{n}\right)\right) \rightarrow E(f(p)) = f(p).$$

Show that, if all this is correct, as in fact it is, we would have proven that any continuous function on the unit interval is a limit of polynomial functions. This is a sketch of a probabilistic proof of an important theorem in mathematics called the *Weierstrass approximation theorem*.

- (a) Let  $X$  be a continuous random variable with mean  $\mu = 10$  and variance  $\sigma^2 = 100/3$ . Using Chebyshev's Inequality, find an upper bound for the following probabilities.
- $P(|X - 10| \geq 2)$ .
  - $P(|X - 10| \geq 5)$ .
  - $P(|X - 10| \geq 9)$ .
  - $P(|X - 10| \geq 20)$ .
- 

- (b) Let  $X$  be a continuous random variable with values uniformly distributed over the interval  $[0, 20]$ .
- Find the mean and variance of  $X$ .
  - Calculate  $P(|X - 10| \geq 2)$ ,  $P(|X - 10| \geq 5)$ ,  $P(|X - 10| \geq 9)$ , and  $P(|X - 10| \geq 20)$  exactly. How do your answers compare with those of Exercise ???. How good is Chebyshev's Inequality in this case?
- 

- (c) Let  $X$  be the random variable of Exercise ??.
- Calculate the function  $f(x) = P(|X - 10| \geq x)$ .
  - Now graph the function  $f(x)$ , and on the same axes, graph the Chebyshev function  $g(x) = 100/(3x^2)$ . Show that  $f(x) \leq g(x)$  for all  $x > 0$ , but that  $g(x)$  is not a very good approximation for  $f(x)$ .
- 
- (d) Let  $X$  be a continuous random variable with values exponentially distributed over  $[0, \infty)$  with parameter  $\lambda = 0.1$ .
- Find the mean and variance of  $X$ .
  - Using Chebyshev's Inequality, find an upper bound for the following probabilities:  $P(|X - 10| \geq 2)$ ,  $P(|X - 10| \geq 5)$ ,  $P(|X - 10| \geq 9)$ , and  $P(|X - 10| \geq 20)$ .
  - Calculate these probabilities exactly, and compare with the bounds in (b).
- 

- (e) Let  $X$  be a continuous random variable with values normally distributed over  $(-\infty, +\infty)$  with mean  $\mu = 0$  and variance  $\sigma^2 = 1$ .
- Using Chebyshev's Inequality, find upper bounds for the following probabilities:  $P(|X| \geq 1)$ ,  $P(|X| \geq 2)$ , and  $P(|X| \geq 3)$ .
  - The area under the normal curve between  $-1$  and  $1$  is  $.6827$ , between  $-2$  and  $2$  is  $.9545$ , and between  $-3$  and  $3$  it is  $.9973$  (see the table in Appendix A). Compare your bounds in (a) with these exact values. How good is Chebyshev's Inequality in this case?
- 

- (f) If  $X$  is normally distributed, with mean  $\mu$  and variance  $\sigma^2$ , find an upper bound for the following probabilities, using Chebyshev's Inequality.
- $P(|X - \mu| \geq \sigma)$ .
  - $P(|X - \mu| \geq 2\sigma)$ .
  - $P(|X - \mu| \geq 3\sigma)$ .
  - $P(|X - \mu| \geq 4\sigma)$ .

Now find the exact value using the program **NormalArea** or the normal table in Appendix A, and compare.

---

- ( ) If  $X$  is a random variable with mean  $\mu \neq 0$  and variance  $\sigma^2$ , define the *relative deviation*  $D$  of  $X$  from its mean by

$$D = \left| \frac{X - \mu}{\mu} \right| .$$

- i. Show that  $P(D \geq a) \leq \sigma^2/(\mu^2 a^2)$ .
  - ii. If  $X$  is the random variable of Exercise ??, find an upper bound for  $P(D \geq .2)$ ,  $P(D \geq .5)$ ,  $P(D \geq .9)$ , and  $P(D \geq 2)$ .
- 

- ( ) Let  $X$  be a continuous random variable and define the *standardized version*  $X^*$  of  $X$  by:

$$X^* = \frac{X - \mu}{\sigma} .$$

- i. Show that  $P(|X^*| \geq a) \leq 1/a^2$ .
  - ii. If  $X$  is the random variable of Exercise ??, find bounds for  $P(|X^*| \geq 2)$ ,  $P(|X^*| \geq 5)$ , and  $P(|X^*| \geq 9)$ .
- 
- i. Suppose a number  $X$  is chosen at random from  $[0, 20]$  with uniform probability. Find a lower bound for the probability that  $X$  lies between 8 and 12, using Chebyshev's Inequality.
  - ii. Now suppose 20 real numbers are chosen independently from  $[0, 20]$  with uniform probability. Find a lower bound for the probability that their average lies between 8 and 12.
  - iii. Now suppose 100 real numbers are chosen independently from  $[0, 20]$ . Find a lower bound for the probability that their average lies between 8 and 12.
- 
- A student's score on a particular calculus final is a random variable with values of  $[0, 100]$ , mean 70, and variance 25.
    - i. Find a lower bound for the probability that the student's score will fall between 65 and 75.
    - ii. If 100 students take the final, find a lower bound for the probability that the class average will fall between 65 and 75.
- 
- The Pilsdorff beer company runs a fleet of trucks along the 100 mile road from Hangtown to Dry Gulch, and maintains a garage halfway in between. Each of the trucks is apt to break down at a point  $X$  miles from Hangtown, where  $X$  is a random variable uniformly distributed over  $[0, 100]$ .
    - i. Find a lower bound for the probability  $P(|X - 50| \leq 10)$ .
    - ii. Suppose that in one bad week, 20 trucks break down. Find a lower bound for the probability  $P(|A_{20} - 50| \leq 10)$ , where  $A_{20}$  is the average of the distances from Hangtown at the time of breakdown.
- 

- A share of common stock in the Pilsdorff beer company has a price  $Y_n$  on the  $n$ th business day of the year. Finn observes that the price change  $X_n = Y_{n+1} - Y_n$  appears to be a random variable with mean  $\mu = 0$  and variance  $\sigma^2 = 1/4$ . If  $Y_1 = 30$ , find a lower bound for the following probabilities, under the assumption that the  $X_n$ 's are mutually independent.
  - i.  $P(25 \leq Y_2 \leq 35)$ .
  - ii.  $P(25 \leq Y_{11} \leq 35)$ .
  - iii.  $P(25 \leq Y_{101} \leq 35)$ .

- 
- () Suppose one hundred numbers  $X_1, X_2, \dots, X_{100}$  are chosen independently at random from  $[0, 20]$ . Let  $S = X_1 + X_2 + \dots + X_{100}$  be the sum,  $A = S/100$  the average, and  $S^* = (S - 1000)/(10/\sqrt{3})$  the standardized sum. Find lower bounds for the probabilities
- i.  $P(|S - 1000| \leq 100)$ .
  - ii.  $P(|A - 10| \leq 1)$ .
  - iii.  $P(|S^*| \leq \sqrt{3})$ .
- 
- () Let  $X$  be a continuous random variable normally distributed on  $(-\infty, +\infty)$  with mean 0 and variance 1. Using the normal table provided in Appendix A, or the program **NormalArea**, find values for the function  $f(x) = P(|X| \geq x)$  as  $x$  increases from 0 to 4.0 in steps of .25. Note that for  $x \geq 0$  the table gives  $NA(0, x) = P(0 \leq X \leq x)$  and thus  $P(|X| \geq x) = 2(.5 - NA(0, x))$ . Plot by hand the graph of  $f(x)$  using these values, and the graph of the Chebyshev function  $g(x) = 1/x^2$ , and compare (see Exercise ??).
- 
- () Repeat Exercise ??, but this time with mean 10 and variance 3. Note that the table in Appendix A presents values for a standard normal variable. Find the standardized version  $X^*$  for  $X$ , find values for  $f^*(x) = P(|X^*| \geq x)$  as in Exercise ??, and then rescale these values for  $f(x) = P(|X - 10| \geq x)$ . Graph and compare this function with the Chebyshev function  $g(x) = 3/x^2$ .
- 
- () Let  $Z = X/Y$  where  $X$  and  $Y$  have normal densities with mean 0 and standard deviation 1. Then it can be shown that  $Z$  has a Cauchy density.
- i. Write a program to illustrate this result by plotting a bar graph of 1000 samples obtained by forming the ratio of two standard normal outcomes. Compare your bar graph with the graph of the Cauchy density. Depending upon which computer language you use, you may or may not need to tell the computer how to simulate a normal random variable. A method for doing this was described in Section ??.
  - ii. We have seen that the Law of Large Numbers does not apply to the Cauchy density (see Example ??). Simulate a large number of experiments with Cauchy density and compute the average of your results. Do these averages seem to be approaching a limit? If so can you explain why this might be?
- 
- () Show that, if  $X \geq 0$ , then  $P(X \geq a) \leq E(X)/a$ .
- 
- () (Lamperti<sup>2</sup>) Let  $X$  be a non-negative random variable. What is the best upper bound you can give for  $P(X \geq a)$  if you know
- i.  $E(X) = 20$ .
  - ii.  $E(X) = 20$  and  $V(X) = 25$ .
  - iii.  $E(X) = 20$ ,  $V(X) = 25$ , and  $X$  is symmetric about its mean.
- () If the cdfs of  $X$  and  $Y$  are identical, two random variables are identically distributed. This does not imply  $X = Y$  which is nonsense. To denote the equality of distribution, we will use notation  $X \sim Y$ .

---

<sup>2</sup>Private communication.

- ( ) If  $S_n = X_1 + X_2 + \dots + X_n$ , where  $X_i$  are identically distributed random variables coming from independent events with  $\mathbb{E}X_i = \mu$  and  $\mathbb{V}X_i = \sigma^2$ .  $X_1, X_2, \dots, X_n$  are usually called i.i.d. random variables. Let

$$Z_n = \frac{S_n - \mathbb{E}S_n}{\sqrt{\mathbb{V}S_n}} = \frac{S_n - n\mu}{\sqrt{n}\sigma}.$$

Then for large  $n$ ,

$$P(Z_n \leq x) \approx \Phi(x),$$

where  $\Phi$  is the cdf for a standard normal distribution. Note

$$P(a \leq Z_n \leq b) \approx \Phi(b) - \Phi(a).$$

- ( ) Problem. Let  $X$  be the number of heads in 40 tossed coins. Find the probability  $X = 20$ .

*Solution.* Note  $X = X_1 + X_2 + \dots + X_{40}$  with  $X_i \sim \text{Bernoulli}(0.5)$ . Note  $\mathbb{E}X = 40 \cdot 0.5, \mathbb{V}X = 40 \cdot 0.5^2$ . Let  $S = \frac{X-20}{\sqrt{10}}$ .

$$P(X = 20) = P(19.5 \leq X \leq 20.5) = \Phi\left(\frac{0.5}{\sqrt{10}}\right) - \Phi\left(-\frac{0.5}{\sqrt{10}}\right) = 2\Phi\left(\frac{0.5}{\sqrt{10}}\right) - 1 = 2 \cdot 0.5636 - 1 = 0.1272.$$

The exact result is  $P(X = 20) = \binom{40}{20} 0.5^{40} = 0.1254$ .

- ( ) Problem. A fair coin is thrown 1000 times. Find the approximate probability that the total number of heads among 1000 tosses will lie between 400 and 600 using the Central Limit Theorem.

*Solution.* Let  $X_i \sim \text{Bernoulli}\left(\frac{1}{2}\right)$ . With notation  $\bar{X} = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n}$ ,  $P(400 \leq \sum_{i=1}^{1000} X_i \leq 600) = P(-0.1 \leq \bar{X} - 0.5 \leq 0.1) = P\left(\frac{-0.1}{\sqrt{10}} \leq \frac{\bar{X} - 0.5}{\sqrt{10}} \leq \frac{0.1}{\sqrt{10}}\right) = 2\Phi\left(\frac{0.2}{\sqrt{10}}\right) - 1 = 0.47$ .

- ( ) Problem. The expected service time for a customer coming through a checkout counter in a retail store is 2 minutes while its variance is 1. (a) Approximate the probability that 100 customers can be served in less than 3 hours of total service time. (b) Find the number of customers that can be served in less than 3 hours with probability 0.9.

*Solution.* (a) Let  $X_i$  be the service time for the  $i$ -th customers.  $S = X_1 + \dots + X_{100}$ .  $\mathbb{E}S = 200, \mathbb{V}S = 100$ . Let  $Z = \frac{S-200}{10}$ . Then

$$P(S \leq 180) = \Phi\left(\frac{180 - 200}{10}\right) = 1 - \Phi(2) = 0.0228$$

. (b) For  $S_n = X_1 + \dots + X_n$ ,  $\mathbb{E}S = 2n, \mathbb{V}S = n$ . Let  $Z = \frac{S_n - 2n}{\sqrt{n}}$ . Then we need  $P(Z \leq \frac{180 - 2n}{\sqrt{n}}) = 0.9$ . From the table  $\Phi(1.28) = 0.9$ . So we need to solve  $180 - 2n = 1.28\sqrt{n}$ .

- ( ) A first simple assumption is that the daily change of a company's stock on the stock market is a random variable with mean 0 and variance  $\sigma^2$ . That is, if  $S_n$  represents the price of the stock on day  $n$  with  $S_0$  given, then

$$S_n = S_{n-1} + X_n, n \geq 1$$

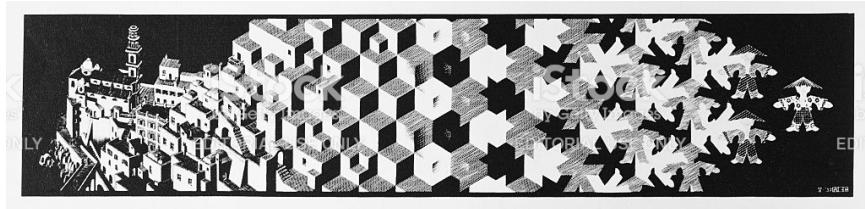
where  $X_1, X_2, \dots$  are independent, identically distributed continuous random variables with mean 0 and variance  $\sigma^2$ . (Note that this is an additive assumption about the change in a stock price. In the binomial tree models, we assumed that a stock's price changes by a *multiplicative factor* up or down. We will have more to say about these two distinct models later.) Suppose that a stock's price today is 100. If  $\sigma^2 = 1$ , what can you say about the probability that after 10 days, the stock's price will be between 95 and 105 on the tenth day?

- ( ) Let  $X_1, X_2, \dots, X_{10}$  be independent Poisson random variables with mean 1. First use the Markov Inequality to get a bound on  $\mathbb{P}[X_1 + \dots + X_{10} > 15]$ . Next use the Central Limit theorem to get a bound on  $\mathbb{P}[X_1 + \dots + X_{10} > 15]$ .

- ( ) Find the moment generating function  $\phi_X(t) = \mathbb{E}[\exp(tX)]$  of the random variable  $X$  which takes values 1 with probability 1/2 and  $-1$  with probability 1/2. Show directly (that is, without using Taylor polynomial approximations) that  $\phi_X(t/\sqrt{n})^n \rightarrow \exp(t^2/2)$ . (Hint: Use L'Hopital's Theorem to evaluate the limit, after taking logarithms of both sides.)

## Capítulo 12

# Regressão Linear



Vamos trabalhar com o modelo de regressão linear supondo  $p - 1$  atributos e  $n$  observações. A matriz de desenho  $\mathbf{X}$  tem dimensão  $n \times p$  e a sua primeira coluna é composta pelo vetor  $n$ -dim de 1's representado por  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)'$ . Vamos representar a matriz de desenho  $\mathbf{X}$  ora por meio de suas colunas, ora por meio de suas linhas.

$$\begin{aligned}\mathbf{Y} &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \\ &= \left( \mathbf{1}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(p-1)} \right) \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}'_1 \\ \mathbf{x}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}'_n \end{bmatrix} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}\end{aligned}$$

A  $j$ -ésima coluna  $\mathbf{x}^{(j)}$  de dimensão  $n \times 1$  representa o conjunto de todos os valores do atributo  $j$  medidos na amostra. A  $i$ -ésima linha  $\mathbf{x}'_i$ , de dimensão  $p \times 1$  representa a observação ou instância da amostra. Note que  $\mathbf{x}_i$  é um vetor coluna. A  $i$ -ésima linha da matriz de desenho  $\mathbf{X}$  é escrita como  $\mathbf{x}'_i$ .

Seja  $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$  a matriz de projeção ortogonal no espaço  $\mathcal{C}(\mathbf{X})$  das combinações lineares das colunas de  $\mathbf{X}$ . O vetor resposta  $\mathbf{Y}$  pode ser decomposto em

$$\mathbf{Y} = \mathbf{HY} + (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{r}$$

onde  $\hat{\mathbf{Y}}$  é o vetor de valores preditos (ou ajustados) pelo modelo para a variável resposta e  $\mathbf{r}$  é o vetor de resíduos.

- (a) O arquivo `aptos.txt` possui dados de apartamentos vendidos no bairro Sion em BH em 2011 obtidos com um coletor em páginas web de uma imobiliária. A primeira coluna é um identificador do anúncio. Use o script R abaixo para fazer uma regressão linear simples de preço versus area. As seguir, faça uma regressão múltipla de preço versus todas as covariáveis.

Use as expressões matriciais derivadas em sala de aula.

**Solução:**

```
setwd("u:/regression") # set the working directory
# Lendo os dados como um dataframe
aptos = read.table("aptosBH.txt", header = T)
attach(aptos)      # attach o dataframe
aptos[1:5,]        # visualizando as 5 1as linhas
par(mfrow=c(2,2))  # tela grafica dividia em 2 x 2
plot(area, preco) # scatter plot de (area_i, preco_i)
plot(quartos, preco)
plot(suites, preco)
plot(vagas, preco)

# Para fazer uma regressao em R, use o comando lm (linear model)
# Mas vamos antes obter a regressao fazendo as operacoes matriciais
# que vimos em sala

# Ajustando um modelo de regressao linear SIMPLES apenas com area
x = as.matrix(cbind(1, aptos[,2])) # matriz de desenho n x 2
b.simples = (solve(t(x) %*% x)) %*% (t(x) %*% preco)
b.simples

# Ajustando um modelo de regressao linear MULTIPLA com 4 covariaveis
x = as.matrix(cbind(1, aptos[,2:5])) # matriz de desenho n x 2
b.all = (solve(t(x) %*% x)) %*% (t(x) %*% preco)
b.all
```

Veja a mudança do valor do coeficiente de área nas duas regressões: o efeito de área em preço depende de quais outras covariáveis estão no modelo. A razão é que as covariáveis são correlacionadas entre si: aptos grandes tendem a ter mais quartos, por exemplo. Parte do efeito de área medido no coeficiente da a regressão simples está capturando também o efeito de números de quartos. Quando quartos entra na regressão, o efeito puro de área diminui.

- 
- (b) Regressão no R é feita usando-se o comando `lm` que implementa uma série de algoritmos numéricos eficientes para lidar com matrizes, incluindo a decomposição QR, a principal técnica para obter o vetor estimado de coeficientes. A sintaxe básica é a seguinte: `lm(y ~ x1 + x2 + x3, data=aptos)` onde  $y$  é a variável que queremos modelar (a variável resposta ou variável dependente) e  $x1$ ,  $x2$  etc. são as covariáveis do modelo. O argumento `data` fornece o nome do `data.frame` ou matriz que contém TODOS os dados ( $y$  e  $x$ ).

```
setwd("u:/ESTATICS") # set the working directory
# Lendo os dados como um dataframe
aptos = read.table("aptosBH.txt", header = T)
lm(preco ~ area+quartos+suites+vagas, data=aptos)$coef
lm(preco ~ area, data=aptos)$coef
```

A saída de `lm` é uma lista (um objeto tipo `list`) que pertence à classe `lm`. A lista possui muitas informações para a análise dos dados e sobre as quais vamos aprender ao longo da disciplina. Podemos extrair informação da lista de diversas formas. Por exemplo:

```

aptos = read.table("aptosBH.txt", header = T)
reg.all = lm(preco ~ area+quartos+suites+vagas, data=aptos) # guardo a lista
class(reg.all) # classe do objeto reg.all
names(reg.all) # nomes dos elementos da lista. Eles sao vetores, matrizes, strings,
reg.all$coef # extraindo o elemento da lista de nome coefficients
summary(reg.all) # saida padronizada de regressao quando o objeto e' da classe lm
reg.all$fitted # vetor dos precos preditos pelo modelo de regressao linear
reg.all$res # vetor dos residuos = Y - Yhat = preco obervado - preco predito

```

- 
- (c) Vamos começar simulando um modelo de regressão linear com UM atributo apenas e estimando o vetor de coeficientes  $\beta = (\beta_0, \beta_1)'$ . A seguir, vamos verificar que o comportamento estatístico do estimador  $\hat{\beta}$  está de acordo com o comportamento estocástico deduzido teoricamente. Como este primeiro exercício envolve apenas um atributo, será simples visualizar os vários resultados. Vamos fixar um modelo de regressão em que CONHECEMOS o vetor de coeficientes

$$\beta = (\beta_0, \beta_1)' = (1, 1.5)' .$$

Vamos usar  $n = 25$  observações com um único atributo,  $x_1$ . A matriz  $\mathbf{X}$  é de dimensão  $n \times p = 25 \times 2$ . A linha  $i$  da matriz  $\mathbf{X}$  é igual a  $\mathbf{x}'_i = (1, x_{i1})$ . O modelo será:

$$Y_i = \mathbf{x}'_i \beta + \varepsilon_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \varepsilon_i = 1 + 1.5 x_{i1} + \varepsilon_i$$

Os erros  $\varepsilon_i$  serão i.i.d.  $N(0, \sigma^2 = 25)$ .

Rode o script abaixo no R:

```

set.seed(0)                                # fixando a semente do gerador aleatorio
x1 = 1:24                                    # coluna com 1o atributo
x1
beta = c(4, 1.5)                            # visualizando x1
X = cbind(1, x1)                            # vetor beta
mu = X %*% beta                            # matriz de desenho X
mu = X %*% beta                            # vetor com E(Y)= X*beta
sigma = 5                                     # vetor epsilon de "erros"
epsilon = rnorm(24, 0, sigma)                # resposta y = X*beta + erros N(0,1)
y = mu + epsilon

plot(x1,y)                                    # scatterplot dos dados
abline(4,1.5, col="blue")                    # reta "verdadeira" beta_0 + beta_1 * x

plot(x1,y, xlim=c(0, max(x1)), ylim=c(0, max(y))) # redesenhando para ver o intercept
abline(4,1.5, col="blue")                    # reta "verdadeira" beta_0 + beta_1 * x
cor(y, x1)                                    # correlacao entre y e x1

sim1 = lm(y ~ x1 )                          # sim1 e' objeto da classe lm com resultados d
is.list(sim1)                                # sim1 e' uma lista
names(sim1)                                  # nomes dos objetos que compoem a lista sim1
summary( sim1 )                            # funcao summary em sim1: info sobre ajuste

plot(x1,y, xlim=c(0, max(x1)), ylim=c(0, max(y))) # redesenhando para ver o intercept
abline(4,1.5, col="blue")                    # reta "verdadeira" beta_0 + beta_1 * x
abline(sim1$coef, col="red")                 # reta ajustada beta_0HAT + beta_1HAT * x usan

```

O último gráfico mostra uma diferença FUNDAMENTAL entre  $\hat{\beta}' = (5.7981, 1.3737)$  e  $\beta' = (4, 1.5)$ : eles não são iguais.  $\hat{\beta}'$  é um vetor que está usando os 24 dados para ESTIMAR o valor verdadeiro de  $\beta'$ . Na prática, não saberemos o valor de  $\beta'$  e é por isto que estamos usando os dados da amostra para inferir sobre seu valor. Olhando a saída de **summary**, veja que

$$\hat{\beta}' = (5.7981, 1.3737) \neq (4, 1.5) = \beta'.$$

O erro de estimação NESTA AMOSTRA PARTICULAR é igual a

$$\hat{\beta}' - \beta' = (5.7981, 1.3737) - (4, 1.5) = (1.7981 - 0.1263)$$

Vamos gerar uma segunda amostra de 24 valores  $y$  com os mesmos  $x$ . Apenas os “erros”  $\epsilon_{i2}$  vão variar. Vamos estimar  $\beta$  novamente com esta segunda amostra.

```
set.seed(1)
epsilon2 = rnorm(24, 0, sigma)           # NOVO vetor epsilon de "erros"
y2 = mu + epsilon2                      # NOVA resposta y = X*beta + NOVOS erros N(0,1)
sim2 = lm(y2 ~ x1)                      # sim2 e' o ajuste dos NOVOS dados.
summary(sim2)
```

Note que a reta estimada com esta segunda amostra é  $4.7559 + 1.4995x$ , diferente da reta original e também diferente da reta estimada com a primeira amostra. Vamos visualizar estas diferentes retas e amostras.

```
plot(x1,y2)                                # scatterplot dos NOVOS dados
abline(4, 1.5, col="blue")                  # reta "verdadeira" beta_0 + beta_1 * x
abline(sim2$coef, col="red")                # NOVA reta ajustada

# plotando os dois conjuntos de pontos
par(mfrow=c(1,2))
plot(x1,y2, main="Dados novos")           # scatterplot dos NOVOS dados
abline(4, 1.5, col="blue")                  # reta "verdadeira" beta_0 + beta_1 * x
abline(sim2$coef, col="red")                # NOVA reta ajustada

plot(x1,y,main="Dados antigos")           # scatterplot dos dados ANTIGOS
abline(4, 1.5, col="blue")                  # reta "verdadeira" E' A MESMA
abline(sim1$coef, col="red")                # reta ajustada com os dados ANTIGOS

# os dois conjuntos de dados num unico plot
par(mfrow=c(1,1))
plot(x1,y2, col="black")                  # scatterplot dos NOVOS dados
points(x1, y, col="red")                  # dados antigos
abline(4, 1.5, col="blue")                # reta "verdadeira" beta_0 + beta_1 * x
abline(sim2$coef, col="black")             # NOVA reta ajustada
abline(sim1$coef, col="red")               # reta ajustada com os dados ANTIGOS
```

Agora temos TRÊS retas disintas: a reta verdadeira que queremos estimar  $\beta_0 + \beta_1 x = 4 + 1.5x$ , a reta estimada com a primeira amostra de 24 dados  $\hat{\beta}_0^{(1)} + \hat{\beta}_1^{(1)} x = 5.798 + 1.374x$  e a reta estimada com a segunda amostra de 24 dados  $\hat{\beta}_0^{(2)} + \hat{\beta}_1^{(2)} x = 4.756 + 1.500x$ . O erro de estimação com esta segunda amostra foi igual a

$$\hat{\beta}' - \beta' = (4.7559, 1.4995) - (4, 1.5) = (0.7559, -0.0005)$$

diferente do erro de estimação com a primeira amostra, que foi igual a  $(1.7981 - 0.1263)$ . Como o vetor estimado  $\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$  é uma função dos dados aleatórios  $\mathbf{Y}$ , ele próprio é um vetor aleatório. Para cada amostra, gerada sob o mesmo modelo probabilístico, temos diferentes valores para  $\hat{\beta}$ . O erro de estimação  $\hat{\beta}' - \beta' = \hat{\beta}' - (4, 1.5)$  também é uma quantidade aleatória. Algumas vezes, este vetor será pequeno, algumas vezes será grande. Queremos saber o que seria um erro grande na estimação do vetor  $\beta$  e com que frequência ele vai ocorrer. Em suma, queremos conhecer a *distribuição de probabilidade* do VETOR erro de estimação

$$\hat{\beta}' - \beta' = (\hat{\beta}_0 - 4, \hat{\beta}_1 - 1.5)$$

Veja que a única parte aleatória nesta expressão é o estimador  $\hat{\beta}$  de mimos quandrados já que  $\beta$  é um vetor fixo. Para estudar o comportamento probabilístico do estimador  $\hat{\beta}$  (ou do erro de estimação), podemos usar simulação Monte Carlo. Vamos gerar centenas de vetores  $\mathbf{Y}$ , sempre nas mesmas condições, e verificar como o estimador  $\hat{\beta}$  e o erro de estimação

$$\hat{\beta}' - \beta' = (\hat{\beta}_0 - 4, \hat{\beta}_1 - 1.5)$$

se comportam estatisticamente.

Queremos calcular o  $R^2$  em cada simulação. Uma maneira simples de extrair seu valor a partir do objeto retornado pelo comando `lm` é acessá-lo a partir do objeto `summary`. Digite `str(summary(sim1))` para ver o que pode ser extraído. No caso do  $R^2$  basta usar `summary(sim1)$r.squared`. Outra estatística que vamos precisar é uma estimativa de  $\sigma$ , explicada mais abaixo e obtida com `summary(sim1)$sigma`. Com isto, vamos às simulações:

```
set.seed(1)
nsim = 1000 # numero de simulacoes
betasim = matrix(0, ncol=nsim, nrow=2) # matriz para guardar as nsim estimativas de b
R2 = rep(0, nsim)
S2 = rep(0, nsim)
for(j in 1:nsim){
  y = mu + rnorm(24, 0, sigma) # gera novo vetor y
  simj = lm(y ~ x1)
  betasim[, j] = simj$coef # estima beta e salva
  R2[j] = summary(simj)$r.squared
  S[j] = summary(simj)$sigma
}

# visualizando os resultados
par(mfrow=c(2,2)) # particiona a janela grafica em 2 x 2
hist(betasim[1,], prob=T, main="beta0") # histograma dos 1000 interceptos estimados b0
abline(v=beta[1], lwd=2, col="blue") # verdadeiro beta_0

hist(betasim[2,], prob=T, main="beta1") # histograma dos 1000 interceptos estimados b1
abline(v=beta[2], lwd=2, col="blue") # verdadeiro beta_1

plot(t(betasim), xlab="beta0", ylab="beta1") # correlacao entre beta_0_hat e beta_1_hat
abline(v=beta[1], h=beta[2]) # valores verdadeiros beta_0 e beta_1

hist(R2, main="R2")
```

Alguns comentários *muito importantes*: observe que o valor verdadeiro dos parâmetros nunca mudou ao longo das simulações. Sempre tivemos  $\beta_0 = 4$  e  $\beta_1 = 1.5$ . Os 24 valores do

atributo  $x_1$  também não mudaram. Apenas  $\mathbf{Y}$  variou e isto ocorreu por causa dos erros  $\epsilon_i$  que não possuem nenhuma conexão com  $X_1$  ou com o  $\beta_0$  e  $\beta_1$ . A análise que você vai fazer na prática é uma dessas 1000 simulações. Todas elas foram geradas da mesma forma e poderiam legitimamente ser qualquer uma delas, a única instância específica de dados que você terá em mãos na prática de análise de dados. Você então observar nos gráficos o que poderia acontecer com sua análise. Até onde você pode errar? E com que frequência erros grandes podem ocorrer?

Veja o histograma dos 1000 valores estimados da inclinação,  $\beta_1^{(1)}, \dots, \beta_1^{(1000)}$ . O valor verdadeiro usado para gerar os dados foi  $\beta_1 = 1.5$ . Os valores estimados estão centrados aproximadamente em torno do valor verdadeiro  $\beta_1 = 1.5$ . Além disso, eles variaram entre 1.0 e 2.0 causando então um erro máximo de aproximadamente 0.5. Os valores acima de 1.8 ou abaixo 1.2 (e portanto, com um erro de estimativa maior que 0.3) aconteceram com baixa frequência. De fato, a proporção de vezes em que isto ocorreu nas 1000 simulações foi igual a `sum( abs(betasim[2,] - beta[2]) > 0.3 )/nsim`, que resultou em 0.034, ou apenas 3.4%. Assim, podemos concluir que ao estimar  $\beta_1 = 1.5$  com o estimador de mínimos quadrados neste problema podemos ter uma boa confiança de que erraremos o seu valor verdadeiro por máximo 0.3 (isto vai ocorrer aproximadamente 98.6% das vezes). Além disso, os valores estimados estarão oscilando em torno do valor verdadeiro, ora um pouco mais, ora um pouco menos que  $\beta_1$ .

Chegamos a uma conclusão semelhante olhando para o histograma de  $\hat{\beta}_0$ , que parece estar centrado em torno do valor verdadeiro  $\beta_0 = 4$  e com um erro que, na maioria das vezes, não ultrapassa 4 (tivemos `sum( abs(betasim[1,] - beta[1]) > 4 )/nsim` igual a 0.052 ou 5.2%).

Outro aspecto claro nos histogramas é que as distribuições de probabilidade de  $\hat{\beta}_0$  e  $\hat{\beta}_1$  se parecem com distribuições normais. De fato, vamos repetir os últimos gráficos ajustando uma densidade normal a cada um dos histogramas usando a média aritmética e o desvio-padrão amostra das 1000 simulações de cada um dos estimadores. Temos `mean(betasim[1,])` igual a 3.97 e `sd(betasim[1,])` igual a 2.08, enquanto para  $\hat{\beta}_1$  temos `mean(betasim[2,])` igual a 1.50 e `sd(betasim[2,])` igual a 0.15. Usando estes valores com o comando `curve`:

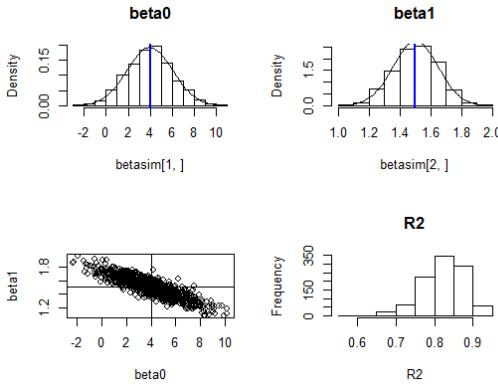
```
# visualizando os resultados
par(mfrow=c(2,2)) # particiona a janela grafica em 2 x 2
hist(betasim[1,], prob=T, main="beta0") # histograma dos 1000 interceptos estimados beta_0
abline(v=beta[1], lwd=2, col="blue") # verdadeiro beta_0
# ajustando uma densidade normal aos dados de beta_0_hat
curve(dnorm(x, mean=mean(betasim[1,]), sd=sd(betasim[1,])), add=TRUE)

hist(betasim[2,], prob=T, main="beta1") # histograma dos 1000 interceptos estimados beta_1
abline(v=beta[2], lwd=2, col="blue") # verdadeiro beta_1
# ajustando uma densidade normal aos dados de beta_1_hat
curve(dnorm(x, mean=mean(betasim[2,]), sd=sd(betasim[2,])), add=TRUE)

plot(t(betasim), xlab="beta0", ylab="beta1") # correlacao entre beta_0_hat e beta_1_hat
abline(v=beta[1], h=beta[2]) # valores verdadeiros beta_0 e beta_1

hist(R2, main="R2")
```

Não somente a distribuição marginal de cada componente de  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$  parece seguir uma distribuição gaussiana mas, observando que o plot dos 1000 pares de pontos  $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$  tem



a forma de uma elipse, parece que a distribuição conjunta dos componentes do vetor segue uma distribuição gaussiana bivariada. A partir deste plot vemos que a correlação entre  $\hat{\beta}_0$  e  $\hat{\beta}_1$  é negativa. Quando a inclinação estimada  $\hat{\beta}_1$  fica muito acima de sua média (que é aproximadamente 1.5), o intercepto estimado  $\hat{\beta}_0$  tende a ficar abaixo de sua média (que é aproximadamente 4).

Mais uma observação referente ao último gráfico: a estatística  $R^2$  também é uma variável aleatória! Ao longo das 1000 simulações,  $R^2$  teve um valor médio igual a 0.8234 e 50% de seus valores estão entre 0.79 e 0.86. Apenas 2.3% dos 1000 valores calculados foram menores que 0.7. Uma das amostras chegou a gerar um  $R^2$  igual a 0.60, o mínimo nas 1000 simulações.

**O drama do analista de dados:** O estudo de simulação que fizemos mostra claramente as propriedades estatísticas do estimador de mínimos quadrados  $\hat{\beta}$ . Obtivemos o comportamento estatístico do erro de estimação descobrindo o valor esperado de cada componente de  $\hat{\beta}$ , incluindo um valor máximo que, com alta probabilidade, este erro pode atingir. Acontece que, na prática da análise de dados, este estudo é impossível de ser realizado. Para estudar o comportamento estatístico de  $\hat{\beta}$ , tivemos de gerar os dados  $\mathbf{Y}$  uma grande quantidade de vezes. Para esta geração, precisamos conhecer o verdadeiro valor do parâmetro  $\beta$ . Entretanto, o objetivo da estimação na prática é inferir um valor aproximado para  $\beta$ , supostamente desconhecido. Se conhecermos o valor verdadeiro de  $\beta$ , não há necessidade de estimá-lo, muito menos de conhecer as propriedades estatísticas do estimador  $\hat{\beta}$ . Parece que estamos num beco sem saída: para conhecer as propriedades estatísticas de  $\hat{\beta}$  por simulação precisamos conhecer o verdadeiro valor de  $\beta$ . Mas, na prática, não saberemos este valor já que o objetivo de calcular  $\hat{\beta}$  é exatamente obter um valor aproximado para o vetor  $\beta$ .

Todo este suspense é para fornecer um resultado surpreendente. Para conhecer como o estimador  $\hat{\beta}$  vai variar considerando as diferentes amostras que poderiam ser geradas pela modelo não vamos precisar simular o modelo milhares de vezes. Usando apenas a única amostra de dados que temos em mãos e o cálculo de probabilidades somos capazes de obter todo o comportamento estatístico de  $\hat{\beta}$ ! Com uma única amostra de dados conseguimos descobrir todos os resultados obtidos nas simulações acima.

De fato, já obtivemos todo o comportamento estatístico de  $\hat{\beta}$  nas notas de aula. Nós já aprendemos que, como  $\hat{\beta}$  é uma matriz de constantes ( $\mathbf{A} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}$ ) multiplicando o vetor gaussiano multivariado  $\mathbf{Y}$ , pudemos deduzir que  $\hat{\beta}$  é normal multivariado:

$$\hat{\beta} \sim N_2(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}) .$$

Portanto, olhando para o componente 1 deste vetor, temos

$$\hat{\beta}_0 \sim N(\beta_0, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{11}^{-1})$$

enquanto que, para o segundo componente,

$$\hat{\beta}_1 \sim N(\beta_1, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{22}^{-1})$$

A matriz  $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$  é facilmente obtida em R:

```
> solve(t(X) %*% X)
x1
0.17753623 -0.0108695652
x1 -0.01086957  0.0008695652
```

Assim, sem nenhuma simulação nós podemos conhecer de forma quase completa todo o comportamento estatístico de  $\hat{\beta}$ :

$$\hat{\beta}_0 \sim N(\beta_0, \sigma^2 0.1775)$$

enquanto que, para o segundo componente,

$$\hat{\beta}_1 \sim N(\beta_1, \sigma^2 0.0009)$$

Fica faltando apenas conhecer  $\sigma^2$ , a variância do erros  $\epsilon_i$  no modelo de regressão linear  $Y_i = \mathbf{x}'_i \beta + \epsilon_i$ . É claro que sabemos que  $\sigma = 5$  pois nós mesmos geramos os dados. Mas também é claro que, numa análise de dados reais, temos apenas os dados  $\mathbf{Y}$  e a matriz  $\mathbf{X}$ . Nãoconhecemos o modelo que gerou os dados e portanto não conhecemos  $\sigma^2$ .

Acontece que, embora não possamos conhecer  $\sigma^2$  com exatidão, podemos estimá-lo com razoável precisão. Para isto usamos os resíduos  $r_i = y_i - \hat{y}_i$ . Pode-se mostrar que a variável aleatória

$$SSE = \mathbf{r}'\mathbf{r} = \sum_{i=1}^n r_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

possui uma distribuição qui-quadrado com  $n - p = n - 2$  graus de liberdade multiplicada por  $\sigma^2$ . Portanto  $\mathbb{E}(SSE) = \sigma^2(n - p)$  e, como consequência,  $S^2 = \mathbb{E}(SSE/(n - p)) = \sigma^2$ . Isto é, a soma do quadrado dos resíduos dividida por  $n - 2$  (quase a sua média, portanto) tem o valor esperado igual a  $\sigma^2$ . Algumas vezes, um pouco mais que  $\sigma^2$ , algumas vezes, um pouco menos. Vamos ver como foi a estimativa  $S^2$  do parâmetro  $\sigma^2$  em cada uma das 1000 simulações. Com o comando `S[j] = summary(simj)$sigma`, nós guardamos os valores de  $\sqrt{S^2}$  e portanto de uma estimativa de  $\sigma$ . Vamos elevá-lo ao quadrado e transformá-lo para verificar duas coisas:

- O ajuste da distribuição qui-quadrado com  $df = n - 2 = 22$  graus de liberdade aos valores simulados de  $SSE/\sigma^2 = SSE/25$ . Este é um resultado teórico que estamos verificando empiricamente.
- Como  $S = \sqrt{S^2} = \sqrt{SSE/(24 - 2)}$  comporta-se como estimador de  $\sigma^2$  ao longo das 1000 simulações.

```
par(mfrow=c(1,2))
S2 = S^2 # obtendo estimativa de sigma^2 em cada simulacao
SSE = (24-2)*S2 # obtendo a soma dos resíduos ao quadrado em cada simulacao
hist(SSE/sigma^2, prob=T)
curve(dchisq(x, df=24-2), add=T) # ajuste de qui-quadrado
hist(S, prob=T)
sum(S > 7 | S < 3)/1000
```

A maioria dos valores estimados de  $\sigma$  estão entre 3 e 7. Já que  $\sigma = 5$ , o último comando acima produz 0.008, ou 0.8% das vezes, para a proporção das simulações em que  $S$  teve um

erro de estimac ao  $S - \sigma$  maior que 2. Na prática, apenas um desses valores será usado, aquele associado com o conjunto particular de dados que está em sua mãos. Por exemplo, se tivermos em mãos apenas o primeiro conjunto de dados (entre os 1000 simulados), teremos a estimativa  $S[1] = 4.937436$ , um valor bem próximo de  $\sigma$ . Nós fomos felizes neste primeiro conjunto de dados mas que valores mais altos ou mais baixo poderiam ter sido obtidos como estimativa de  $S$ , embora estas estimativas dificilmente ultrapassem 7 ou sejam menores que 3. O ponto relevante é que, com esta aproximação de  $\sigma$  baseada em UMA ÚNICA amostra de dados, podemos agora conhecer o comportamento estatístico do estimador  $\hat{\beta}$  COMO SE FIZÉSSSEMOS centenas de simulações. De fato, baseado na teoria que já deduzimos, como sabemos que

$$\hat{\beta} \sim N_2(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}),$$

podemos concluir que

$$\hat{\beta} \approx N_2(\beta, S^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}),$$

e que portanto, como  $S = 4.937436$  na primeira amostra (supondo que é a única amostra de dados que temos), concluímos que

$$\hat{\beta}_0 \approx N(\beta_0, (4.937)^2 0.1775)$$

enquanto que, para o segundo componente,

$$\hat{\beta}_1 \sim N(\beta_1, (4.937)^2 0.0009)$$

**O erro de estimação:** Com isto, podemos ter uma boa idéia do erro máximo que podemos estar cometendo ao estimar  $\beta$  pelo método de mínimos quadrados. De fato, como 95% da área de uma gaussiana fica entre dois desvios-padrão de sua esperança, temos para  $\beta_1$ :

$$\mathbb{P}(|\hat{\beta}_1 - \beta_1| < 2\sqrt{(4.937)^2 0.0009}) \approx 0.95$$

Isto é,

$$\mathbb{P}(|\hat{\beta}_1 - \beta_1| < 0.29622) \approx 0.95$$

Assim, com alta probabilidade, a diferença entre a estimativa  $\hat{\beta}_1$  (uma variável aleatória calculada a partir dos dados) e  $\beta_1$  (um valor fixo mas desconhecido) não deve ultrapassar 0.30. Manipulação simples do operador valor absoluto permite escrever o evento  $|\hat{\beta}_1 - \beta_1| < 0.30$  de outra forma equivalente:

$$|\hat{\beta}_1 - \beta_1| < 0.30 \Leftrightarrow -0.30 < \hat{\beta}_1 - \beta_1 < 0.30 \Leftrightarrow \hat{\beta}_1 - 0.30 < \beta_1 < \hat{\beta}_1 + 0.30$$

Retornando ao cálculo de probabilidade, temos então

$$\mathbb{P}(\hat{\beta}_1 - 0.30 < \beta_1 < \hat{\beta}_1 + 0.30) \approx 0.95$$

Ou seja, com probabilidade 95% o intervalo (aleatório)  $(\hat{\beta}_1 - 0.15, \hat{\beta}_1 + 0.30)$  vai cobrir o verdadeiro valor do parâmetro aproximadamente 95% das vezes que o procedimento de estimação de mínimos quadrados for adotado.

**Lição a levar para casa:** O ponto mais importante de todo este exercício é que: não apenas obtemos uma estimativa do vetor  $\beta$  mas conseguimos também ter uma boa aproximação para os outros possíveis valores que poderíamos ter se a amostra fosse um pouco diferente (mas gerada sob o mesmo modelo). Com isto, temos uma boa idéia do tamanho máximo do erro que podemos estar cometendo ao estimar  $\beta_i$ : dificilmente vamos ultrapassar  $2S\sqrt{(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{ii}^{-1}}$ .

Outra maneira de expressar este resultado é apresentar o chamado *intervalo de confiança* de 95%:

$$(\hat{\beta}_i - 2S\sqrt{(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{ii}^{-1}}, \hat{\beta}_i + 2S\sqrt{(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{ii}^{-1}})$$

Este intervalo aleatório cobre o verdadeiro (e desconhecido) valor de  $\beta_i$  95% das vezes, aproximadamente.

- (d) Repita o exercício anterior simulando um modelo de regressão linear com DOIS atributos. Este exercício tem o objetivo de forçá-lo a refletir sobre o significado da expressão “ $\hat{\beta}$  é um vetor aleatório”. Seu entendimento é crucial na teoria da aprendizagem estatística.

Vamos simular um modelo de regressão linear com dois atributos usando o R e estimar o vetor de coeficientes  $\beta$  em cada caso. A seguir, vamos verificar que o comportamento estatístico do estimador  $\hat{\beta}$  está de acordo com o comportamento estocástico deduzido teoricamente.

Vamos fixar um modelo de regressão em que CONHECEMOS o vetor de coeficientes

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)' = (1, 1.5, 0.7)' .$$

Vamos usar  $n = 25$  observações com dois atributos. O modelo será:

$$Y_i = \mathbf{x}'_i \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \varepsilon_i = 1 + 1.5x_{i1} + 0.7x_{i2} + \varepsilon_i$$

Os erros  $\varepsilon_i$  serão i.i.d.  $N(0, \sigma^2 = 25)$ .

Rode o script abaixo no R:

```
set.seed(0)                                # fixando a semente do gerador aleatorio
x1 = 1:24                                    # coluna com 1o atributo
x1
x2 = round(25*runif(24),1)                  # coluna com 2o atributo
x2
beta = c(1, 1.5, 0.7)                        # vetor beta
mu = cbind(1, x1, x2) %*% beta              # vetor com E(Y)= X*b
sigma = 5                                     # resposta y = X*b + erros N(0,1)
y = mu + rnorm(24, 0, sigma)                  # scatterplots bivariado
pairs(cbind(y, x1, x2))
```

Nos gráficos de dispersão que resultaram do comando `pairs` você deve ter notado como, visualmente, o atributo `x2` parece ter pouco efeito para explicar a variação de `y` quando comparado com a associação forte e óbvia entre `y` e `x1`. No entanto, você sabe que `x2` tem algum efeito sobre `y` pois seu coeficiente não é exatamente igual a zero. Na verdade, podemos comparar os dois coeficientes pois os dois atributos possuem aproximadamente a mesma escala (variando entre 0 e 24). O efeito de `x1` em `y` é medido pelo seu coeficiente (igual a 1.5) e o de `x2` pelo seu coeficiente (igual a 0.7). Assim, o efeito de `x1` parece ser  $1.5/0.7 \approx 2.0$ , ou duas vezes maior, que o de `x2`. No entanto, o gráfico de  $y \times x_2$  dá a impressão visual de que `x2` tem muito menos efeito em `y`. Na verdade, o que afeta a nossa avaliação do efeito de `x2` neste gráfico é o efeito simultâneo de `x1`. Voltaremos a isto mais abaixo. Ainda nestes gráficos, note como os preditores `x1` e `x2` são muito pouco correlacionados.

```
x = cbind(x1, x2)                          # matriz de desenho (sem a constante 1)
sim1 = lm(y ~ x )                          # sim1 e' objeto da classe lm com results do ajuste
is.list(sim1)                                # sim1 e' uma lista
names(sim1)                                  # nomes dos objetos que compõem a lista sim1
summary( sim1 )                            # função summary em sim1: retorna info sobre mini
```

Veremos agora apenas alguns dos itens listados na saída de `summary`. Veja que

$$\hat{\beta}' = (0.46, 1.64, 0.58) \neq (1, 1.5, 0.7) = \beta',$$

considerando as estimativas com duas casas decimais. O erro de estimação NESTA AMOSTRA PARTICULAR é igual a

$$\hat{\beta}' - \beta' = (0.46, 1.64, 0.58) - (1, 1.5, 0.7) = (-0.54, 0.14, 0.12)$$

O vetor ALEATÓRIO  $\hat{\beta}'$  possui distribuição gaussiana  $p$ -variada (3-variada aqui) com

$$\hat{\beta}' \sim N_3(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1})$$

O que isto significa? O resto do exercício procura te dar uma idéia da resposta.

O vetor  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\beta}$  com os valores ajustados é obtido manipulando matrizes e vetores: ou diretamente a partir do objeto `sim1`:

```
betahat = sim1$coef           # extraindo o vetor beta-hat.
yhat = sim1$fitted           # Fitted values. Alternativa: yhat0 = cbind(1, x) %*% beta
plot(yhat, y)                 # R2 e' o (coeficiente de correlacao linear)^2 deste grafico
cor(yhat, y)^2                # compare com o valor de Multiple R-squared em summary(sim1)

r = y - yhat                 # Vetor de resíduos. Alternativa: sim1$residuals
S2 = sum(r*r)/(length(y) - 3) # estimativa nao-viciada de sigma^2

sqrt(S2)                      # O mesmo que 'Residual standard error...' em summary(sim1)
                               # veja que o verdadeiro valor e' sigma=5

vcov(sim1)                     # extrai a estimativa da matriz de covariância de
                               # beta-hat = S2 * (X'X)^{-1}

sdhat = sqrt(diag(vcov(sim1))) # sqrt dos elementos da diagonal: Estimativa dos DPs
                               # dos beta-hats.
                               # Mesmos valores que a coluna Std. Error em summary(sim1)
```

Vamos agora simular este processo 1000 vezes, sempre gerando um novo vetor resposta  $y$ , ajustando o modelo (com a matriz de desenho  $\mathbf{X}$  fixa) e calculando as estimativas. Teremos sempre um vetor  $\hat{\beta}$  diferente do verdadeiro valor de  $\beta$ . Vamos avaliar empiricamente o comportamento deste estimador e comparar com o que a teoria diz.

```
nsim = 1000      # numero de simulações
betasim = matrix(0, ncol=nsim, nrow=3) # matriz para guardar as nsim estimativas de beta
betasim[,1] = betahat # primeira coluna = estimativa com 1a amostra
for(j in 2:nsim){
  y = mu + rnorm(24, 0, sigma)    # gera y
  betasim[, j] = lm(y ~ x)$coef # estima e salva betahat na simulação j
}

sdbeta = sigma * sqrt(diag(solve(t(cbind(1,x)) %*% cbind(1,x)))))

par(mfrow=c(2,2)) # particiona a janela gráfica em 2 x 2
hist(betasim[1,], prob=T) # histograma dos 1000 interceptos
```

```

abline(v=betasim[1,1], lwd=2, col="blue") # verdadeiro beta_0
aux = seq(min(betasim[1,]), max(betasim[1,]), len=100) # beta_0_hat e' gaussiano?
lines(aux, dnorm(aux, beta[1], sdbeta[1]))

hist(betasim[2,], prob=T); abline(v=beta[2], lwd=2, col="red")
abline(v=betasim[2,1], lwd=2, col="blue")
aux = seq(min(betasim[2,]), max(betasim[2,]), len=100)
lines(aux, dnorm(aux, beta[2], sdbeta[2]))

hist(betasim[3,], prob=T); abline(v=beta[3], lwd=2, col="red")
abline(v=betasim[3,1], lwd=2, col="blue")
aux = seq(min(betasim[3,]), max(betasim[3,]), len=100)
lines(aux, dnorm(aux, beta[3], sdbeta[3]))

plot(betasim[2,], betasim[3,])

```

---

- (e) The vector  $\mathbf{HY}$  is the orthogonal projection of  $\mathbf{Y}$  into the linear subspace of the linear combinations of the  $p$  columns of  $\mathbf{X}$ . Show that indeed  $\mathbf{HY}$  can be written as a linear combination of columns of  $\mathbf{X}$ .

**Solution:** A linear combination of the  $p$  columns of  $\mathbf{X}$  is a vector written as  $\mathbf{X}\mathbf{b}$  where  $\mathbf{b}$  is any  $p$ -dimensional vector. Using the definition of  $\mathbf{H}$ , we have

$$\mathbf{HY} = \mathbf{X} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{Y} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

where  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{Y}$  is a  $p$ -dimensional vector.

---

- (f) Numa análise de dados com o modelo de regressão linear comum (isto é, com a primeira coluna da matriz  $\mathbf{X}$  sendo as colunas de 1's), checar numericamente que o vetor de resíduos  $\mathbf{r} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$  é ortogonal ao vetor projetado  $\hat{\mathbf{Y}}$ . Faça isto com os dados de apartamentos em BH.

**Solution:** Obtemos um valor aproximadamente zero, mas não exato, devido a erros de arredondamento numérico:

```

aptos = read.table("aptosBH.txt", header = T)
reg.all = lm(preco ~ area+quartos+suites+vagas, data=aptos)
sum(reg.all$fitted * reg.all$res) # produto interno de resíduos x preditos
# resultado eh -0.003036737

```

---

- (g) Responda V ou F às questões abaixo:

- O vetor de resíduos  $\mathbf{r} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$  é ortogonal ao vetor  $\mathbf{Y}$ .
- The orthogonal projection  $\hat{\mathbf{Y}}$  is orthogonal to the data  $\mathbf{Y}$ .
- The inner product between  $\mathbf{r}$  and  $\hat{\mathbf{Y}}$  is zero. That is,

$$\langle \mathbf{r}, \hat{\mathbf{Y}} \rangle = \underbrace{\mathbf{r}'}_{(1 \times n)} \underbrace{\hat{\mathbf{Y}}}_{(n \times 1)} = 0$$

- $\hat{\mathbf{Y}}$  pertence ao espaço das combinações lineares das colunas de  $\mathbf{X}$ .
- O vetor de resíduos  $\mathbf{r} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$  pertence ao espaço das combinações lineares das colunas de  $\mathbf{X}$ .

**Solução:** F ( $\mathbf{r}$  é ortogonal a  $\hat{\mathbf{Y}}$ ), F ( $\hat{\mathbf{Y}}$  is orthogonal to  $\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{r}$ ), T, T (pois  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\hat{\beta}$ ), F ( $\mathbf{r}$  pertence ao espaço ortogonal ao espaço das combinações lineares das colunas de  $\mathbf{X}$ ; o vetor  $\mathbf{r}$  é ortogonal a cada coluna da matriz  $\mathbf{X}$ ).

---

- (h) Em um modelo de regressão linear, a variável resposta é o rendimento de uma reação química em duas situações diferentes, 0 e 1. São feitas  $n_0$  e  $n_1$  repetições independentes da reação em cada um dos dois casos gerando os  $n_0 + n_1$  valores da resposta  $Y_{ij}$  onde  $i = 1, \dots, n_j$  e  $j = 0, 1$ . Suponha  $\mathbf{Y} = (Y_{10}, Y_{20}, \dots, Y_{n_00}, Y_{11}, \dots, Y_{n_11})$  e que  $\mathbf{X}$  é a matriz de desenho com a primeira colunas de 1's e a segunda coluna com uma variável indicadora com valores 0 (se estado é 0) e 1 (se estado é 1). Isto é,

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_{10} \\ y_{20} \\ \vdots \\ y_{n_00} \\ y_{11} \\ y_{21} \\ \vdots \\ y_{n_11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

Mostre que o estimador de mínimos quadrados é dado por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \bar{Y}_0 \\ \bar{Y}_1 - \bar{Y}_0 \end{bmatrix}$$

onde  $\bar{Y}_j$  é a média aritmética das  $n_j$  observações no estado  $j$ .

OBS:

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$$


---

- (i) Considere um modelo de regressão linear onde a matriz de desenho  $\mathbf{X}$  possui uma única coluna formada pelo atributo  $j$  de forma que  $\mathbf{X}$  é uma matriz  $n \times 1$ . Digamos que o atributo  $j$  seja o número total de linhas de código de um software e a resposta seja o tempo até a obtenção de uma primeira versão estável do software. Obtemos dados relacionados a  $n$  distintos software. Nossa modelo de regressão linear SEM INTERCEPTO é dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y} &= \mathbf{x}^{(j)}\beta_j + \boldsymbol{\epsilon} \\ \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \vdots \\ x_{nj} \end{bmatrix} \beta_j + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x_{1j}\beta_j + \varepsilon_1 \\ x_{2j}\beta_j + \varepsilon_2 \\ \vdots \\ x_{nj}\beta_j + \varepsilon_n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Note que o vetor-coeficiente neste caso é simplesmente o escalar  $\beta_j$ , um vetor de dimensão 1.

Ao contrário do que fazemos quase sempre por *default*, no modelo acima, nós não estamos usando a coluna de vetor  $n$ -dim de 1's representado por  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)'$ . Isto significa que o modelo assume que a resposta  $Y$  está relacionada ao atributo através de uma relação linear que passa pela origem da forma:

$$y \approx x\beta$$

Este modelo simplificado não é apropriado na maioria das situações práticas pois quase sempre podemos esperar um intercepto não-nulo. A utilidade deste modelo simplificado vai ficar clara no exercício 9j.

- Seja  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_i x_i y_i$  o produto interno de dois vetores  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ . Mostre que o estimador de mínimos quadrados de  $\beta_j$  neste modelo com um único atributo é dado por

$$\begin{aligned} \beta_j &= \frac{\mathbf{x}^{(j)'} \mathbf{Y}}{\mathbf{x}^{(j)'} \mathbf{x}^{(j)}} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n x_{ij} y_i}{\sum_{i=1}^n x_{ij}^2} \\ &= \frac{\langle \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{y} \rangle}{\langle \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}^{(j)} \rangle} \\ &= \frac{\langle \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{x}^{(j)}\|^2} \end{aligned}$$

- Suponha que o único atributo no modelo seja a coluna de 1's representada por  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)'$ . Mostre que o (único) coeficiente neste caso é dado pela média aritmética das observações

$$\beta_0 = \frac{\mathbf{1}' \mathbf{Y}}{\mathbf{1}' \mathbf{1}} = \frac{1}{n} \sum_i y_i = \bar{Y}$$

- Considerando o item anterior, conclua que o modelo no caso em que o único atributo é a coluna de 1's é da forma:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{1} \beta_0 + \boldsymbol{\varepsilon}$$

o que significa que  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  são i.i.d.  $N(\beta_0, \sigma^2)$ .

O modelo estimado por mínimos quadrados produz a seguinte decomposição do vetor  $\mathbf{Y}$ :

$$\mathbf{Y} = \bar{Y} \mathbf{1} + (\mathbf{Y} - \bar{Y} \mathbf{1})$$

Neste modelo,  $\widehat{\mathbf{Y}} = \bar{Y} \mathbf{1}$  e o vetor de resíduos é  $\mathbf{r} = \mathbf{Y} - \bar{Y} \mathbf{1}$ .

- (j) Em estudos experimentais, como nos testes AB feitos pelo Google, as colunas da matriz  $\mathbf{X}$  podem ser escolhidos de antemão pelo usuário. Um desenho experimental muito usado é o chamado *full factorial design*. Vou considerar um desses desenhos (se estiver interessado, estou tomando um desenho com dois fatores, dois níveis em cada um deles e apenas com duas replicações). Para este desenho, temos o seguinte modelo de regressão linear para uma resposta experimental.

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \\ \varepsilon_7 \\ \varepsilon_8 \end{bmatrix}$$

Não se preocupe com significado exato dos atributos neste momento. Mas, para não ficar muito abstrato, você pode imaginar que, neste problema, a resposta  $Y$  é a produção por minuto de um processo químico numa indústria. Os dois primeiros atributos não constantes representam os efeitos individuais de dois fatores influentes na produção. O último atributo representa a interacção ou efeito sinergético entre estes dois fatores.

Ignorando a semântica do modelo e concentrando apenas na sua sintaxe, verifique o seguinte:

- As colunas da matriz de desenho são todas ortogonais entre si. Isto é,  $\mathbf{x}^{(j)'} \mathbf{x}^{(k)} = \sum_i x_{ij} x_{ik} = 0$  se  $j \neq k$ .
- Conclua que a matriz  $\mathbf{X}' \mathbf{X}$  é diagonal.
- Conclua que a matriz  $(\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1}$  também é diagonal.
- Conclua que o estimador de mínimos quadrados de  $\boldsymbol{\beta}$  é dado por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{1}, \mathbf{y} \rangle / \|\mathbf{1}\|^2 \\ \langle \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{y} \rangle / \|\mathbf{x}^{(1)}\|^2 \\ \langle \mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{y} \rangle / \|\mathbf{x}^{(2)}\|^2 \\ \langle \mathbf{x}^{(3)}, \mathbf{y} \rangle / \|\mathbf{x}^{(3)}\|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i y_i / 8 \\ \langle \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{y} \rangle / 8 \\ \langle \mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{y} \rangle / 8 \\ \langle \mathbf{x}^{(3)}, \mathbf{y} \rangle / 8 \end{bmatrix}$$

- Conclua que o estimador  $\hat{\beta}_j$  do atributo  $j$  é igual àquele que seria obtido caso tivéssemos rodado uma regressão usando APENAS o atributo  $j$ .
- Verifique que esta conclusão é geral: caso as colunas de  $\mathbf{X}$  sejam ortogonais entre si, o estimador  $\hat{\beta}_j$  do atributo  $j$  não é afetado pela presença ou ausência dos demais atributos na regressão.
- Verifique também que a matriz de covariância

$$\mathbb{V}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2 (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1}$$

do estimador  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  é uma matriz diagonal. Conclua que as estimativas de diferentes atributos são v.a.'s independentes pois  $\text{Corr}(\hat{\beta}_j, \hat{\beta}_k) = 0$  se  $j \neq k$ .

- Apenas para seu conhecimento, é possível mostrar que a eficiência máxima na estimação dos coeficientes é alcançada quando as colunas em  $\mathbf{X}$  são ortogonais entre si. Mais especificamente, é possível mostrar que dada qualquer matriz de desenho  $\mathbf{X}$ , tal que  $\|\mathbf{x}^{(j)}\|^2 = c_j^2 > 0$ , então

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}_j) \geq \frac{\sigma^2}{c_j^2}$$

e o mínimo é atingido quando  $\mathbf{x}^{(j)'} \mathbf{x}^{(k)} = 0$  para todo par  $j \neq k$  (isto é, quando as colunas são ortogonais entre si, o erro esperado de estimação é minimizado). Para mais informações, ver Rao (1973, pag. 236).

- 
- (k) Suponha que a matriz de desenho possui apenas a coluna  $\mathbf{1}$  e seja  $\mathbf{H}_1$  a matriz de projeção no espaço  $\mathcal{C}(\mathbf{1})$  dos múltiplos do vetor  $\mathbf{1}$ . Mostre que esta matriz é dada por

$$\mathbf{H}_1 = \frac{1}{n} \mathbf{1} \mathbf{1}' = \frac{1}{n} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$


---

- (l) Verifique que, qualquer que seja o vetor resposta  $\mathbf{Y}$ , ele pode ser decomposto como

$$\mathbf{Y} = \mathbf{H}_1 \mathbf{Y} + (\mathbf{I} - \mathbf{H}_1) \mathbf{Y} = \bar{y} \mathbf{1} + (\mathbf{Y} - \bar{y} \mathbf{1})$$

e que os dois vetores do lado direito da equação são ortogonais.

- 
- (m) Conclua que  $\mathbf{Y} - \bar{y} \mathbf{1}$  pertence ao espaço ortogonal  $\mathcal{C}(\mathbf{1})^\perp$  e que o comprimento (ao quadrado) de  $\mathbf{Y}$  pode ser decomposto da seguinte maneira

$$\|\mathbf{Y}\|^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 = n\bar{y}^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \|\bar{y} \mathbf{1}\|^2 + \|\mathbf{Y} - \bar{y} \mathbf{1}\|^2$$

- 
- (n) Seja  $\mathbf{H} = \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'$  onde  $\mathbf{X}$  é a matriz de desenho com a primeira coluna sendo o vetor de 1's. Seja  $\mathbf{H}_1$  a matriz do exercício anterior. Mostre que as três matrizes  $\mathbf{H}_1$ ,  $\mathbf{H} - \mathbf{H}_1$ , e  $\mathbf{I} - \mathbf{H}$  são matrizes de projeções ortogonais. Isto é, elas são simétricas e idempotentes.

- 
- (o) Outra decomposição mais relevante é a seguinte:

$$\mathbf{I} = \mathbf{H}_1 + (\mathbf{H} - \mathbf{H}_1) + (\mathbf{I} - \mathbf{H}) .$$

Use esta decomposição matricial para decompor o vetor  $\mathbf{Y}$  em três outros vetores ortogonais entre si.

DICA: No produto matricial  $\mathbf{AB} = \mathbf{C}$ , a coluna  $j$  de  $\mathbf{C}$  é o resultado de multiplicar a matriz  $\mathbf{A}$  pela coluna  $j$  de  $\mathbf{B}$ .

**Solução:**

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{H}_1 + (\mathbf{H} - \mathbf{H}_1) + (\mathbf{I} - \mathbf{H})) \mathbf{Y} = \bar{Y} \mathbf{1} + (\mathbf{H} - \mathbf{H}_1) \mathbf{Y} + (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{Y}$$

Basta fazer o produto interno desses vetores do lado direito para ver que são ortogonais entre si. Por exemplo,

$$\langle (\mathbf{H} - \mathbf{H}_1) \mathbf{Y}, (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{Y} \rangle = 0$$

usando que as matrizes são idempotentes e simétricas.

- 
- (p) Como consequência, mostre que

$$\|\mathbf{Y}\|^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 = n\bar{y}^2 + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

e também que

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- 
- (q) O índice de correlação múltipla  $R^2$  é uma medida global do grau de proximidade do vetor ajustado ou predito pelo modelo  $\hat{\mathbf{Y}}$  ao vetor resposta  $\mathbf{Y}$  e ele é definido como

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2} .$$

Quanto maior o  $R^2$ , melhor o ajuste.

Mostre que sempre temos  $R^2 \in [0, 1]$  e que o  $R^2$  também pode ser escrito como

$$R^2 = \frac{\sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$$

- (r) Mostre que a média aritmética dos valores no vetor ajustado  $\hat{\mathbf{Y}}$  é igual a média dos valores observados sempre que  $\mathbf{1}$  estiver na matriz  $\mathbf{X}$ . Isto é, mostre que  $\sum_{i=1}^n \hat{y}_i/n = \bar{y}$ . DICA: represente a soma como o produto interno de dois vetores.
- 

- (s) Considere o índice empírico de correlação linear de Pearson entre os vetores  $\mathbf{Y}$  e  $\hat{\mathbf{Y}}$  dado por

$$r = \frac{\sum_i (y_i - \bar{y})(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})}{\{\sum_i (y_i - \bar{y})^2 \sum_i (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2\}^{1/2}}$$

Você vai mostrar que  $R^2 = r^2$  trabalhando primeiro o numerador de  $r$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{Y} - \bar{y}\mathbf{1}, \hat{\mathbf{Y}} - \bar{\hat{Y}}\mathbf{1} \rangle &= \langle \mathbf{Y} - \bar{y}\mathbf{1}, \hat{\mathbf{Y}} - \bar{y}\mathbf{1} \rangle \quad \text{pois } \sum_{i=1}^n \hat{y}_i/n = \bar{y}. \\ &= \langle \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} + \hat{\mathbf{Y}} - \bar{y}\mathbf{1}, \hat{\mathbf{Y}} - \bar{y}\mathbf{1} \rangle \end{aligned}$$

Conclua que o numerador de  $r$  é igual a  $\|\hat{\mathbf{Y}} - \bar{y}\mathbf{1}\|^2$  e que  $r^2 = R^2$ . Assim, o índice  $R^2$  mede o quadrado da correlação entre os vetores  $\mathbf{Y}$  e  $\hat{\mathbf{Y}}$ .

---

- (t) Responda V ou F para as seguintes afirmativas:

- $R^2$  mede a proporção da variabilidade (ou variação) total da resposta que é explicada pelo modelo.
  - $R^2$  mede a proporção da variação da resposta que o modelo não consegue explicar.
  - $R^2$  é igual a zero se a matriz de desenho tiver apenas a coluna  $\mathbf{1}$ .
- 

- (u) Seja  $X$  uma matriz de números reais de dimensão  $n \times (p+1)$ , seja  $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)$  um vetor  $(p+1) \times 1$  e  $\mathbf{y}$  um vetor  $n \times 1$ .

- Sejam  $v_1, \dots, v_k$  vetores do  $\mathbb{R}^n$ . Verifique que o conjunto das combinações lineares desses vetores forma um sub-espaco vetorial do  $\mathbb{R}^n$ .
- Verifique que  $X\beta = \beta_0 X_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p$  onde  $X_0, X_1, \dots, X_p$  são os vetores colunas de  $X$ . Assim, o conjunto  $\mathfrak{M}(X)$  das combinações lineares das colunas de  $X$  é igual a  $\mathfrak{M}(X) = \{X\beta \mid \beta \in \mathbb{R}^{p+1}\}$ .
- Seja  $W$  um subespaço do espaço vetorial  $V$ . Definimos o espaço ortogonal de  $W$  como sendo

$$W^\perp = \{u \in V \mid \langle u, w \rangle = 0 \quad \forall w \in W\}$$

Mostre que  $W^\perp$  é um subespaço vetorial de  $V$ .

**Solução:**  $\vec{0} \in W^\perp$  pois  $\langle \vec{0}, w \rangle = 0$  para todo  $w \in W$ . E tambem  $\langle a_1 u_1 + a_2 u_2, w \rangle = 0$  se  $\langle u_1, w \rangle = 0$  e  $\langle u_2, w \rangle = 0$

- Seja  $H = X(X'X)^{-1}X'$  de dimensão  $n \times n$ . Verifique que  $H$  é idempotente ( $H^2 = H$ ) e simétrica ( $H' = H$ ).
- Seja  $y \in \mathbb{R}^n$ . A matriz  $P$  de dimensão  $n \times n$  é dita de projeção ortogonal num certo subespaço vetorial se  $y - Py \perp Py$  para todo  $y \in \mathbb{R}^n$ . Mostre que  $H = X(X'X)^{-1}X'$  é uma matriz de projeção ortogonal usando que  $H$  é idempotente e simétrica.

- Como  $H = X(X'X)^{-1}X'$  é uma matriz de projeção ortogonal, resta saber em que subespaço vetorial  $W$  a matriz  $H$  projeta os vetores  $y \in \mathbb{R}^n$ . Mostre que  $H$  projeta ortogonalmente em  $\mathfrak{M}(X)$  (isto é, mostre que  $W = \mathfrak{M}(X)$ .)

**Solução:** Para todo  $y \in \mathbb{R}^n$ , temos  $Hy = X(X'X)^{-1}X'y = Xb$  onde  $b = (X'X)^{-1}X'y$ . Assim,  $Hy \in \mathfrak{M}(X)$  para todo  $y$  e portanto  $W \subset \mathfrak{M}(X)$ . Por outro lado, tome um

elemento  $Xb$  qualquer de  $\mathfrak{M}(X)$ . Por definição,  $Hy \in W$  para todo  $y$ . Em particular, tomando  $y = Xb$ , temos então  $HXb \in W$ . Mas  $HXb = X(X'X)^{-1}X'Xb = Xb$ . Isto é,  $Xb \in W$  e portanto  $\mathfrak{M}(X) \subset W$ . Concluímos então que  $W = \mathfrak{M}(X)$ .

- Seja  $H = X(X'X)^{-1}X'$  a matriz de projeção ortogonal no espaço  $\mathfrak{M}(X)$  das combinações lineares das colunas de  $X$ . Mostre que ao escolher  $\beta$  tal que  $X\beta = Hy$  estamos minimizando a distância  $\|y - X\beta\|^2$ . DICA: Escreva  $y$  e subtraia  $Hy$  em  $\|y - X\beta\|^2$  e use que  $\|v\|^2 = \langle v, v \rangle$

**Solução:**  $\|y - X\beta\|^2 = \langle y - X\beta, y - X\beta \rangle$ . Somando e subtraindo  $Hy$  obtemos

$$\begin{aligned}\|y - X\beta\|^2 &= \langle y - Hy + Hy - X\beta, y - Hy + Hy - X\beta \rangle \\ &= \langle y - Hy, y - Hy \rangle + \langle Hy - X\beta, Hy - X\beta \rangle - 2\langle y - Hy, Hy - X\beta \rangle \\ &= \|y - Hy\|^2 + \|Hy - X\beta\|^2 + 0.\end{aligned}$$

O último termo acima é zero pois  $Hy - X\beta \in \mathfrak{M}(X)$  já que  $Hy \in \mathfrak{M}(X)$  e  $X\beta \in \mathfrak{M}(X)$  e o conjunto  $\mathfrak{M}(X)$  é um sub-espaco vetorial (e portanto contém a diferença dos vetores). Além disso,  $y - Hy \in \mathfrak{M}(X)^\perp$ . Portanto, o produto interno  $\langle y - Hy, Hy - X\beta \rangle$  é nulo. Assim,  $\|y - X\beta\|^2 = \|y - Hy\|^2 + \|Hy - X\beta\|^2$ . O primeiro termo do lado direito não depende de  $\beta$  e o segundo é não-negativo. Ele será minimizado se for igual a zero, o que ocorre se tomamos  $X\beta = Hy$ .

- (v) *Regressão linear e distribuição condicional:* Vamos considerar um modelo (na verdade, mais uma caricatura) de como a renda do trabalho  $Y$  de um indivíduo qualquer está associada com o número de anos de estudo  $X$  desse mesmo indivíduo. Vamos supor que, para um indivíduo com  $X = x$  anos de estudo teremos a renda  $Y$  como uma variável aleatória com distribuição normal com esperança  $\mathbb{E}(Y|X = x) = g(x) = 300 + 100 * x$  e variância  $\sigma^2 = 50^2$ .

Responda V ou F às afirmações abaixo:

- Se  $X = 10$  para um indivíduo (isto é, se ele possui 10 anos de estudo), então a sua renda é uma variável aleatória com distribuição  $N(1300, 50^2)$ .
- $\mathbb{E}(Y) = 300 + 100 * x$ .
- $\mathbb{E}(Y|X = x) = 300 + 100 * x$ .
- $\mathbb{V}(Y) = 50^2$ .
- $\mathbb{V}(Y|X = x) = 50^2$ .
- A distribuição de  $Y$  é normal (ou gaussiana).
- Dado o valor de  $x$ , a distribuição de  $Y$  é normal (ou gaussiana).

- (w) Numa lista anterior, você usou os dados do arquivo `aptos.txt` com preços de apartamento no bairro Sion em Belo Horizonte para criar um modelo de regressão. Usando álgebra matricial no R, obtenha uma estimativa da matriz de covariância do estimador de mínimos quadrados  $\hat{\beta}$  dada por

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}) = \widehat{\sigma^2} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$$

onde

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n-p} (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}})' (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}) = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- (x) Considere um vetor  $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$  com distribuição normal bivariada com vetor esperado  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2)$  e matriz de covariância

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} \\ \rho\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}} & \sigma_{22} \end{bmatrix}$$

Usando o resultado dos slides, mostre que a distribuição condicional de  $(X_2|X_1 = x_1)$  é  $N(\mu_c, \sigma_c^2)$  onde

$$\mu_c = \mu_2 + \rho \sqrt{\frac{\sigma_{22}}{\sigma_{11}}}(x_1 - \mu_1) = \mu_2 + \rho \sqrt{\sigma_{22}} \frac{x_1 - \mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}$$

e

$$\sigma_c^2 = \sigma_{22}(1 - \rho^2)$$

A partir desses resultados, verifique se as afirmações abaixo são V ou F:

- Saber que o valor  $X_1 = x_1$  está dois desvios-padrão acima de seu valor esperado (isto é,  $(x_1 - \mu_1)/\sqrt{\sigma_{11}} = 2$ ) implica que devemos esperar que  $X_2$  também fique dois desvios-padrão acima de seu valor esperado.
- Dado que  $X_1 = x_1$ , a variabilidade de  $X_2$  em torno de seu valor esperado é maior se  $x_1 < \mu_1$  do que se  $x_1 > \mu_1$ .
- Conhecer o valor de  $X_1$  (e assim eliminar parte da incerteza existente) sempre diminui a incerteza da parte aleatória permanece desconhecida (isto é, compare a variabilidade de  $X_2$  condicionada e não-condicionada no valor de  $X_1$ ).
- $\mu_c$  é uma função linear de  $x_1$ .

- 
- (y) Considere um modelo de regressão linear onde a matriz de desenho  $\mathbf{X}$  possui uma única coluna formada pelo atributo  $j$  de forma que  $\mathbf{X}$  é uma matriz  $n \times 1$ . Digamos que o atributo  $j$  seja o número total de linhas de código de um software e a resposta seja o tempo até a obtenção de uma primeira versão estável do software. Obtemos dados relacionados a  $n$  distintos software. Nossa modelo de regressão linear SEM INTERCEPTO é dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y} &= \mathbf{x}^{(j)} \beta_j + \boldsymbol{\varepsilon} \\ \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \vdots \\ x_{nj} \end{bmatrix} \beta_j + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x_{1j}\beta_j + \varepsilon_1 \\ x_{2j}\beta_j + \varepsilon_2 \\ \vdots \\ x_{nj}\beta_j + \varepsilon_n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Note que o vetor-coeficiente neste caso é simplesmente o escalar  $\beta_j$ , um vetor de dimensão 1. Ao contrário do que fazemos quase sempre por *default*, no modelo acima, nós não estamos usando a coluna de vetor  $n$ -dim de 1's representado por  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)'$ . Isto significa que o modelo assume que a resposta  $Y$  está relacionada ao atributo através de uma relação linear que passa pela origem da forma:

$$y \approx x\beta$$

É claro que a maioria das situações práticas terá um intercepto não-nulo. A utilidade deste modelo vai ficar clara no exercício 9j.

- Seja  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_i x_i y_i$  o produto interno de dois vetores  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ . Mostre que o estimador de mínimos quadrados de  $\beta_j$  neste modelo com um único atributo é dado por

$$\begin{aligned}
\beta_j &= \frac{\mathbf{x}^{(j)'} \mathbf{Y}}{\mathbf{x}^{(j)'} \mathbf{x}^{(j)}} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^n x_{ij} y_i}{\sum_{i=1}^n x_{ij}^2} \\
&= \frac{\langle \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{y} \rangle}{\langle \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}^{(j)} \rangle} \\
&= \frac{\langle \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{x}^{(j)}\|^2}
\end{aligned}$$

- Suponha que o único atributo no modelo seja a coluna de 1's representada por  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)'$ . Mostre que o (único) coeficiente neste caso é dado pela média aritmética das observações

$$\beta_0 = \frac{\mathbf{1}' \mathbf{Y}}{\mathbf{1}' \mathbf{1}} = \frac{1}{n} \sum_i y_i = \bar{Y}$$

- Considerando o item anterior, conclua que o modelo no caso em que o único atributo é a coluna de 1's é da forma:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{1} \beta_0 + \varepsilon$$

o que significa que  $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$  são i.i.d.  $N(\beta_0, \sigma^2)$ .

O modelo estimado por mínimos quadrados produz a seguinte decomposição do vetor  $\mathbf{Y}$ :

$$\mathbf{Y} = \bar{Y} \mathbf{1} + (\mathbf{Y} - \bar{Y} \mathbf{1})$$

Neste modelo,  $\hat{\mathbf{Y}} = \bar{Y} \mathbf{1}$  e o vetor de resíduos é  $\mathbf{r} = \mathbf{Y} - \bar{Y} \mathbf{1}$ .

- (z) Suponha que o modelo de regressão correto envolve dois conjuntos de atributos. O primeiro deles é de fato medido empiricamente e está armazenado na matriz  $\mathbf{X}$  de dimensão  $n \times p$  onde a primeira coluna é o vetor  $\mathbf{1}$  de 1's. O segundo conjunto de atributos também é importante para explicar a variação de  $Y$  mas esses atributos não são medidos porque são desconhecidos ou porque sua medição é impossível ou inviável em termos práticos. Vamos supor que existam  $k$  atributos nesse segundo conjunto. Caso eles fossem medidos, estariam numa matriz  $\mathbf{Z}$  de dimensão  $n \times k$  (sem a coluna  $\mathbf{1}$ ). Assim, o modelo correto é dado por

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \mathbf{Z}\gamma + \varepsilon. \quad (12.1)$$

onde  $\gamma$  é um vetor  $k \times 1$  dos coeficientes associados com as colunas-atributos em  $\mathbf{Z}$ .

O analista de dados possui apenas a matriz  $\mathbf{X}$  para fazer a regressão e ele obtém a estimativa de mínimos quadrados para o coeficiente  $\beta$  da maneira usual:

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{Y}$$

- Substitua a expressão (12.1) de  $\mathbf{Y}$  na fórmula de  $\hat{\beta}$  e mostre que  $\mathbb{E}(\hat{\beta})$  é viciado para estimar  $\beta$  sendo que o vício de estimação é dado por

$$\mathbb{E}(\hat{\beta}) - \beta = (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{Z} \gamma$$

- Para entender melhor este vício, imagine que  $\mathbf{Z}$  contenha um único atributo. Dessa forma,  $\mathbf{Z}$  é uma matriz  $n \times 1$ , um vetor-coluna. Imagine que vamos explicar a variação deste

atributo  $\mathbf{Z}$  usando os  $p$  atributos da matriz  $\mathbf{X}$ . Isto é, vamos imaginar um modelo de regressão linear da seguinte forma:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\varepsilon}^*$$

onde  $\boldsymbol{\alpha}$  é um vetor  $p \times 1$  de coeficientes. Verifique que o estimador de mínimos quadrados de  $\boldsymbol{\alpha}$  é dado por

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Z}$$

Interprete agora o vício associado com o estimador  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ .

**Solução:** O estimador de regressão de  $\boldsymbol{\beta}$  no modelo reduzido é viciado por uma quantidade correspondente a  $\boldsymbol{\gamma}$  (coef do modelo full) vezes o coef da regressao de  $\mathbf{Z}$  em  $\mathbf{X}$ .

- Generalize para  $\mathbf{Z}$  com varios atributos usando o fato de que um produto matricial  $\mathbf{AB}$  é igual a uma matriz cuja  $j$ -ésima coluna é a aplicação da matriz  $\mathbf{A}$  à  $j$ -ésima coluna de  $\mathbf{B}$ .
- ( $\circ$ ) Considere agora o problema inverso, em que colocamos no modelo de regressão mais atributos do que o necessário. O modelo correto é dado por

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}.$$

mas, sem saber disso, assumimos um modelo da seguinte forma

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\varepsilon}^*.$$

onde  $\boldsymbol{\gamma}$  é um vetor  $k \times 1$  de coeficientes associados com as colunas-atributos em  $\mathbf{Z}$  que não necessárias pois a distribuição de  $\mathbf{Y}$  não depende desses atributos. Vamos estimar os coeficientes dos atributos com uma matriz de desenho da forma  $\mathbf{W} = [\mathbf{X}|\mathbf{Z}]$ . Note que o verdadeiro valor do parâmetro  $\gamma$  é o vetor  $\mathbf{0} = (0, \dots, 0)'$ .

Usando apenas um simples argumento em palavras, mostre que o estimador usual de mínimos quadrados estima  $\boldsymbol{\beta}$  sem vício.

- ( $\circ$ ) O arquivo `exames.txt` mostra os escores  $F$  em um exame final e os escores em dois exames preliminares  $P_1$  e  $P_2$  de 22 estudantes. Use o comando `pairs` e `cor` para visualizar e estimar a correlação entre os dados.

```
dados = read.table("exames.txt", header=T)
head(dados)
attach(dados)
pairs(dados)
cor(dados)
```

Veja que  $F$  é bastante correlacionada com as notas prévias, sendo um pouco mais correlacionada com a nota mais recente  $P_2$ . Rode um modelo de regressão linear para explicar  $F$  usando apenas  $P_1$  como variável preditora e depois usando ambas,  $P_1$  e  $P_2$ . Veja que o coeficiente linear de  $P_1$  é bem diferente nos dois casos.

```
summary(lm(F ~ P1))
summary(lm(F ~ P1 + P2))
```

A relação entre os coeficientes de regressão simples (com um único atributo) e os coeficientes de regressão múltipla podem ser vistos quando comparamos as seguintes equações de regressão:

$$\begin{aligned}\hat{F} &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 P_1 + \hat{\beta}_2 P_2 \\ \hat{F} &= \hat{\beta}'_0 + \hat{\beta}'_1 P_1 \\ \hat{F} &= \hat{\beta}''_0 + \hat{\beta}''_2 P_2 \\ \hat{P}_1 &= \hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_2 P_2 \\ \hat{P}_2 &= \hat{\alpha}'_0 + \hat{\alpha}'_1 P_1\end{aligned}$$

Usando os dados do arquivo mostre que, empiricamente, temos:

$$\hat{\beta}'_1 = \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 \hat{a}'_1$$

Isto é, o coeficiente da regressão linear simples de  $F$  em  $P_1$  é o coeficiente de regressão múltipla de  $P_1$  mais coeficiente da regressão múltipla de  $P_2$  vezes o coeficiente da regressão do atributo  $P_2$  regredido em  $P_1$ . Compare com o resultado teórico que você encontrou no exercício 4 da Lista 08. É possível fazer uma prova matemática e geral deste fato mas ela exige muita manipulação matricial.

- () Muitas vezes, o modelo de regressão linear ajusta-se perfeitamente a dados não-lineares após fazermos uma transformação nos dados. Este é o caso dos dados no arquivo `mortalidade.txt` com informações obtidas junto a uma seguradora brasileira referentes ao público consumidor de planos de seguro de vida num certo ano. Neste arquivo consideramos apenas a população masculina com 21 anos ou mais. Ele possui três colunas. A primeira apresenta  $x$ , a idade em anos. A segunda apresenta o número  $n_x$  de participantes do fundo que possuíam a idade  $x$  no dia 01 de Janeiro. A terceira coluna apresenta o número  $d_x$  desses indivíduos da segunda coluna que não chegaram vivos ao dia 01 de janeiro do ano seguinte.

- Leia os dados no R e crie um vetor  $mx = dx/nx$  com a razão entre a terceira e a segunda colunas. Dado que um indivíduo da população chega a fazer  $x$  anos de idade, o valor  $m_x = d_x/n_x$  estima a probabilidade dele falecer antes de completar  $x + 1$  anos.
- Queremos um modelo para o aumento de  $m_x$  com  $x$ . Faça um gráfico de dispersão de  $m_x$  versus  $x$ . Existem dois problemas aqui. O primeiro é que o aumento de  $m_x$  é claro mas não é exata pela qual este aumento ocorre. O segundo é que as últimas idades tem um número muito pequeno de indivíduos e assim  $m_x$  não é uma estimativa razoável. Vamos eliminar os dados de idades superiores a 77 anos. Isto ajuda com o segundo problema.
- Para lidar com o primeiro problema, faça um gráfico de dispersão da variável  $\log(m_x)$  versus  $x$ . Você deve observar uma nítida relação linear entre os dois. Isto é, temos

$$\log(m_x) \approx \beta_0 + \beta_1 x$$

o que implica, tomando exponencial dos dois lados, em

$$m_x \approx e^{\beta_0} e^{\beta_1 x} = b_0 \left( e^{\beta_1} \right)^x = b_0 b_1^x$$

- Interprete o parâmetro  $b_1 = e^{\beta_1}$  em termos do aumento da mortalidade com o aumento da idade. Para isto, calcule aproximadamente  $m_{x+1}/m_x$  e conclua que a cada ano adicional de vida a chance de falecer antes de completar o próximo aniversário aumenta em aproximadamente  $e^{\beta_1}$ .
- Ajuste um modelo de regressão linear simples tomando  $\log(m_x)$  como resposta e  $x$  como atributo (além da coluna 1).
- Conclua que a cada ano adicional de vida a chance de falecer antes de completar o próximo aniversário aumenta em aproximadamente 5%. O mais relevante: este aumento não depende de  $x$ : seja um jovem ou um idoso, um ano a mais de vida faz seu risco de morte anual aumentar em 5% do era antes.

**Solução:**

```
# Read the data
dados = read.table("mortalidade.txt", header=T); attach(dados)
mx = dados$mortes/dados$pop ; plot(x, mx)
# eliminando as ultimas faixas etarias, ficando apenas com idades < 78 anos
```

```

par(mfrow=c(1,2))
plot(x[x < 78], mx[x < 78]) ; plot(x[x < 78], mx[x < 78], type="l")
plot(x[x < 78], log(mx[x < 78])); plot(x[x < 78], log(mx[x < 78]), type="l")
res = lm( log(mx[x < 78]) ~ x[x < 78]); summary(res)

```

- () O arquivo `TurtleEggs.txt` contém dados de Ashton *et al.* (2007). Eles mediram o comprimento da carapaça (em mm), de 18 Tartarugas Gopher fêmeas (*Gopherus Polifemo*) do Okeeheelee County Park, Florida. Tomaram também um raio-X para contar o número de ovos em cada uma delas. Faça um gráfico de `eggs` versus *length* para verificar que um modelo linear não é apropriado. Uma regressão com um modelo polinomial de segundo grau parece razoável:

$$\mathbb{E}(Y_i|x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$$

onde  $Y$  é o número de ovos e  $x$  é o comprimento da carapaça.

Ajuste uma regressão de segundo grau. Superponha a parábola de melhor ajuste aos dados no gráfico de dispersão de `eggs` versus *length*. De acordo com <http://udel.edu/~mcdonald/statcurvreg.html>, “a primeira parte do gráfico não é surpreendente, É fácil imaginar por que as tartarugas maiores teriam mais ovos. o declínio no número de ovos acima 310 milímetros comprimento da carapaça É o interessante Este resultado sugere que a produção de ovos diminui nestes tartarugas a medida em que envelhecem e ficam grandes”.

**Solução:**

```

dados = read.table("TurtleEggs.txt", header=T)
attach(dados); plot(length, eggs)
x = length; x2 = length^2
res = lm(eggs ~ x + x2); summary(res)
xx = seq(280, 340, by=1)
yy = -8.999e+02 + 5.857*xx -9.425e-03*xx^2
lines(xx, yy)

```

- 
- () Movimentos planetários em torno das suas estrelas podem causar variações na velocidade radial da estrela. Os dados do arquivo `starvelocity.txt` foram obtidos por Geoff Marcy, no Observatório Lick, e referem-se à estrela Pegasus 51, uma estrela similar ao nosso sol e localizada na constelação de Pégaso a 50 anos-luz da Terra.
- Faça um gráfico da velocidade ( $Y$ ) versus o tempo  $t$ , medido em dias. A velocidade da estrela 51 Pegasi varia de maneira cíclica com um período de aproximadamente 4.231 dias e com uma amplitude de 56 metros por segundo. Isto sugere que a estrela está cercada por um corpo celeste com uma massa aproximadamente igual a metade daquela de Júpiter.
  - Use regressão linear para estimar o modelo

$$\begin{aligned}
Y_t &= a + b \cos(2\pi w t + \phi) + \varepsilon \\
&= a + b \cos(2\pi w t) \sin(\phi) + b \sin(2\pi w t) \cos(\phi) + \varepsilon \\
&= \beta_0 + \beta_1 \cos(2\pi w t) + \beta_2 \sin(2\pi w t) \\
&= \beta_0 + \beta_1 x_{t1} + \beta_2 x_{t2}
\end{aligned}$$

Se a frequência  $w$  tiver de ser estimada teremos um problema de mínimos quadrados não-lineares. Para evitar este problema nesta altura do curso, assuma que a frequência  $w$  é conhecida igual a  $w = 1/4.231$  (isto é, o período orbital é de  $41/w = 4.231$  dias). Com  $w$  fixado, podemos obter as colunas  $X_1$  e  $X_2$  para cada instante  $t$  e ajustar um modelo de regressão usual.

- Trace a curva encontrada no gráfico com os pontos.

**Solução:**

```

dias = c(2.65, 2.80, 2.96, 3.80, 3.90, 4.60, 4.80, 4.90, 5.65, 5.92)
vel = c(-45.5, -48.8, -54.0, -13.5, -7.0, 42.0, 50.5, 54.0, 36.0, 14.5)
plot(dias, vel); % w = 1/4.231; x1 = sin(2*pi*w*dias); x2 = cos(2*pi*w*dias)
res = lm(vel ~ x1 + x2); % summary(res); dd = seq(2.60, 6, by=0.01)
vv = 1.3471 + 49.8894*sin(2*pi*w*dd) + 17.9099*cos(2*pi*w*dd); lines(dd,vv)

```

---

- () *O efeito de centrar os atributos.* O objetivo deste exercício é mostrar que, ao centrar os atributos, temos coeficientes relacionados de forma simples aos coeficientes obtidos com coeficientes não-centrados. Seja  $\hat{\beta}^* = (\hat{\beta}_0^*, \hat{\beta}_1^*, \hat{\beta}_2^*)$  o vetor que minimiza

$$\sum_i (y_i - (\beta_0^* + \beta_1^*(x_{i1} - \bar{x}_1) + \beta_2^*(x_{i2} - \bar{x}_2)))^2$$

Isto é, a matriz de desenho tem suas colunas com média zero (exceto a primeira coluna). Seja  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$  o coeficiente que minimiza a distância entre  $\mathbf{Y}$  e as combinações lineares das colunas *não-centradas*:

$$\sum_i (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2}))^2$$

Mostre que as soluções dos dois problemas estão relacionadas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_0 &= \hat{\beta}_0^* - \hat{\beta}_1^* \bar{x}_1 - \hat{\beta}_2^* \bar{x}_2 \\ \hat{\beta}_1 &= \hat{\beta}_1^* \\ \hat{\beta}_2 &= \hat{\beta}_2^*\end{aligned}$$

- 
- () Prove que  $m = \mathbb{E}(Y)$  minimiza  $\mathbb{E}(Y - m)^2$ .

**Solução:** some e subtraia  $\mathbb{E}(Y)$  dentro do parênteses, expanda o quadrado e tome esperança de cada termo. A seguir, derive com relação a  $m$ .

- 
- () INCOMPLETO AINDA: Estudar a matriz  $\mathbf{X}'\mathbf{X}^{-1}$ : Se  $\mathbf{X}$  tiver colunas linearmente independentes então  $\mathbf{X}'\mathbf{X}$  é inversível e definida positiva. Ajudar na interpretacao do elemento  $(i, j)$  de  $\mathbf{X}'\mathbf{X}^{-1}$  como correlação parcial.

- 
- () Obtenha o arquivo `miete03.asc` no site [http://www.stat.uni-muenchen.de/service/datenarchiv/miete/miete03\\_e.html](http://www.stat.uni-muenchen.de/service/datenarchiv/miete/miete03_e.html). Ele contem os dados de aluguel de 2053 apartamentos em Munique em 2002 com vários atributos/preditores potenciais, todos descritos na página. Use este dados no restante desta lista.

Existem duas possíveis variáveis resposta: `nm`, o aluguel líquido em euros, e `nqm`, este aluguel dividido pela área do apartamento. Vamos usar a primeira delas como resposta  $y$ . Elimine a segunda variável do restante da análise (não a coloque entre os preditores!!).

- Separar o conjunto de 2053 exemplos em dois conjuntos, um com 600 exemplos escolhidos ao acaso para avaliar a qualidade do ajuste de vários modelos (amostra de validação) e outro com os  $2053 - 600 = 1453$  restantes para ser a amostra de treinamento. Use o comando `sample` para selecionar os dados.

- ii. Usando a amostra de treinamento e as 11 variáveis preditoras, ajuste um modelo de regressão linear.
- iii. Obtenha o  $R^2$  deste modelo completo.
- iv. Obtenha o valor da estatística  $F$  (e seu p-valor) para a hipótese nula de que todos os coeficientes são zero.
- v. Verifique que todos os preditores é significativo num teste de  $H_0 : \beta_j = 0$  versus  $H_A : \beta_j \neq 0$  observando o valor da estatística  $t$  e o seu p-valor.
- vi. Obtenha o intervalo de confiança de 95% de cada um dos coeficientes.
- vii. As últimas 7 variáveis são qualitativas com duas categorias apenas. Considerando cada uma delas individualmente, qual o efeito esperado em preço que cada uma delas produz? Qual tem o maior efeito? Note que esta variável de efeito máximo não é aquela com o menor p-valor (ou o maior valor absoluto  $t^*$  da estatística  $t$ )? Isto é, grande significância estatística não implica maior efeito na resposta.
- viii. Considere um modelo alternativo sem os preditores `bez` e `zh0`. Sejam  $M_f$  o modelo completo e  $M_r$  o modelo reduzido. Avalie qual dos dois é melhor calculando o  $SPSE$  de cada modelo onde

$$SPSE_M = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{x}'_i \boldsymbol{\beta}^{(-i)})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{y_i - \hat{y}_i}{1 - h_{ii}} \right)^2$$

Isto pode ser obtido com os seguintes comandos em R:

```
# ajustando o modelo completo de regressao linear
modg = lm(nm ~ ., dados)
```

```
# obtendo vetor com os valores de H[i,i]
hii = influence(modg)$hat
```

```
# calculando o leave-one-out cross-validation measure (loocv)
loocv = sum( ( modg$res/(1-hii) )^2 )/length(hii)
```

- (i) Se quisermos ajustar uma função  $y = f(x)$  usando um conjunto de dados  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ , e o critério de mínimos quadrados, devemos minimizar a função:
  - (A)  $\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))$
  - (B)  $\sum_{i=1}^n |y_i - f(x_i)|$
  - (C)  $\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2$
  - (D)  $\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$  onde  $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i/n$ .
- (ii) Partículas são emitidas num certo meio, todas com a mesma velocidade constante  $\beta$ . Deseja-se estimar esta velocidade a partir de dados estatísticos. São feitos  $n$  experimentos e neles são mensurados o tempo  $t_i$  e a distância  $d_i$  que a partícula percorreu até encontrar um obstáculo. Assim, temos  $(t_1, d_1), \dots, (t_n, d_n)$ . Como existem pequenos erros de mensuração, usmaos todos os dados e o critério de mínimos quadrados para obter uma boa estimativa de  $\beta$ . Explique como isto é feito e obtenha a fórmula para a estimativa  $\hat{\beta}$ .
- (iii) (de Boyd e Vandenberghe) Temos  $N$  pacientes que podem ter qualquer número (incluindo zero) dentre  $K$  possíveis sintomas. Isto fica expresso numa matriz binária  $S$  de dimensão  $N \times K$  tal que o elemento  $ij$  dessa matriz é

$$S_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se o paciente } i \text{ tem o sintoma } j \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Explique em palavras cada uma das seguintes expressões matriciais. Inclua as dimensões e descreva as entradas.

- $S \mathbf{1}$ , onde  $\mathbf{1}$  é o vetor coluna de dimensão apropriada e composto apenas de 1's:  $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^t$ .
- $S^t \mathbf{1}$
- $S^t S$
- $S S^t$
- $\|\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j\|^2$  onde  $\mathbf{s}_k^t$  é a vetor-linha  $k$  da matriz  $S$ .

() (do curso EE103/CME103: Introduction to Matrix Methods lecionado por Stephen Boyd na Stanford University, em <http://stanford.edu/class/ee103/>) Uma rede de computadores possui  $K$  links entre *pares* de máquinas. Cada link possui um tempo médio de transmissão de um pacote de tamanho padrão. O tempo médio (ou tempo esperado) do link  $k$  é escrito como  $\beta_k$  para  $k = 1, 2, \dots, K$ . O tempo real em cada transmissão particular é um pouco mais ou um pouco menos que esse tempo médio  $\beta_k$ . Deseja-se estimar os valores dos  $\beta_k$  e para isto coleta-se um grande número  $N$  de tempos  $t_1, t_2, \dots, t_N$  de transmissão de pacotes de tamanho padrão. Cada tempo está associado com um determinado caminho entre os nós da rede de forma que o tempo  $t_i$  é o tempo total gasto para percorrer uma determinada sequência de de um ou mais links da rede. Este caminho é conhecido para cada um dos tempos  $t_k$  mas não setem o tempo gasto em cada link separadamente.

- Explique como você poderia usar a técnica de mínimos quadrados para estimar os valores  $\beta_k$ . Especifique o vetor  $\mathbf{Y}$  e a matriz  $\mathbf{X}$  do modelo de regressão linear a ser usado.
- Que restrições você precisa impor em  $K$  e  $N$  para que a estimativa seja possível?
- Que característica adicional você precisa impor para que todos os  $\beta_k$  sejam estimados? Se um dos links nunca aparecer nos caminhos da amostra de  $N$  tempos, ele pode ser estimado?

() (Do curso EE133A - Applied Numerical Computing, lecionado por Lieven Vandenberghe na UCLA, <http://www.seas.ucla.edu/~vandenbe/ee133a.html>) Neste problema, vamos usar mínimos quadrados para ajustar um círculo a um conjunto de pontos  $(u_i, v_i)$  do plano que estão localizados aproximadamente em torno de uma órbita circular, como na Figura 12.1.

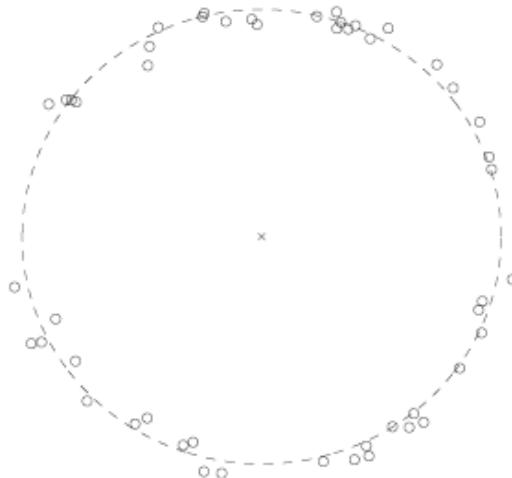


Figura 12.1: Conjunto de  $n$  pontos  $(u_i, v_i)$  localizados aproximadamente em torno de uma órbita circular.

Vamos denotar por  $(u_c, v_c)$  as coordenadas do centro do círculo e por  $R$  o seu raio, todos desconhecidos. Desejamos obter estimativas para  $u_c, v_c$  e  $R$ . Um ponto  $(u, v)$  está no círculo se  $(u - u_c)^2 + (v - v_c)^2 - R^2 = 0$ . Quando um ponto encontra-se próximo do círculo podemos

esperar a diferença (em valores absolutos)  $| (u - u_c)^2 + (v - v_c)^2 - R^2 | \approx 0$ . Se fizermos esta diferença pequena para o conjunto de todos os  $n$  pontos teremos um único círculo passando aproximadamente pelos pontos. Por isto, vamos procurar pelos valores de  $u_c, v_c$  e  $R$  que minimizam

$$Q(u_c, v_c, R) = \sum_{i=1}^n ((u_i - u_c)^2 + (v_i - v_c)^2 - R^2)^2$$

onde os  $n$  pontos  $(U_i, V_i)$  são dados e  $u_c, v_c$  e  $R$  são desconhecidos.

- Abra os quadrados  $(u_i - u_c)^2$  e  $(v_i - v_c)^2$  e defina  $\beta_0 = -(u_c^2 + v_c^2 - R^2)$ .
  - Mostre que este problema pode ser resolvido usando regressão linear. Identifique o vetor  $\mathbf{Y}$ , a matriz  $\mathbf{X}$  e o vetor  $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)$ .
  - O arquivo `DadosCirculo.txt` contém as coordenadas dos 50 pontos da Figura 12.1. Use estes pontos para escrever um pequeno script em **Scilab** e estimar  $u_c, v_c$  e  $R$ .
- (a) A fatoração QR para resolver as equações normais. Vamos comparar a acurácia dos dois métodos para resolver um problema de mínimos quadrados

$$\min_{\beta} \|\mathbf{Y} - \mathbf{X} \beta\|^2$$

Use

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-k} & 0 \\ 0 & 10^{-k} \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} -10^{-k} \\ 1 + 10^{-k} \\ 1 - 10^{-k} \end{bmatrix}$$

para  $k = 6, 7$  e  $8$ .

- Escreva as equações normais e obtenha a solução  $\hat{\beta}$  analiticamente (isto é, no papel, sem usar o **Scilab**).
- Resolva o problema de mínimos quadrados no **Scilab** para  $k = 6, 7$  e  $8$  usando o método nativo do programa:  $\mathbf{b} = \mathbf{X} \mathbf{y}$ . Este método é baseado na fatoração QR.
- Resolva agora usando a expressão matricial  $\mathbf{b} = (\mathbf{X}' * \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{y}$ . Compare os resultados com os que você encontrou no item anterior. DICA: Digite `format("e", 20)`; para o **Scilab** exibir mais casas decimais.

## Algumas soluções

- (a) Pacientes e sintomas na matriz  $S$ :

- $S \mathbf{1}$ : vetor-coluna de dimensão  $N$  com  $i$ -ésima entrada é igual ao número de sintomas do paciente  $i$ . Aqui, o vetor coluna  $\mathbf{1}$  é de dimensão  $K$ .
  - $S^t \mathbf{1}$ : vetor-coluna de dimensão  $K$  com  $k$ -ésima entrada é igual ao número de pacientes com o sintoma  $k$ . Aqui, o vetor coluna  $\mathbf{1}$  é de dimensão  $N$ .
  - $S^t S$ : Matriz quadrada  $K \times K$  cuja entrada  $(r, u)$  é o número de pacientes que têm os sintomas  $r$  e  $u$  quando  $r \neq u$ . Na diagonal, o elemento  $(r, r)$  da matriz é o número de pacientes com o sintoma  $r$ . Esta matriz é simétrica.
  - $S S^t$ : Matriz simétrica e quadrada  $N \times N$  cuja entrada  $(r, u)$  é o número de sintomas que os pacientes  $r$  e  $u$  têm em comum, quando  $r \neq u$ . Na diagonal, o elemento  $(r, r)$  da matriz é o número de sintomas do paciente  $r$ .
  - $\|\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j\|^2$ : número de sintomas que um dos dois pacientes ( $i$  ou  $j$ ) tem, mas o outro não.
- (b)  $Y_i = u_i^2 + v_i^2$  e a matriz  $\mathbf{X}$  tem sua linha  $i$  da forma  $(1, 2u_i, 2v_i)$  com  $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2) = (R^2 - u_c^2 - v_c^2, u_c, v_c)$ . Script scilab:

```

plot(u, v, "o");
a=gca(); // get the handle of the current axes
a.fov="on"; // set the two axes with equal scale

y = u.^2 + v.^2; // vetor y
X = [ones(50,1), 2*u, 2*v]; // matriz X
b = (X'*X) \ (X'*y); // coeficientes de minimos quadrados
b

uc = b(2);
vc = b(3);
R = sqrt(b(1)+ uc^2 + vc^2);

clf();
t = linspace(0, 2*pi, 1000);
plot(u, v, "o", R * cos(t) + uc, R * sin(t) + vc, "-");
a=gca(); // get the handle of the current axes
a.fov="on";

```

(c) Usando a expressão da solução de mínimos quadrados, temos:

$$\begin{aligned}
\hat{\beta} &= (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}' \mathbf{Y}) \\
&= \left( \begin{bmatrix} 1 & 10^{-k} & 0 \\ 1 & 0 & 10^{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-k} & 0 \\ 0 & 10^{-k} \end{bmatrix} \right)^{-1} \left( \begin{bmatrix} 1 & 10^{-k} & 0 \\ 1 & 0 & 10^{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -10^{-k} \\ 1 + 10^{-k} \\ 1 - 10^{-k} \end{bmatrix} \right) \\
&= \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Verifique agora as diferentes opções disponíveis no Scilab. Você verá que apenas o cálculo numérico feito usando a decomposição QR fornece a resposta correta:

```

k = -8;
X = [1 1; 10^k 0; 0 10^k];
y = [-10^k; 1 + 10^k; 1 - 10^k];

b1 = X \ y;
b2 = inv(X'*X)*X'*y;
b3 = (X' * X) \ (X' * y);

format("e", 20);
b1
b2
b3

```

(d) Um problema com seno . Por figura.

## Bibliografia

- Rao, C.R. (1973) *Linear Statistical Inference and Its Applications*, 2nd Edition. Wiley-Interscience, New York.

- Seber, G. A. F., Lee, A. J. (2003) Linear Regression Analysis, 2nd Edition. Wiley-Interscience, New York.



# Capítulo 13

## Regressão Logística



- (a) No modelo de regressão logística, a probabilidade de sucesso na execução de tarefas por crianças de idade  $x$  é dada por

$$p(x) = \frac{1}{1 + \exp(-\beta(x - \mu))}.$$

- Verifique que  $p(\mu) = 0.5$ .
- Verifique que  $\log(p(x)/(1 - p(x))) = \beta(x - \mu)$ . Uma vantagem desta escala de log da odds é não ter limites (como 0 e 1). De fato, trace um gráfico de  $\log(p/(1 - p))$  versus  $p$ . Veja que  $\log(p/(1 - p))$  pode ser positivo, negativo, zero...
- Verifique que a derivada de  $p(x)$  com relação a  $x$  avaliada no ponto  $x = \mu$  é igual a  $\beta/4$ . Assim, o valor de  $\beta$  diz qual é a taxa de variação de  $p(x)$  no “ponto central” da logística.
- Responda então quais das seguintes opções é uma interpretação correta para o parâmetro  $\mu$ :
  - $\mu$  é a idade média em que as crianças executam a tarefa.
  - Aproximadamente 50% das crianças com idade  $\mu$  executam a tarefa.
  - $\mu$  é a idade em que uma criança tem 50% de chance de executar a tarefa.
  - Dado que uma criança que executa a tarefa, com 50% de chance ela tem idade  $\mu$ .
  - Aproximadamente 50% das crianças com idade  $x \leq \mu$  executam a tarefa.
- Suponha que, além da idade, exista também efeito de sexo. Para a  $i$ ésima criança, seja  $s_i$  uma variável binária indicando se ela é do sexo masculino ( $s_i = 0$ ) ou do sexo feminino ( $s_i = 1$ ). O modelo simples é expandido para

$$p_i = g(x_i, s_i) = \frac{1}{1 + \exp(-\beta_0 - \beta_1 x_i - \beta_2 s_i)}.$$

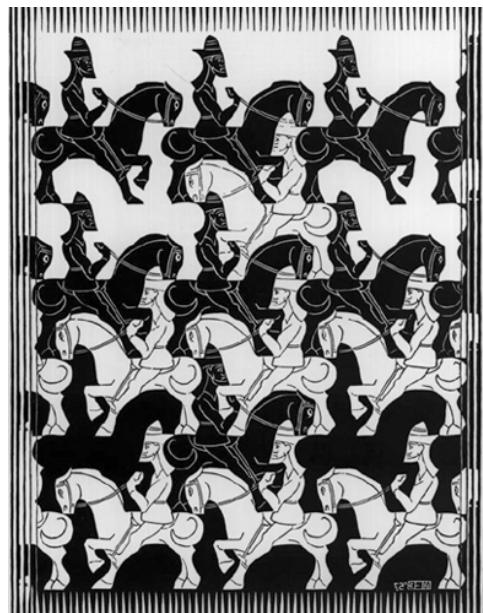
Verifique que este modelo implica que a odds de ter sucesso no caso feminino é igual a odds de ter sucesso no caso masculino multiplicada por  $e^{\beta_2}$ . Isto é, verifique que

$$\frac{p(x, 1)}{1 - p(x, 1)} = \frac{p(x, 0)}{1 - p(x, 0)} e^{\beta_2}$$

Assim, o efeito de passar de masculino para feminino é multiplicar a razão de chances masculina por  $e^{\beta_2}$ . Suponha, por exemplo, que  $\beta_2 = 1.2$ . A odds feminina igual a  $e^{\beta_2} = 3.32$  vezes a odds masculina (digamos, 2 para 98).

## Capítulo 14

# Regularização



Aqui vao os exercicios



## Capítulo 15

# Máxima Verossimilhança



- (a) Suponha que  $X_1, X_2, \dots, X_n$  sejam v.a.'s i.i.d. com distribuição Poisson com parâmetro  $\theta$ . Obtenha o MLE de  $\theta$ . Supondo que  $n = 4$  e que as observações tenham sido 3, 0, 1, 1 diga qual o valor do MLE.
- (b) No Brasil, o Ministério da Previdência Social assegura um benefício de auxílio-doença ao trabalhador que paga pelos dias em que ele foi impedido de trabalhar por doença ou acidente. Como parte dos pagamentos é efetuado pelas empresas, um sindicato patronal de empresas de ônibus urbano de certa cidade contratou uma consultoria atuarial para analisar o número de faltas ao trabalho por doença. Dados de 20 empresas de ônibus urbano foram coletados.

O número de dias faltosos na empresa  $i$  é denotado por  $Y_i$  e depende do tamanho da empresa: tudo o mais igual, esperamos ver mais dias faltosos numa empresa enorme, com muitos funcionários do que numa empresa pequena, com poucos funcionários. Vamos mensurar o tamanho da empresa pelo número de homem-hora trabalhado no período de observação. Este número de homem-hora é representado por  $h_i$  e é medido em unidades de 10 mil horas. Assim,  $h_i = 3.5$  representa 35 mil homens-horas. Quanto maior  $h_i$ , maior tende a ser o número de dias parados pois a exposição ao risco é maior na empresa com  $h_i$  maior.

Para cada empresa defina o parâmetro  $\lambda_i$  que representa o número médio ou esperado de dias faltosos na empresa  $i$  por cada 10 mil homens-hora. Veja que 12 homens trabalhando 40 horas por semana ao longo de  $21 = 30 - 9$  dias por mês dá um total de  $12 \times 40 \times 21 = 10080$ . Assim, grosseiramente, 10 mil homens/horas representam 12 homens trabalhando em tempo integral num mês.

O modelo estatístico para os dados é que  $Y_1, \dots, Y_{20}$  são independentes. Entretanto, essas variáveis aleatórias não são identicamente distribuídas pois os valores de  $h_1, \dots, h_{20}$  são dife-

rentes. Assim, supõe-se que

$$Y_i \sim \text{Poisson}(\lambda_i) \text{ ou } \text{Poisson}(h_i\theta)$$

para  $i = 1, \dots, 20$ . Os dados são do seguinte tipo:

Empresa	$h_i$	$y_i$
1	94.5	5
2	15.7	1
3	62.9	5
...	...	...

O interesse é em fazer inferência sobre o valor desconhecido  $\theta$ , a taxa (por 10 mil homam-hora) de dias ausentes por doença nas empresas. Em particular, para uma nova empresa que vai fazer seguro-doença para cobrir faltas de empregados, é preciso saber qual a expectativa de faltas durante um mês se ela tem um certo número  $h$  de homens-hora de trabalho.

Calcule:

- o EMV de  $\theta$ .
- O EMV é não-viciado?
- Calcule o número de informação de Fisher  $I(\theta)$ .
- É verdade que a informação  $I_n(\theta)$  com  $n$  observações é igual a  $n$  vezes a informação com uma única informação? Como a informação aumenta com  $n$ ?
- Suponha que os dados sejam esses abaixo:

```
h <- c(118.3, 13.4, 68.3, 141.6, 113.1, 63.6, 135.5, 107.5, 35.2,
      28.1, 34.7, 42.5, 139.7, 140.4, 79.2, 148.2, 28, 72.4, 50.9, 89.1)
y <- c(8, 0, 6, 18, 7, 6, 13, 4, 7, 4, 0, 3, 26, 10, 4, 15, 7, 10,
      9, 14)
```

Usando um diagrama de dispersão, verifique se existe associação entre  $h$  e  $y$ . Estime  $\theta$  usando o MLE.

- (c) Vinte empresas de transporte urbano de passageiros via ônibus foram analisadas do ponto de vista dos acidentes de trânsito ocorridos ao longo do período de observação. Vamos assumir que as contagens do número de acidentes em cada empresa siga uma distribuição de Poisson com valor esperado  $\theta_i h_i$  onde  $h_i$  é o número total de quilômetros que o conjunto de ônibus da empresa  $i$  trabalhou no período. O valor  $h_i$  é medido em unidades de 1000 quilômetros de forma que, se  $h_i = 3.2$ , isto significa que os ônibus da empresa  $i$  rodaram 3200 quilômetros no período de observação.

O parâmetro  $\theta_i$  é a taxa de acidentes (por 1000 quilômetros rodados) e ele pode variar entre as empresas. Deseja-se verificar se esta variação pode ser devida à algumas características que distinguem as empresas. Em particular, o interesse estava focado em duas características. As empresas podem ser classificadas em quatro grupos distintos e esperamos que o valor de  $\theta_i$  seja diferente nesses quatro grupos. As empresas são classificadas em 4 grupos de acordo com as seguintes categorias:

- Algumas empresas promovem cursos de treinamento regulares para aprimorar as habilidades de dirigir de forma segura e responsável. Seja  $Z_1 = 0$  se a empresa promove estes cursos e  $Z_1 = 1$ , caso contrário.
- $Z_2 = 0$  se a empresa cobra de cada motorista responsável por um acidente parte das perdas causadas (o valor cobrado é limitado a um máximo) e  $Z_2 = 1$ , caso contrário

No caso de  $Z_2$ , se o motorista envolvido num acidente não é considerado culpado do mesmo, a cobrança não é feita. A cobrança também é limitada a um máximo de 1 salário mensais. Em cada mês, até um máximo de 10% do salário é descontado da folha de pagamentos.

Espera-se que empresas com  $Z_1 = 1$  e  $Z_2 = 1$  tenham  $\theta_i$  maiores que aquelas com  $Z_1 = 0$  e  $Z_2 = 0$ . Empresas com  $Z_1 = 0$  e  $Z_2 = 1$  ou  $Z_1 = 1$  e  $Z_2 = 0$  seriam casos intermediários. Pode-se pensar que a variável  $Z_1$  representa uma polítiça de prevenção de acidentes enquanto a variável  $Z_2$  representa uma polítiça de punição por condução imprudente.

É claro que, mesmo dentro de um dos grupos ( $Z_1 = 1$  e  $Z_2 = 1$ , por exemplo) as empresas não são idênticas e portanto seus  $\theta_i$ 's podem diferir. Entretanto, vamos supor que a maior parte das diferenças entre seus  $\theta_i$ 's é devida às polítiças de prevenção e de punição. Ainda sobraria um resíduo de causas não controladas tornando os  $\theta_i$ 's dentro de cada um dos 4 grupos ligeiramente diferentes. No entanto, nós vamos ignorar estas diferenças residuais e supor que empresas numa mesma categoria tenham  $\theta_i$ 's idênticos.

Queremos agora estimar o impacto dessas polítiças de prevenção/punição na redução do número de faltas. Existe algum impacto? Qual polítiça é mais eficaz? Como estudar isto? Uma possibilidade é fazer uma análise separada para cada um dos 4 grupos possíveis. Outra alternativa muito melhor é fazer um único modelo em que todos os quatro grupos estejam presentes e com parâmetros medindo o impacto dos programas de prevenção/punição. Para isto, vamos assumir que

$$Y_i \sim \text{Poisson}(h_i \theta_i)$$

para  $i = 1, \dots, 20$  que elas sejam v.a.'s independentes.

Existem quatro valores possíveis para  $\theta_i$ , dependendo da categoria à qual a empresa  $i$  pertence. Vamos supor que, ao passar de  $Z_1 = 0$  para  $Z_1 = 1$  o valor de  $\theta_i$  seja aumentado por um fator multiplicativo. O mesmo ao passar de  $Z_2 = 0$  para  $Z_2 = 1$ . Isto é, supomos que

$$\theta_i = e^{\beta_0} e^{\beta_1 Z_{i1}} e^{\beta_2 Z_{i2}} = e^{\beta_0 + \beta_1 Z_{i1} + \beta_2 Z_{i2}} = \begin{cases} e^{\beta_0}, & \text{if } Z_{i1} = 0 \text{ and } Z_{i2} = 0 \\ e^{\beta_0} e^{\beta_1}, & \text{if } Z_{i1} = 1 \text{ and } Z_{i2} = 0 \\ e^{\beta_0} e^{\beta_2}, & \text{if } Z_{i1} = 0 \text{ and } Z_{i2} = 1 \\ e^{\beta_0} e^{\beta_2} e^{\beta_1}, & \text{if } Z_{i1} = 1 \text{ and } Z_{i2} = 1 \end{cases}$$

onde  $Z_{i1}$  e  $Z_{i2}$  são os valores das variáveis independentes para a empresa  $i$ . Assim, se a empresa estiver no grupo  $Z_1 = 0, Z_2 = 0$ , ela terá  $\theta_i = e^{\beta_0}$ . Se ela não tiver cursos de treinamento ( $Z_{i1} = 1$ ) e tiver a polítiça de punição ( $Z_{i2} = 0$ ), ela terá uma taxa de acidentes por 10 mil quilômetros igual a  $e^{\beta_0 + \beta_1} = e^{\beta_0} e^{\beta_1}$ . Assim, ela tem a sua taxa  $\theta_i$  como sendo a taxa  $e^{\beta_0}$  do grupo de referência formado por  $Z_1 = 0, Z_2 = 0$  multiplicada por  $e^{\beta_1}$ . Se  $\beta_1 > 0$ , teremos  $e^{\beta_1} > 1$  e a taxa do grupo  $Z_1 = 1, Z_2 = 0$  será maior que a do grupo de referência  $Z_1 = 0, Z_2 = 0$ . Se  $\beta_1 < 0$ , teremos  $0 < e^{\beta_1} < 1$ , reduzindo a taxa do grupo de referência. Assim, o parâmetro  $\beta_1$  representa o efeito da polítiça de prevenção. Do mesmo modo, o parâmetro  $\beta_2$  representa o efeito da polítiça de punição.

Os dados de  $h_i$  e  $y_i$  são os seguintes:

```
h <- c(118.3, 13.4, 68.3, 141.6, 113.1, 63.6, 135.5, 107.5, 35.2,
      28.1, 34.7, 42.5, 139.7, 140.4, 79.2, 148.2, 28, 72.4, 50.9, 89.1)
y <- c(8, 0, 6, 18, 7, 6, 13, 4, 7, 4, 0, 3, 26, 10, 4, 15, 7, 10,
      9, 14)
```

Os dados de  $Z_1$  e  $Z_2$  são os seguintes:

```

Z1 <- c(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1),
Z2 <- c(0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1),

```

- Descreva o modelo estatístico.
- Interprete os parâmetros do modelo. Para isto, verifique qual o efeito em  $E(Y_i)$  de uma empresa mudar de uma categoria para outra categoria. Compare o valor de  $\theta_i$  e de  $\log(\theta_i)$  para uma empresa que tenha  $Z_1 = 0$  e  $Z_2 = 0$  e outra empresa com  $Z_1 = 1$  e  $Z_2 = 0$ . E com uma empresa com  $Z_1 = 1$  e  $Z_2 = 1$ . Faça comparações entre todos os 6 tipos de *pares* de empresas possíveis.
- Obtenha o EMV e a MATRIZ  $3 \times 3$  de informação de Fisher para os parâmetros do modelo.
- Obtenha o EMV e a MATRIZ  $3 \times 3$  de informação de Fisher para os parâmetros  $e^{\beta_0}, e^{\beta_1}, e^{\beta_2}$ .

- 
- (d) Considere um modelo estatístico para dados de sobrevivência que supõe que  $X_1, X_2, \dots, X_n$  são i.i.d. com distribuição exponencial parametrizada por  $\lambda$ . Suponha que, com  $n = 10$ , os dados observados sejam os seguintes: 1.21, 0.15, 2.02, 0.37, 2.55, 2.20, 1.06, 0.10, 0.35, e 0.15. Use o conjunto de comandos R dados abaixo para desenhar a função de verossimilhança para o parâmetro  $\lambda$ . Procure entender o que cada comando está fazendo.

```

dados <- c(1.21,0.15,2.02,0.37,2.55,2.20,1.06,0.10,0.35,0.15)
lambda <- seq(0,3,length=300)
veross <- (lambda^10) * exp(-lambda * sum(dados))
plot(lambda,veross,type="l")

```

Os comandos abaixo sobrepõem uma segunda curva de verossimilhança baseada numa possível segunda amostra independente da primeira e gerada pelo mesmo mecanismo.

```

dados2 <- c(0.08,2.72,0.04 0.27 0.99 0.25 0.39 1.84 1.60 3.51
veross2 <- (lambda^10) * exp(-lambda * sum(dados2))
lines(lambda,veross2,lty=2)

```

Construa agora uma função que recebe os dados da amostra como entrada e que retorna o gráfico da verossimilhança para  $\lambda \in (a, b)$ .

```

veross.exp <-function(x, a, b)
{
  # função para desenhar a função de verossimilhança
  # para dados exponenciais
  # INPUT: x = dados de entrada
  ene <- length(x)
  lambda <- seq(a,b,length=300)
  veross <- (lambda^ene) * exp(-lambda * sum(x))
  plot(lambda, veross, type= "l",ylab= "verossimilhança")
  title("Função de verossimilhança para dados exponenciais")
  return()
}

```

Gere um conjunto de dados de uma exponencial com um parâmetro  $\lambda$  num intervalo  $(a, b)$  a sua escolha. Chame a função acima com os dados que você gerou e verifique se o máximo da função de verossimilhança fica próximo do valor  $\lambda$  que você escolheu. Repita o exercício escolhendo diferentes tamanhos  $n$  de amostra.

---

- (e) A distribuição exponencial será usada como modelo para o tempo de sobrevida de pacientes diagnosticados com certo tipo de câncer. Sabe-se que a distribuição de probabilidade do tempo de sobrevida depende do estágio em que o câncer foi diagnosticado e do sexo do indivíduo. Considere duas variáveis independentes  $x_1$  e  $x_2$  medidas em cada indivíduo. Para o  $i$ -ésimo indivíduo,  $x_{i1} = 1$ , se ele é homem, e  $x_{i1} = 0$ , se mulher. A medida  $x_{i2}$  é um valor contínuo entre 1 a 10 e mede o estágio do câncer no momento do diagnóstico, um estágio mais avançado correspondendo a valores maiores.

Um modelo estatístico para este problema supõe que  $Y_1, \dots, Y_n$  sejam variáveis aleatórias independentes mas não identicamente distribuídas. O valor esperado  $E(Y_i) = 1/\lambda_i$  depende dos valores de  $x_{i1}$  e de  $x_{i2}$ . Isto é, cada indivíduo tem uma distribuição própria para o seu tempo de vida adicional, uma exponencial com valor esperado  $1/\lambda_i$  que depende de seu sexo e do estágio do seu câncer no momento do diagnóstico. Os dados na tabela 15.1 constituem uma amostra de 12 indivíduos com os respectivos valores de  $y_i$ ,  $x_{i1}$ , e  $x_{i2}$ .

$i$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$y_i$	3.19	16.87	24.65	2.04	5.73	1.03	6.02	42.41	36.08	7.34	24.88	5.90
$x_{i1}$	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1
$x_{i2}$	11	67	92	32	85	36	20	69	58	47	100	72

Tabela 15.1: Tabela com tempos de vida (em meses) de 12 indivíduos após diagnóstico com câncer.

Um modelo que é muito usado é o modelo linear generalizado que adota a seguinte relação entre o parâmetro  $\lambda$  e as características  $x_1$  e  $x_2$ :

$$\lambda_i = \exp(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2})$$

onde  $\boldsymbol{\theta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)$  é o parâmetro desconhecido. Dessa forma, a distribuição de probabilidade do tempo sobrevida  $Y_i$  de um dado indivíduo dependem apenas de seu sexo e do estágio da doença e

$$E(Y_i) = \frac{1}{\lambda_i} = e^{-(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2})}$$

Podemos também escrever

$$\begin{aligned} E(Y_i) &= e^{-\beta_0} e^{-\beta_1 x_{i1}} e^{-\beta_2 x_{i2}} \\ &= e^{-\beta_0} \left( e^{-\beta_1} \right)^{x_{i1}} \left( e^{-\beta_2} \right)^{x_{i2}} \\ &= b_0 b_1^{x_{i1}} b_2^{x_{i2}} \quad \text{onde } b_j = e^{\beta_j} \\ &= \begin{cases} b_0 b_2^{x_{i2}}, & \text{se } i \text{ é mulher} \\ b_0 b_1 b_2^{x_{i2}}, & \text{se } i \text{ é homem} \end{cases} \end{aligned}$$

- Suponha que  $\boldsymbol{\theta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2) = (-2.0, -0.4, -0.005)$ . Suponha que os valores de  $x_2$  variam entre 10 e 100 para os diversos indivíduos de uma população de interesse. Num único gráfico, trace duas curvas que mostrem a relação entre  $E(Y)$  versus  $x_2$  para homens e para mulheres.
- V ou F: Considere dois indivíduos no mesmo estágio  $x_2$  da doença mas de sexos diferentes. Para obter o tempo esperado de sobrevida do homem basta somar  $b_1 = \exp(-\beta_1)$  ao tempo esperado de sobrevida da mulher.
- V ou F: Suponha que  $\beta_1 > 0$ . Por exemplo, suponha que  $\beta_1 = 0.2$ . Então o fato de ser homem reduz o tempo esperado de sobrevida pelo fator  $\exp(-0.2) \approx 0.82$  (isto é, reduz em aproximadamente 18%) em relação ao tempo esperado de uma mulher com o mesmo valor de  $x_2$ .

- iv. V ou F: Sejam  $Y_1$  e  $Y_2$  os tempos esperados de sobrevida de um homem e uma mulher, respectivamente, ambos com  $x_2 = 50$ . Então  $E(Y_1) = e^{\beta_1}E(Y_2)$ . Entretanto, se  $X_2$  não for igual a 50 essa relação entre  $E(Y_1)$  e  $E(Y_2)$  não é válida.
- v. Sejam  $Y_i$  e  $Y_j$  os tempos de sobrevida de dois homens com  $x_{i2} = 50$  e  $x_{j2} = 50 + x$ . O efeito de passar do estágio  $x_2 = 50$  para o estágio  $x_2 = 50 + x$  pode ser explicado como: multiplique o tempo esperado de vida de  $Y_i$  por  $b_2^x = \exp(-\beta_2 x)$ .
- vi. O efeito em  $E(Y)$  de aumentar em  $x$  unidades o estágio  $x_2$  da doença entre os homens é diferente do efeito desse mesmo aumento entre as mulheres.
- vii. Obtenha a densidade conjunta das observações. Este modelo pertence à família exponencial de distribuições?
- viii. Qual a estatística suficiente para estimar  $\boldsymbol{\theta}$ ?
- ix. Para obter o estimador de máxima verossimilhança (EMV) de  $\boldsymbol{\theta}$ , encontre a equação de verossimilhança mostrando que

$$Dl(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \partial l / \partial \beta_0 \\ \partial l / \partial \beta_1 \\ \partial l / \partial \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -n + \sum_i y_i \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) \\ -n\bar{x}_1 + \sum_i y_i x_{i1} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) \\ -n\bar{x}_2 + \sum_i y_i x_{i2} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde  $\bar{x}_j = \sum_i x_{ij}/n$ .

- x. Mostre que a matriz com as derivadas parciais de segunda ordem é dada por

$$\begin{aligned} D^2 l(\boldsymbol{\theta}) &= \begin{bmatrix} \partial^2 l / \partial \beta_0^2 & \partial^2 l / \partial \beta_1 \beta_0 & \partial^2 l / \partial \beta_2 \beta_0 \\ \partial^2 l / \partial \beta_0 \beta_1 & \partial^2 l / \partial \beta_1^2 & \partial^2 l / \partial \beta_2 \beta_1 \\ \partial^2 l / \partial \beta_0 \beta_2 & \partial^2 l / \partial \beta_1 \beta_2 & \partial^2 l / \partial \beta_2^2 \end{bmatrix} \\ &= - \begin{bmatrix} \sum_i y_i \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) & \sum_i y_i x_{i1} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) & \sum_i y_i x_{i2} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) \\ \sum_i y_i x_{i1} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) & \sum_i y_i x_{i1}^2 \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) & \sum_i y_i x_{i1} x_{i2} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) \\ \sum_i y_i x_{i2} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) & \sum_i y_i x_{i1} x_{i2} \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) & \sum_i y_i x_{i2}^2 \lambda_i(\boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

- xi. Se  $\beta_1 = \beta_2 = 0$  caímos no caso usual de variáveis i.i.d. exponenciais com parâmetro comum  $\lambda = \exp(\beta_0)$ . A estimativa de máxima verossimilhança de  $\lambda$  é  $1/\bar{y}$  e portanto  $\beta_0$  pode ser estimado como  $-\log(\bar{y})$ . Use  $\boldsymbol{\theta}^{(0)} = (\bar{y}, 0, 0)$  como valor inicial para  $\boldsymbol{\theta}$  num procedimento de Newton-Raphson para obter a estimativa de máxima verossimilhança de  $\boldsymbol{\theta}$ . Minhas contas produziram  $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{EMV} = (-0.614, -0.629, -0.026)$ .
- xii. Interprete numericamente o efeito de sexo e do estágio no tempo esperado de sobrevida  $E(Y)$ .
- xiii. Os dados foram gerados por mim usando  $\boldsymbol{\theta} = (-2.0, -0.4, -0.005)$ . Avalie a diferença entre sua estimativa e o valor verdadeiro do parâmetro.
- xiv. Obtenha a matriz  $3 \times 3$  de informação de Fisher  $I(\boldsymbol{\theta}) = -E(D^2 l(\boldsymbol{\theta}))$ :

$$I(\boldsymbol{\theta}) = -E[D^2 l(\boldsymbol{\theta})] = n \begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_1 & \bar{x}_2 \\ \bar{x}_1 & \bar{x}_1^2 & \bar{x}_1 \bar{x}_2 \\ \bar{x}_2 & \bar{x}_1 \bar{x}_2 & \bar{x}_2^2 \end{bmatrix}$$

onde  $\bar{x}_j^2 = \sum_i x_{ij}^2/n$  e  $\bar{x}_1 \bar{x}_2 = \sum_i x_{i1} x_{i2}/n$ .

- xv. Obtenha intervalos de confiança de 95% para  $\beta_1$  e  $\beta_2$ .

- 
- (f) Algoritmo EM: Leia o exemplo de misturas gaussianas (MoG ou Mixture of Gaussians, em machine learning) no final da página da Wikipedia: <http://en.wikipedia.org/wiki/Expectation-maximization>

**algorithm.** Usando os dados do Old Faithful dataset (pegue os dados, por exemplo, em <http://tinyurl.com/cndlsp3>), estime os parâmetros de uma mistura de duas gaussianas bivariadas usando o algoritmo EM.

---

- (g) Suponha que  $X_1, \dots, X_n$  forme uma amostra aleatória de v.a.'s i.i.d. com uma das seguintes densidades (caso contínuo) ou função de probabilidade (caso discreto). Encontre o EMV de  $\theta$  e verifique se ele é função da estatística suficiente para estimar  $\theta$  em cada caso.

- $f(x; \theta) = \theta^x e^{-\theta} / x!$  para  $x = 0, 1, 2, \dots$  e com  $\theta \in (0, \infty)$  (função de probabilidade Poisson).
  - $f(x; \theta) = \theta e^{-\theta x}$  para  $x > 0$  com  $\theta \in (0, \infty)$  (densidade exponencial).
  - $f(x; \theta) = \theta c^\theta x^{-(\theta+1)}$  para  $x \geq c$  com  $\theta \in (0, \infty)$  (densidade Pareto).
  - $f(x; \theta) = \sqrt{\theta} x^{-\sqrt{\theta}-1}$  para  $0 \leq x \leq 1$  com  $\theta \in (0, \infty)$  (densidade beta( $\sqrt{\theta}, 1$ )).
  - $f(x; \theta) = (x/\theta)^2 \exp(-x^2/(2\theta^2))$  para  $x > 0$  com  $\theta \in (0, \infty)$  (densidade Rayleigh).
  - $f(x; \theta) = \theta c x^{c-1} \exp(-\theta x^c)$  para  $x \geq 0$  com  $\theta \in (0, \infty)$  e  $c > 0$  sendo uma constante conhecida (densidade Weibull com  $c$  fixo).
  - $f(x; \theta) = \theta(1 - \theta)^{x-1}$  para  $x = 1, 2, \dots$  e com  $\theta \in (0, \infty)$  (função de probabilidade geométrica).
  - $f(x; \theta) = \theta^2 x e^{-\theta x}$  para  $x > 0$  com  $\theta \in (0, \infty)$  (densidade Gama( $2, \theta$ )).
- 

- (h) Sejam  $X_1$  e  $X_2$  duas v.a.'s independentes com esperança comum  $\theta \in \mathbb{R}$  e com  $\text{Var}(X_1) = \sigma^2$  e  $\text{Var}(X_2) = \sigma^2/4$ . Isto é,  $X_1$  e  $X_2$  tendem a oscilar em torno de  $\theta$  mas  $X_2$  possui um desvio-padrão duas vezes menor que  $X_1$ . Podemos usar estes dois pedaços de informação para estimar  $\theta$ . Podemos, por exemplo, formar uma combinação linear de  $X_1$  e  $X_2$  propondo o estimador  $\hat{\theta} = c_1 X_1 + c_2 X_2$  onde  $c_1$  e  $c_2$  são constantes conhecidas. Por exemplo, podemos pensar em usar  $\hat{\theta} = (X_1 + X_2)/2$  ou então usar  $\hat{\theta} = \frac{2X_1}{3} + \frac{X_2}{3}$  ou até mesmo  $\hat{\theta} = 4X_1 - 2X_2$ .

Mostre que  $\hat{\theta} = c_1 X_1 + c_2 X_2$  é não-viciado para estimar  $\theta$  (qualquer que seja o valor de  $\theta \in \mathbb{R}$ ) se, e somente se,  $c_1 + c_2 = 1$ . Dentre os estimadores da forma  $\hat{\theta} = c_1 X_1 + c_2 X_2$  e que são não-viciados para estimar  $\theta$ , encontre aquele que minimiza o MSE, dado por  $\mathbb{E}(\hat{\theta} - \theta)^2$ .

---

- (i) Generalize o problema anterior para  $n$  v.a.'s: Sejam  $X_1, \dots, X_n$  v.a.'s independentes com esperança comum  $\theta$  e com a variância de  $X_i$  igual a  $\sigma^2/a_i$ , sendo os  $a_i > 0$  conhecidos e com  $\sigma^2 > 0$  desconhecido. Considere a classe de todos os estimadores lineares de  $\theta$ . Isto é, considere a classe de todos os estimadores que podem ser escritos como  $\hat{\theta} = \sum_i c_i X_i$  onde  $c_i$  são contantes.

Mostre que na classe dos estimadores lineares,  $\hat{\theta}$ , é não-viciado para estimar  $\theta$  se, e somente se  $\sum_i c_i = 1$ . Dentre todos os estimadores lineares  $\sum_i \alpha_i X_i$  de  $\theta$  que são não-viciados (isto é, satisfazendo  $\sum_i \alpha_i = 1$ ), encontre aquele que minimiza o MSE.

---

- (j) Suponha que  $X_1, X_2, \dots, X_n$  sejam v.a.'s i.i.d. com distribuição Poisson com parâmetro comum  $\theta$ . É possível mostrar matematicamente que

$$\hat{\theta}_1 = \bar{X} = \frac{X_1 + \dots + X_n}{n}$$

e

$$\hat{\theta}_2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$$

são ambos estimadores não viciados para estimar  $\theta$ . Considere adicionalmente um terceiro estimador não-viciado para  $\theta$ :

$$\hat{\theta}_3 = (\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2)/2$$

Faça um pequeno estudo de simulação para identificar qual dos três possui um erro de estimação MSE menor. Para isto, fixe o valor de  $\theta = 3$ . Gere um grande número de amostras (digamos, 10 mil), cada uma delas de tamanho  $n = 10$ . Para cada amostra calcule os valores dos três estimadores de  $\theta$ . Estime o MSE  $\mathbb{E}(\hat{\theta}_j - \theta)^2$  de cada estimador usando a média das diferenças ao quadrado entre os 10 mil valores de  $\hat{\theta}_j$  e  $\theta$ . Qual dos estimadores produz um erro MSE menor? Isto significa que o melhor estimador teve SEMPRE o seu valor mais próximo do verdadeiro valor do parâmetro  $\theta$ ? Estime a probabilidade de que, baseados numa mesma amostra,  $\hat{\theta}_2$  esteja mais próximo de  $\theta$  que  $\hat{\theta}_1$ .

A conclusão muda se você tomar  $n = 20$  e  $\theta = 10$ ?

(k) Responda V ou F para as afirmações abaixo.

- Como o parâmetro  $\theta$  não pode ser predito antes do experimento, ele é uma variável aleatória.
- Num problema de estimação de uma população com distribuição normal  $N(\mu, \sigma^2)$  encontrou-se  $\bar{x} = 11.3$  numa amostra de tamanho  $n = 10$ . A distribuição de probabilidade desse valor 11.3 é também uma normal com média  $\mu$  e variância  $\sigma^2/10$ .
- Suponha que  $\bar{X}$  esteja sendo usado como estimador da média populacional  $\mu$ . Como a variância de  $\bar{X}$  decresce com o tamanho da amostra, então toda estimativa obtida a partir de uma amostra de tamanho 15 possui erro de estimação menor que qualquer outra estimativa obtida a partir de uma amostra de tamanho 10.
- Um estimador não viciado é sempre melhor que um estimador viciado.
- Considere uma estimativa da média populacional  $\mu$  baseada na média aritmética de uma amostra de tamanho 10 e outra estimativa com uma amostra de tamanho 15. Nunca devemos preferir a estimativa baseada na amostra de 15 pois a estimativa baseada na amostra de tamanho 10 tem alguma chance de estar mais perto do verdadeiro valor desconhecido de  $\mu$ .

(l) Sejam  $X_1, \dots, X_n$  i.i.d.'s com distribuição exponencial com parâmetro  $\lambda$ . O interesse é estimar  $E(X_i) = 1/\lambda$ . Suponha que apenas as variáveis  $X_i$ 's que ficarem maiores ou iguais a  $x = 10$  sejam observadas. Todas as observações menores que  $x = 10$  são perdidas. Assim, a amostra final é possui um número  $0 < k \leq n$  de observações.

O estimador baseado na média amostral da amostra de  $k$  variáveis é viciado. Ele subestima ou superestima sistematicamente  $E(X_i)$ ? Não precisa calcular o vício.

A distribuição de  $X_i$  DADO QUE  $X_i > 10$  tem a densidade dada por

$$f(x; \lambda) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 10 \\ \lambda \exp(-\lambda(x - 10)), & \text{se } x \geq 10 \end{cases}$$

Se  $X_1, \dots, X_k$  é uma amostra desta distribuição TRUNCADA (em que só observamos os  $X_i$ 's maiores que 10), encontre o MLE de  $\lambda$ .

RESP: O MLE é  $k / \sum_i (x_i - 10)$ .

- (m) Suponha que será coletada uma amostra de observações independentes  $Y$  com distribuição normal. Elas *não são* identicamente distribuídas. A média de  $Y$  varia de acordo com o valor de uma covariável  $x$  de forma que  $Y = \alpha + \beta x + \epsilon$ , onde  $\epsilon$  possui distribuição normal com média 0 e variância  $\sigma^2$ . Os valores possíveis de  $x$  são três: baixo ( $x = -1$ ), médio ( $x = 0$ ) e alto ( $x = 1$ ). Os valores de  $x$  são fixos e conhecidos. Eles não são variáveis aleatórias. São feitas três observações em cada nível de  $x$ . Podemos representar os dados na tabela e no gráfico dos valores observados de  $Y$  versus  $x$  que Figura 16.1.

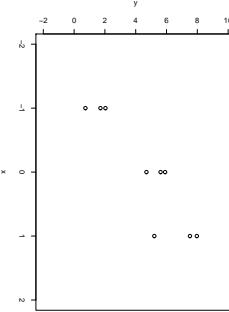


Figura 15.1: Gráfico dos valores observados  $y_{ij}$  versus  $x_j$ .

$x_j = -1$	$x_j = 0$	$x_j = 1$
$Y_{11}$	$Y_{21}$	$Y_{31}$
$Y_{12}$	$Y_{22}$	$Y_{32}$
$Y_{13}$	$Y_{23}$	$Y_{33}$

Vamos representar as observações como  $Y_{ij} = \alpha + \beta x_j + \epsilon_{ij}$  onde  $x_j = -1, 0$  ou  $1$ , e os  $\epsilon_{ij}$  são i.i.d. com distribuição  $N(0, \sigma^2)$ .

- é correto dizer que  $(Y_{ij}|x_j) \sim N(\alpha + \beta x_j, \sigma^2)$  e que as variáveis  $Y_{ij}$  são independentes?  
DICA: não existe pegadinha aqui.
- Calcule  $E(Y_{ij}|x_j)$  e  $\text{Var}(Y_{ij}|x_j)$  nos três casos:  $x_j = -1$ ,  $x_j = 0$  e  $x_j = 1$ . A variância depende do valor de  $x_j$ ? E o valor esperado?
- Deseja-se um estimador para  $E(Y|x_j = 0) = \alpha$  quando  $x = 0$ . Um primeiro estimador bem simples é proposto:

$$\frac{Y_{21} + Y_{22} + Y_{23}}{3}$$

Ele simplesmente toma a média das três observações quando  $x = 0$ . Mostre que este estimador é não viciado para  $\alpha$  e encontre sua variância. Qual o risco quadrático desse estimador? OBS: Risco quadrático de um estimador é o seu MSE.

- Um segundo estimador é proposto:

$$\frac{Y_{11} + Y_{12} + Y_{13} + Y_{21} + Y_{22} + Y_{23} + Y_{31} + Y_{32} + Y_{33}}{9}$$

Ele toma a média aritmética simples de todas as 9 observações disponíveis. Mostre que este estimador também é não viciado para  $\alpha$  e encontre sua variância.

- Qual dos dois estimadores é preferível?
- O interesse agora é em estimar  $\beta$ , o quanto  $Y$  aumenta em média quando passamos de um nível de  $x$  para o nível seguinte. Um primeiro estimador é o valor médio de  $Y$  quando  $x = 0$  menos o valor médio de  $Y$  quando  $x = -1$ . Isto é,

$$T_1 = \bar{Y}_0 - \bar{Y}_{-1} = \frac{Y_{21} + Y_{22} + Y_{23}}{3} - \frac{Y_{11} + Y_{12} + Y_{13}}{3}$$

Mostre que  $T_1$  é uma combinação linear  $\sum_{ij} a_{ij} Y_{ij}$  dos  $Y$ 's e identifique os valores de  $a_{ij}$ .

- Mostre que  $E(T_1)$  é não-viciado para  $\beta$  e ache sua variância.
- De maneira análoga, defina

$$T_1 = \overline{Y_1} - \overline{Y_0}$$

e ache sua média e variância.

- Um terceiro estimador, melhor que os dois anteriores, leva em conta apenas as observações nos dois extremos, quando  $x = -1$  e  $x = 1$ .

$$T_3 = \frac{1}{2} \overline{Y_1} - \overline{Y_{-1}}$$

Mostre que  $T_3$  também é uma combinação linear dos  $Y$ 's, que é não-viciado e que possui risco quadrático (ou MSE) menor que  $T_1$  e  $T_2$ .

- (n) Numa seguradora, foi feita uma análise de 12000 apólices de seguros de automóveis emitidas para proprietários individuais. Como parte da análise, em cada apólice foram considerados a idade  $x$  (em anos) do motorista (variando de 18 a 60 anos) e o resultado  $Y$  em termos de sucesso ( $Y = 1$ ) do motorista em conduzir o veículo por um ano sem sinistros de nenhum tipo. Caso contrário, regista-se que houve um fracasso ( $Y = 0$ ).

O interesse é entender como a idade está associada com a probabilidade de sucesso. Decide-se usar um modelo logístico para modelar estes dados onde  $p(x) = \mathbb{P}(Y = 1|x) = \frac{1}{1+e^{-(w_0+w_1x)}}$ .

- Esboce num gráfico qual é a relação esperada pelo modelo entre a idade  $x$  e a probabilidade  $p(x)$  de sucesso.
- Escreva a log-verossimilhança para este problema.
- Obtenha o vetor gradiente necessário para obter o MLE.
- Suponha que o interesse do pesquisador é estimar a idade  $x$  na qual a probabilidade dos segurados terem sucesso é maior ou igual a 0.90. Escreva essa idade como função dos parâmetros do modelo acima.

**Solução:** Espera-se uma curva em forma de S com  $p(x)$  decrescendo com  $x$  pois o risco de acidente diminui com a idade, fruto de maior experiência no volante e menor impulsividade. Além disso, podemos esperar nas duas idades extremas probabilidades não saturadas, longe de seus valores extremos 0 e 1. Assim, antecipamos que  $p(18)$  esteja substancialmente abaixo de 1 e que  $p(50)$  esteja substancialmente acima de zero. Um esboço possível da função  $p(x)$  está na Figura ??.

A log-verossimilhança do vetor de parâmetros  $(w_0, w_1)$  é:

$$\ell(w_0, w_1) = \log \left( \prod_{i=1}^{12000} 12000 p(x_i)^{y_i} (1 - p(x_i))^{1-y_i} \right) \quad (15.1)$$

$$= \sum_{i=1}^{12000} 12000 (y_i \log(p(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - p(x_i))) \quad (15.2)$$

$$= \sum_{i:y_i=1} \log(p(x_i)) + \sum_{i:y_i=0} \log(1 - p(x_i)) \quad (15.3)$$

$$= \sum_{i=1}^{12000} 12000 (y_i \log(p(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - p(x_i))) \quad (15.4)$$

$$= w_0 \sum_{i=1}^{12000} y_i + w_1 \sum_{i=1}^{12000} x_i y_i - \sum_i \log(1 + e^{w_0 + w_1 x_i}) \quad (15.5)$$

O vetor gradiente é o vetor das derivadas parciais com respeito aos parâmetros  $(w_0, w_1)$ . Contas rotineiras levam ao resultado desejado:

$$\nabla \ell(w_0, w_1) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \ell}{\partial w_0} \\ \frac{\partial \ell}{\partial w_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{12000} (y_i - p(x_i)) \\ \sum_{i=1}^n x_i (y_i - p(x_i)) \end{bmatrix}$$

Seja  $x^*$  a idade tal que  $p(x^*) = 0.90$ . Então

$$\frac{1}{1 + e^{-(w_0 + w_1 x^*)}} = 0.90 \rightarrow -(w_0 + w_1 x^*) = \log(0.1/0.9) \rightarrow x^* = \frac{1}{w_1} (\log(9) - w_0)$$

Tendo estimativas de  $w_0$  e  $w_1$ , encontramos uma estimativa da idade limite  $x^*$

- (o) Uma operadora de planos de saúde sabe que o custo médio das internações varia muito de acordo com a idade do cliente. Aqueles com mais de 70 anos de idade acarretam a maior parte dos custos embora eles tenham uma participação pequena no portfolio de clientes.

A operadora decidiu investigar um pouco mais a incidência de internações entre seus clientes idosos. Para isto, escolheu uma amostra de clientes com idade acima de 70 anos e obteve o número de internações que cada um teve nos últimos dois anos. Decidiu-se adotar um modelo de Poisson para as contagens do número de internações.

Nem todos os selecionados foram clientes por todo o período de dois anos. Aqueles que estão na operadora há pouco tempo devem apresentar, em média, menos internações do que aqueles que estão na operadora durante os últimos dois anos. Por isto, a média da Poisson deveria refletir o tempo de permanência no plano de cada cliente. Dessa forma chegou-se ao seguinte modelo estatístico.

Sejam  $Y_1, \dots, Y_n$  a amostra de clientes. Suponha que essas sejam variáveis aleatórias independentes e que  $Y_i \sim \text{Poisson}(\lambda t_i)$  onde  $t_i$  é o tempo de permanência do  $i$ -ésimo cliente na empresa (em meses) e  $\lambda > 0$  é desconhecido e representa o número esperado de internações *por mês*. O interesse é estimar  $\lambda$  a partir dos dados que podem ser representados como na tabela abaixo:

$i$	$t_i$	$y_i$
1	24	4
2	12	1
3	3	0
4	24	1
...	...	...

- Pensou-se inicialmente em estimar  $\lambda$  simplesmente tomando o número médio de internações e dividir pelo tempo de observação de 24 meses. Isto é,  $T_1 = \bar{Y}/24$ . Mostre que este estimador é viciado para estimar  $\lambda$  a menos que  $\sum_i t_i = 24n$ . Por exemplo, se todos os clientes tiverem  $t_i = 24$  esta condição seria válida.

- Tentando corrigir o vício do estimador  $T_1$ , pensou-se então em adotar

$$T_2 = \frac{\bar{Y}}{\bar{t}} = \frac{Y_1 + \dots + Y_n}{t_1 + \dots + t_n}$$

Mostre que  $T_2$  é não-viciado para estimar  $\lambda$  e encontre seu risco quadrático de estimação.

- Mais tarde, outro analista resolveu considerar o estimador

$$T_3 = \frac{1}{n} \left( \frac{Y_1}{t_1} + \dots + \frac{Y_n}{t_n} \right)$$

Mostre que  $T_3$  é não-viciado para estimar  $\lambda$  e encontre seu risco quadrático de estimação.

- É possível dizer que  $T_2$  é sempre melhor ou igual a  $T_3$  considerando-se os riscos quadráticos dos dois. Prove isto usando a desigualdade entre a média aritmética e a média harmônica que diz que

$$\frac{x_1 + \dots + x_n}{n} \geq \frac{n}{\frac{1}{x_1} + \dots + \frac{1}{x_n}}$$

para quaisquer números reais positivos  $x_1, \dots, x_n$ .

**Solução:** Considerando o estimador  $T_1$  inicialmente:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(T_1) &= \mathbb{E}\left(\frac{\bar{Y}}{24}\right) = \frac{1}{24}\mathbb{E}(Y_1 + \dots + Y_n) = \frac{1}{24n}(\mathbb{E}(Y_1) + \dots + \mathbb{E}(Y_n)) \\ &= \frac{1}{24n}(\lambda t_1 + \dots + \lambda t_n) = \frac{\lambda}{24n}(t_1 + \dots + t_n) = \frac{\lambda \bar{t}}{24}, \end{aligned}$$

que é igual a  $\lambda$  se, e só se,  $\bar{t} = 24$ .

Considerando o estimador  $T_2$ :

$$\mathbb{E}(T_2) = \mathbb{E}\left(\frac{\bar{Y}}{\bar{t}}\right) = \frac{1}{\bar{t}n}\mathbb{E}(Y_1 + \dots + Y_n) = \frac{\lambda}{\bar{t}n}(t_1 + \dots + t_n) = \lambda.$$

Portanto,  $T_2$  é não-viciado para estimar  $\lambda$ . O seu risco quadrático de estimação é:

$$\begin{aligned} MSE(T_2, \lambda) &= \mathbb{E}[(T_2 - \lambda)^2] = \mathbb{V}(T_2) + \text{bias}^2(T_2, \lambda) = \mathbb{V}(T_2) + 0 = \mathbb{V}\left(\frac{\bar{Y}}{\bar{t}}\right) = \frac{\mathbb{V}(\bar{Y})}{\bar{t}^2} \\ &= \frac{1}{\bar{t}^2} \frac{1}{n^2} \mathbb{V}(Y_1 + \dots + Y_n) = \frac{1}{\bar{t}^2} \frac{1}{n^2} [\mathbb{V}(Y_1) + \dots + \mathbb{V}(Y_n)] \\ &= \frac{1}{\bar{t}^2} \frac{1}{n^2} [\lambda t_1 + \dots + \lambda t_n] = \frac{\lambda}{n} \frac{1}{\bar{t}} \end{aligned}$$

O terceiro estimador,  $T_3$ , tem valor esperado:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(T_3) &= \frac{1}{n}\mathbb{E}\left(\frac{Y_1}{t_1} + \dots + \frac{Y_n}{t_n}\right) = \frac{1}{n}\mathbb{E}\left(\frac{\mathbb{E}(Y_1)}{t_1} + \dots + \frac{\mathbb{E}(Y_n)}{t_n}\right) = \frac{1}{n}\mathbb{E}\left(\frac{\lambda t_1}{t_1} + \dots + \frac{\lambda t_n}{t_n}\right) \\ &= \frac{\lambda}{n}\left(\frac{t_1}{t_1} + \dots + \frac{t_n}{t_n}\right) = \lambda, \end{aligned}$$

e portanto, também não-viciado para estimar  $\lambda$ . O seu risco quadrático de estimação é:

$$\begin{aligned} MSE(T_3, \lambda) &= \mathbb{E}[(T_3 - \lambda)^2] = \mathbb{V}(T_3) = \frac{1}{n^2} \left[ \mathbb{V}\left(\frac{Y_1}{t_1}\right) + \dots + \mathbb{V}\left(\frac{Y_n}{t_n}\right) \right] \\ &= \frac{1}{n^2} \left[ \frac{\mathbb{V}(Y_1)}{t_1^2} + \dots + \frac{\mathbb{V}(Y_n)}{t_n^2} \right] = \frac{1}{n^2} \left[ \frac{\lambda t_1}{t_1^2} + \dots + \frac{\lambda t_n}{t_n^2} \right] \\ &= \frac{\lambda}{n^2} \left[ \frac{1}{t_1} + \dots + \frac{1}{t_n} \right] = \frac{\lambda}{n} H \end{aligned}$$

onde  $H$  é a média harmônica dos tempos assegurados dos clientes:

$$H = \frac{1}{n} \left( \frac{1}{t_1} + \dots + \frac{1}{t_n} \right)$$

A comparação entre os riscos de  $T_2$  e  $T_3$  depende da desigualdade entre a média aritmética e a média harmônica dos tempos  $t_i$ . Usando a desigualdade mencionada no enunciado, temos

$$MSE(T_2, \lambda) = \frac{\lambda}{n} \frac{1}{\bar{t}} \leq \frac{\lambda}{n} H = MSE(T_3, \lambda).$$

Em resumo, queremos estimar  $\lambda$ , o número esperado de internações mensais usando as contagens de episódios de internações de clientes expostos a diferentes tempos  $t_i$  sob o seguro.

O parâmetro  $\lambda$  é a taxa mensal de internações por indivíduo. Temos dois estimadores não-variados. O primeiro deles,  $T_2$ , soma as internações de todos os clientes e divide pelo tempo total exposto ao risco de todos eles, obtendo uma estimativa intuitivamente simples. O outro,  $T_3$ , usa a taxa mensal individual ao calcular  $Y_n/t_n$  e em seguida tira sua média aritmética simples, também uma estimativa intuitivamente simples. A conclusão é que é preferível usar  $T_2$ .

---

- (p) Suponha que  $X_1, \dots, X_n$  sejam  $n$  variáveis aleatórias com distribuição de Rayleigh com parâmetro  $\theta > 0$  com densidade dada por

$$f(x; \theta) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ x/\theta^2 \exp(-x^2/(2\theta^2)), & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

Encontre o estimador de máxima verossimilhança de  $\theta$ .

---

- (q) A distribuição logarítmica serve para modelar contagens em ecologia. Essa distribuição tem função de probabilidade dada por

$$P(X = x; \theta) = \frac{-\theta^x}{x \log(1 - \theta)}$$

para  $x = 1, 2, \dots$  onde  $\theta$  é um parâmetro desconhecido no intervalo  $(0, 1)$ . Mostre que, se  $X_1, X_2, X_3, X_4$  é uma amostra aleatória da distribuição acima, a estimativa de máxima verossimilhança  $\hat{\theta}$  satisfaz a equação

$$\hat{\theta} = \bar{X}(1 - \hat{\theta}) \log(1 - \hat{\theta})$$

onde  $\bar{X}$  é a média aritmética dos dados. Se  $x_1 = 1, x_2 = 2, x_3 = 3$  e  $x_4 = 2$ , e se você tiver o valor inicial  $\theta^{(0)} = 0.6$ , encontre o valor  $\theta^{(1)}$  do processo iterativo de Newton-Raphson (faça as contas).

**OBS:** Como  $\theta \in (0, 1)$ , temos  $-\log(1 - \theta) > 0$ , mas não faz sentido tomar  $\log(-\theta)$ .

**Solução:** Como  $\theta \in (0, 1)$ , temos  $-\log(1 - \theta) > 0$ . A log-verossimilhança de  $\theta$  baseada em  $n$  dados  $x_1, x_2, \dots, x_n$  é igual a

$$\begin{aligned} \ell(\theta) &= \log \left( \prod_{i=1}^n \frac{\theta^{x_i}}{x_i(-\log(1 - \theta))} \right) = \log \left( \frac{\theta^{\sum x_i}}{(-\log(1 - \theta))^n \prod x_i} \right) \\ &= \left( \sum_i x_i \right) \log(\theta) - \sum_i \log(x_i) - n \log(-\log(1 - \theta)) \end{aligned}$$

A derivada da log-verossimilhança é a função escore:

$$\ell'(\theta) = \frac{\partial \ell}{\partial \theta} = \frac{\sum x_i}{\theta} + \frac{n}{(1 - \theta) \log(1 - \theta)}$$

A Figura 15.2 mostra a função log-verossimilhança  $\ell(\theta)$  no lado esquerdo e a derivada (ou função escore no lado direito).

A derivada parcial de segunda ordem é:

$$\ell''(\theta) = \frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta^2} = - \left[ \frac{\sum x_i}{\theta^2} + \frac{n(1 + \log(1 - \theta))}{((1 - \theta) \log(1 - \theta))^2} \right]$$

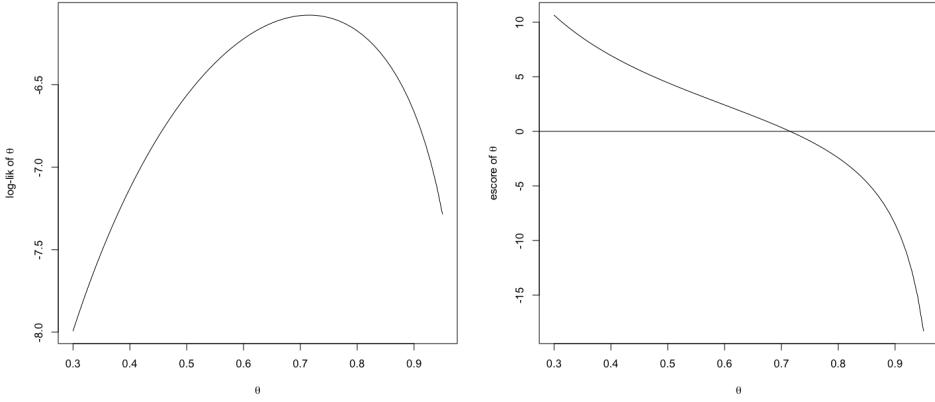


Figura 15.2: Log-verossimilhança  $\ell(\theta)$  no lado esquerdo e a derivada (ou função escore no lado direito, considerando a distribuição logarítmica.

A equação de iteração de Newton é

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \frac{\ell'(\theta^{(t)})}{\ell''(\theta^{(t)})}$$

$$\ell''(\theta^{(t)}) = \theta^{(t)} + \frac{\frac{\sum x_i}{\theta^{(t)}} + \frac{n}{(1-\theta^{(t)}) \log(1-\theta^{(t)})}}{\left[ \frac{\sum x_i}{(\theta^{(t)})^2} + \frac{n(1+\log(1-\theta^{(t)}))}{((1-\theta^{(t)}) \log(1-\theta^{(t)}))^2} \right]}$$

Considerando a pequena amostra de  $n = 4$  observações com  $\sum x_i = 8$  e começando com o valor inicial  $\theta^{(0)} = 0.6$ , encontramos

$$\theta^{(1)} = \theta^{(0)} - \frac{\ell'(\theta^{(0)})}{\ell''(\theta^{(0)})} = 0.6 - \frac{2.4198}{-24.7148} = 0.6979$$

$$\theta^{(2)} = \theta^{(1)} - \frac{\ell'(\theta^{(1)})}{\ell''(\theta^{(1)})} = 0.6979 - \frac{0.4012}{-10.3977} = 0.7365$$

- (r) Num estudo de seguro agrícola, acredita-se que a produção de trigo  $X_i$  da área  $i$  é normalmente distribuída com média  $\theta z_i$ , onde  $z_i$  é a quantidade *CONHECIDA* de fertilizante utilizado na área. Assumindo que as produções em diferentes áreas são independentes, e que a variância é conhecida e igual a 1 (ou seja, que  $X_i \sim N(\theta z_i, 1)$ , para  $i = 1, \dots, n$ ):

- Encontre o EMV de  $\theta$
- Mostre que o EMV é não viciado para  $\theta$ . Lembre-se que os valores de  $z_i$  são constantes.

- (s) Uma função de interesse quando trabalha-se com resseguros de perdas  $X$  com uma certa distribuição é a função média do excesso definida como  $e(a) = E(X - a | X > a)$ . Isto é,  $e(a)$  é o valor médio do excesso de  $X$  acima da constante  $a$ . Para cada valor  $a$  existe um valor de  $e(a)$ . Com base numa amostra  $X_1, \dots, X_n$  de v.a.'s i.i.id., sugerem-se dois possíveis estimadores para  $e(a)$ :

$$\hat{e}(a) = \frac{\sum_{i=1}^n X_i I(X_i > a)}{n} - a$$

e

$$\hat{e}(a) = \frac{\sum_{i=1}^n X_i I(X_i > a)}{\sum_{i=1}^n I(X_i > a)} - a$$

Um deles é muito ruim e foi proposto por alguém que não entendeu a definição de  $e(a)$ . Diga qual é e explique por quê.

- 
- (t) Dados de perda geralmente tem caudas pesadas. Suponha que  $x_0$  é um valor de franquia *conhecido* (isto é, são observadas apenas as perdas que têm valores monetários acima de  $x_0$ ). Uma possibilidade sempre pensada é usar a distribuição de Pareto com função distribuição acumulada dada por:

$$F_X(x) = P(X \leq x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq x_0 \\ \int_0^x \alpha x_0^\alpha / y^{\alpha+1} dy = 1 - (x_0/x)^\alpha, & \text{se } x > x_0 \end{cases}$$

onde  $\alpha > 0$ .

- Mostre que a densidade de probabilidade de  $X$  é igual a  $f(x) = \alpha x_0^\alpha / x^{\alpha+1}$ .
- Se  $X_1, \dots, X_n$  é uma amostra de v.a.'s i.i.d., obtenha o EMV de  $\alpha$  dado por

$$\hat{\alpha} = \frac{n}{\sum_i \log(x_i/x_0)} = \frac{1}{\log\left(\sqrt[n]{x_1 x_2 \dots x_n}/x_0\right)}$$


---

- (u) A distribuição de Gumbel é uma escolha popular para modelar dados de catástrofes naturais tais como enchentes. Temos dados da maior precipitação pluvial diária durante um ano para o período de 1956 a 2001. Suponha que os valores aleatórios  $X_1, \dots, X_{46}$  das maiores precipitações diárias anuais sigam uma distribuição de Gumbel com parâmetros  $\mu$  e  $\sigma$  e com densidade dada por

$$f(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{x - \mu}{\sigma}\right) \exp\left(-e^{\frac{x - \mu}{\sigma}}\right)$$

- Mostre que o EMV de  $\mu$  e de  $\sigma$  são as soluções do sistema de equações simultâneas não-lineares

$$\begin{aligned} \hat{\mu} &= -\hat{\sigma} \log\left(\frac{1}{n} \sum_i e^{-x_i/\hat{\sigma}}\right) \\ \hat{\sigma} &= \frac{1}{n} \sum_i x_i - \frac{\sum_i x_i e^{-x_i/\hat{\sigma}}}{\sum_i e^{-x_i/\hat{\sigma}}} \end{aligned}$$

- Estimativas para iniciar o procedimento numérico e obter o EMV são as estimativas de momentos e que são dadas por

$$\begin{aligned} \hat{\mu} &= \bar{x} - 0.45s \\ \hat{\sigma} &= s/1.283 \end{aligned}$$

onde  $s$  é o desvio-padrão amostral. Explique como você faria para obter as estimativas de máxima verossimilhança usando estas estimativas iniciais. Monte a equação recursiva necessária para o procedimento numérico.

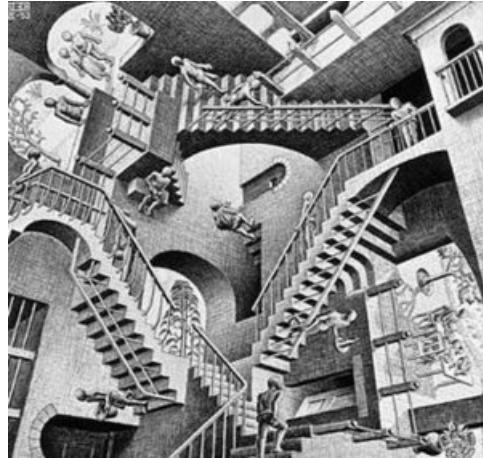
- 
- (v) Suponha que  $X_1, \dots, X_n$  forme uma amostra aleatória de v.a.'s i.i.d. com distribuição Poisson com esperança  $\theta$  desconhecida.

- Encontre a função escore  $\frac{\partial l}{\partial \theta}$ .
- Considerando a função escore como uma variável aleatória, calcule o seu valor esperado  $\mathbb{E}(\frac{\partial l}{\partial \theta})$ .
- Calcule também a sua variância.
- Calcule a informação de Fisher  $I(\theta)$  de duas formas distintas:  $I(\theta) = \mathbb{E}(\frac{\partial l}{\partial \theta})^2$  e como  $I(\theta) = -\mathbb{E}(\frac{\partial^2 l}{\partial \theta^2})$ .

- 
- (w) Repita o exercício acima supondo que  $X_1, \dots, X_n$  sejam iid com distribuição  $\exp(\lambda)$ .
- 
- (x) Repita o exercício acima supondo que  $X_1, \dots, X_n$  sejam iid com distribuição Pareto, com densidade  $f(x; \theta) = \theta c^\theta x^{-(\theta+1)}$  para  $x \geq c$  com  $\theta \in (0, \infty)$ . Esta distribuição é muito usada para modelar dados de reseguro, quando as perdas podem chegar a valores muito grandes.
- 
- (y) Suponha que  $X_1, \dots, X_5$  forme uma amostra aleatória de 23 v.a.'s i.i.d. com distribuição Poisson com esperança  $\theta = 1.2$ . No R, o comando `rpois(5, 1.2)` gerou a amostra  $\mathbf{x} = (1, 2, 1, 2, 1)$ . Suponha que você não conhecesse este valor verdadeiro de  $\theta$ .
- Faça um gráfico da função de log-verossimilhança  $\log f(\mathbf{x}, \theta) = \log f((1, 2, 1, 2, 1), \theta)$  versus  $\theta$ . Use um intervalo para  $\theta$  grande o suficiente para cobrir o verdadeiro valor do parâmetro.
  - Faça também um gráfico da função escore  $\frac{\partial}{\partial \theta} \log f(\mathbf{x}, \theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} \log f((1, 2, 1, 2, 1), \theta)$  versus  $\theta$ .
  - O EMV neste caso é a média aritmética. Portanto, o valor do EMV observado nesta amostra particular é igual a  $\hat{\theta} = 7/5$ . Verifique graficamente que  $\hat{\theta} = 7/5$  é ponto de máximo da função de log-verossimilhança.
  - Verifique graficamente que o verdadeiro valor do parâmetro  $\theta = 1.2$  **não** maximiza a função de log-verossimilhança.
  - Verifique graficamente que  $\hat{\theta} = 7/5$  é o zero da função escore.
  - Verifique também que a função escore não se anula no ponto  $\theta = 1.2$ .
-

# Capítulo 16

## Teoria da Estimação Pontual



- (a) Três experimentos binomiais independentes são executados de maneira sucessiva. Em cada um deles, mede-se o número de respostas positivas que um sujeito fornece em certo número de tentativas. Seja  $X_i \sim \text{Bin}(n_i, \theta_i)$  o número de sucessos no experimento  $i$ . Um estímulo é fornecido no experimento do meio de forma que a probabilidade de sucesso muda no experimento do meio e retorna para o nível inicial no terceiro experimento. Isto é, assume-se que  $\theta_1 = \alpha$ ,  $\theta_2 = \alpha + \beta$ , e que  $\theta_3 = \alpha$ . Sabemos que uma v.a.  $Y \sim \text{Bin}(n, \theta)$  tem função de probabilidade  $\mathbb{P}(Y = k) = n!/(k!(n - k)!) \theta^k (1 - \theta)^{n - k}$ . Qual é o vetor de parâmetros neste problema?

Suponha agora que o estímulo é aumentado no terceiro experimento e que  $\theta_3 = \alpha + 2\alpha$ , além de termos  $\theta_1 = \alpha$  e  $\theta_2 = \alpha + \beta$ . Qual é o vetor de parâmetros neste problema?

**Solução:** Denote por  $\pi_1, \pi_2$  e  $\pi_3$  as probabilidades nos três experimentos binomiais sucessivos. Embora existam três probabilidades envolvidas, elas dependem apenas de dois termos desconhecidos,  $\alpha$  e  $\beta$ . No primeiro caso, temos  $(\pi_1, \pi_2, \pi_3) = (\alpha, \alpha + \beta, \alpha)$  e no segundo caso, temos  $(\pi_1, \pi_2, \pi_3) = (\alpha, \alpha + \beta, \alpha + 2\beta)$ . Nos dois casos,  $\theta = (\alpha, \beta)$ , um vetor de dimensão 2. A ideia intuitiva é que precisamos apenas de dois termos para descrever as três probabilidades.

- 
- (b) Imagine uma fabricação de peças cujo diâmetro é uma variável aleatória com distribuição normal com parâmetro  $\mu$ . Duas amostras de variáveis aleatórias i.i.d., ambas de tamanho 5, foram retiradas da população e os valores observados são os seguintes:

Amostra 1	5.8	9.8	12.2	14.4	14.5	média = 11.3
Amostra 2	9.7	10.7	12.6	10.7	4.6	média = 9.7

- Qual é a melhor estimativa de  $\mu$ , a primeira média ou a segunda? Isto é, qual delas possui menor erro de estimação?

- A estimativa  $(11.3 + 9.7)/2$  possui erro de estimação menor que a primeira ou segunda média calculada na tabela?
- E quanto ao estimador  $T = (\bar{X}_1 + \bar{X}_2)/2$ , a média aritmética das amostras 1 e 2? Ele é melhor que o estimador  $\bar{X}_1$ ? Qual o critério que você usou para decidir sobre essa pergunta?
- Considerando a primeira amostra acima, calcule a mediana amostral. Ela possui erro de estimação menor que a média amostral 11.3? Qual das duas estimativas você usuaria? Por quê?

**Solução:**

- Sem saber o verdadeiro valor de  $\mu$  não é possível saber qual das duas estimativas é a melhor. Elas são apenas duas instâncias (ou estimativas) independentes do mesmo estimador (a mesma v.a.).
- Como antes, é impossível responder a isto pois não conhecemos  $\mu$ . Embora o comportamento estatístico da estimativa combinada seja de apresentar uma distância menor a  $\mu$  que uma das amostras individuais (com 5 dados), não é garantido que isto aconteça em toda instância de dados.
- Ao falarmos de estimadores podemos preferir  $T$  em relação a  $\bar{X}_1$ . Seja  $\sigma^2$  a variância da gaussiana associada com os dados individuais. Então  $MSE(T, \mu) = \sigma^2/10$  enquanto  $MSE(\bar{X}_1, \mu) = \sigma^2/5$ . Assim,  $MSE(T, \mu)$  é bem menor que  $MSE(\bar{X}_1, \mu)$ . Note que  $MSE(\bar{X}_1, \mu) = MSE(\bar{X}_2, \mu)$  e portanto não temos como distinguir o comportamento estatístico de  $\bar{X}_1$  e  $\bar{X}_2$ . Na prática, vamos preferir usar a média das duas estimativas  $(11.3 + 9.7)/2$  pois ele é a mesma coisa que tomar a média aritmética de todas as 10 observações. O estimador baseado na amostra de tamanho 10 é melhor que o estimador baseado apenas em 5 observações. Entretanto, embora em geral o estimador baseado em 10 observações tenha uma MSE menor que aquele baseado em 5 observações, isto não quer dizer que em toda em qualquer duas instâncias de dados (ou duas amostras 1 e 2), a estimativa combinada seja garantidamente mais próxima de  $\mu$  que a estimativa baseada apenas em 5 observações.
- Considerando a primeira amostra, a sua mediana é 12.2. Não é possível saber se esta mediana amostral está mais próxima de  $\mu$  que a média aritmética igual a 11.3. Entretanto, se o estimador (v.a.) mediana tiver um MSE maior que o estimador  $\bar{X}_1$  (ele tem), vamos preferir usar a média aritmética na expectativa de que nesta amostra particular o comportamento usual prevaleça e assim tenhamos um erro menor usando a média ao invés da mediana.

- 
- (c) Sejam  $X_1$  e  $X_2$  duas v.a.'s independentes com esperança comum  $\theta \in \mathbb{R}$  e com  $\text{Var}(X_1) = \sigma^2$  e  $\text{Var}(X_2) = \sigma^2/4$ . Isto é,  $X_1$  e  $X_2$  tendem a oscilar em torno de  $\theta$  mas  $X_2$  possui um desvio-padrão duas vezes menor que  $X_1$ . Podemos usar estes dois pedaços de informação para estimar  $\theta$ . Podemos, por exemplo, formar uma combinação linear de  $X_1$  e  $X_2$  propondo o estimador  $\hat{\theta} = c_1 X_1 + c_2 X_2$  onde  $c_1$  e  $c_2$  são constantes conhecidas. Por exemplo, podemos pensar em usar  $\hat{\theta} = (X_1 + X_2)/2$  ou então usar  $\hat{\theta} = \frac{2X_1}{3} + \frac{X_2}{3}$  ou até mesmo  $\hat{\theta} = 4X_1 - 2X_2$ .

Mostre que  $\hat{\theta} = c_1 X_1 + c_2 X_2$  é não-viciado para estimar  $\theta$  (qualquer que seja o valor de  $\theta \in \mathbb{R}$ ) se, e somente se,  $c_1 + c_2 = 1$ . Dentre os estimadores da forma  $\hat{\theta} = c_1 X_1 + c_2 X_2$  e que são não-viciados para estimar  $\theta$ , encontre aquele que minimiza o MSE, dado por  $\mathbb{E}(\hat{\theta} - \theta)^2$ .

- 
- (d) Generalize o problema anterior para  $n$  v.a.'s: Sejam  $X_1, \dots, X_n$  v.a.'s independentes com esperança comum  $\theta$  e com a variância de  $X_i$  igual a  $\sigma^2/a_i$ , sendo os  $a_i > 0$  conhecidos e

com  $\sigma^2 > 0$  desconhecido. Considere a classe de todos os estimadores lineares de  $\theta$ . Isto é, considere a classe de todos os estimadores que podem ser escritos como  $\hat{\theta} = \sum_i c_i X_i$  onde  $c_i$  são contantes.

Mostre que na classe dos estimadores lineares,  $\hat{\theta}$ , é não-viciado para estimar  $\theta$  se, e somente se  $\sum_i c_i = 1$ . Dentre todos os estimadores lineares  $\sum_i \alpha_i X_i$  de  $\theta$  que são não-viciados (isto é, satisfazendo  $\sum_i \alpha_i = 1$ ), encontre aquele que minimiza o MSE.

---

- (e) Suponha que  $X_1, X_2, \dots, X_n$  sejam v.a.'s i.i.d. com distribuição Poisson com parâmetro comum  $\theta$ . É possível mostrar matematicamente que

$$\hat{\theta}_1 = \bar{X} = \frac{X_1 + \dots + X_n}{n}$$

e

$$\hat{\theta}_2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$$

são ambos estimadores não viciados para estimar  $\theta$ . Considere adicionalmente um terceiro estimador não-viciado para  $\theta$ :

$$\hat{\theta}_3 = (\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2)/2$$

Faça um pequeno estudo de simulação para identificar qual dos três possui um erro de estimação MSE menor. Para isto, fixe o valor de  $\theta = 3$ . Gere um grande número de amostras (digamos, 10 mil), cada uma delas de tamanho  $n = 10$ . Para cada amostra calcule os valores dos três estimadores de  $\theta$ . Estime o MSE  $\mathbb{E}(\hat{\theta}_j - \theta)^2$  de cada estimador usando a média das diferenças ao quadrado entre os 10 mil valores de  $\hat{\theta}_j$  e  $\theta$ . Qual dos estimadores produz um erro MSE menor? Isto significa que o melhor estimador teve SEMPRE o seu valor mais próximo do verdadeiro valor do parâmetro  $\theta$ ? Estime a probabilidade de que, baseados numa mesma amostra,  $\hat{\theta}_2$  esteja mais próximo de  $\theta$  que  $\hat{\theta}_1$ .

A conclusão muda se você tomar  $n = 20$  e  $\theta = 10$ ?

---

- (f) Responda V ou F para as afirmações abaixo.

- Como o parâmetro  $\theta$  não pode ser predito antes do experimento, ele é uma variável aleatória.
  - Num problema de estimação de uma população com distribuição normal  $N(\mu, \sigma^2)$  encontrou-se  $\bar{x} = 11.3$  numa amostra de tamanho  $n = 10$ . A distribuição de probabilidade desse valor 11.3 é também uma normal com média  $\mu$  e variância  $\sigma^2/10$ .
  - Suponha que  $\bar{X}$  esteja sendo usado como estimador da média populacional  $\mu$ . Como a variância de  $\bar{X}$  decresce com o tamanho da amostra, então toda estimativa obtida a partir de uma amostra de tamanho 15 possui erro de estimação menor que qualquer outra estimativa obtida a partir de uma amostra de tamanho 10.
  - Um estimador não-viciado é sempre melhor que um estimador viciado.
  - Considere uma estimativa da média populacional  $\mu$  baseada na média aritmética de uma amostra de tamanho 10 e outra estimativa com uma amostra de tamanho 15. Nunca devemos preferir a estimativa baseada na amostra de 15 pois a estimativa baseada na amostra de tamanho 10 tem alguma chance de estar mais perto do verdadeiro valor desconhecido de  $\mu$ .
-

- (g) Sejam  $X_1, \dots, X_n$  i.i.d.'s com distribuição exponencial com parâmetro  $\lambda$ . O interesse é estimar  $E(X_i) = 1/\lambda$ . Suponha que apenas as variáveis  $X_i$ 's que ficarem maiores ou iguais a  $x = 10$  sejam observadas. Todas as observações menores que  $x = 10$  são perdidas. Assim, a amostra final é possuir um número  $0 < k \leq n$  de observações.

O estimador baseado na média amostral da amostra de  $k$  variáveis é viciado. Ele subestima ou superestima sistematicamente  $E(X_i)$ ? Não precisa calcular o vício.

A distribuição de  $X_i$  DADO QUE  $X_{>10}$  tem a densidade dada por

$$f(x; \lambda) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 10 \\ \lambda \exp(-\lambda(x - 10)), & \text{se } x \geq 10 \end{cases}$$

Se  $X_1, \dots, X_k$  é uma amostra desta distribuição TRUNCADA (em que só observamos os  $X_i$ 's maiores que 10), encontre o MLE de  $\lambda$ .

RESP: O MLE é  $k / \sum_i (x_i - 10)$ .

- (h) Suponha que será coletada uma amostra de observações independentes  $Y$  com distribuição normal. Elas são identicamente distribuídas. A média de  $Y$  varia de acordo com o valor de uma covariável  $x$  de forma que  $Y = \alpha + \beta x + \epsilon$ , onde  $\epsilon$  possui distribuição normal com média 0 e variância  $\sigma^2$ . Os valores possíveis de  $x$  são três: baixo ( $x = -1$ ), médio ( $x = 0$ ) e alto ( $x = 1$ ). Os valores de  $x$  são fixos e conhecidos. Eles são variáveis aleatórias.

São feitas três observações em cada nível de  $x$ . Podemos representar os dados na tabela e no gráfico dos valores observados de  $Y$  versus  $x$  que Figura 16.1.

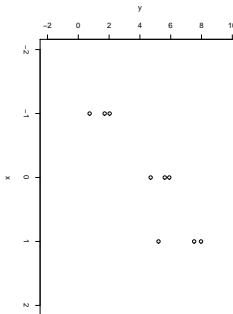


Figura 16.1: Gráfico dos valores observados  $y_{ij}$  versus  $x_j$ .

$x_j = -1$	$x_j = 0$	$x_j = 1$
$Y_{11}$	$Y_{21}$	$Y_{31}$
$Y_{12}$	$Y_{22}$	$Y_{32}$
$Y_{13}$	$Y_{23}$	$Y_{33}$

Vamos representar as observações como  $Y_{ij} = \alpha + \beta x_j + \epsilon_{ij}$  onde  $x_j = -1, 0$  ou  $1$ , e os  $\epsilon_{ij}$  são i.i.d. com distribuição  $N(0, \sigma^2)$ .

- é correto dizer que  $(Y_{ij}|x_j) \sim N(\alpha + \beta x_j, \sigma^2)$  e que as variáveis  $Y_{ij}$  são independentes?  
DICA: existe uma pegadinha aqui.
- Calcule  $E(Y_{ij}|x_j)$  e  $\text{Var}(Y_{ij}|x_j)$  nos três casos:  $x_j = -1$ ,  $x_j = 0$  e  $x_j = 1$ . A variância depende do valor de  $x_j$ ? E o valor esperado?
- Deseja-se um estimador para  $E(Y|x_j = 0) = \alpha$  quando  $x = 0$ . Um primeiro estimador bem simples é proposto:

$$\frac{Y_{21} + Y_{22} + Y_{23}}{3}$$

Ele simplesmente toma a média das três observações quando  $x = 0$ . Mostre que este estimador é  $\frac{1}{2}$ -viciado para  $\alpha$  e encontre sua variância. Qual o risco quadrático desse estimador? OBS: Risco quadrático de um estimador é o seu MSE.

- Um segundo estimador é proposto:

$$\frac{Y_{11} + Y_{12} + Y_{13} + Y_{21} + Y_{22} + Y_{23} + Y_{31} + Y_{32} + Y_{33}}{9}$$

Ele toma a média aritmética simples de todas as 9 observações disponíveis. Mostre que este estimador também é  $\frac{1}{2}$ -viciado para  $\alpha$  e encontre sua variância.

- Qual dos dois estimadores é preferível?
- O interesse agora é em estimar  $\beta$ , o quanto  $Y$  aumenta em média quando passamos de um  $\frac{1}{2}$ -vel de  $x$  para o  $\frac{1}{2}$ -vel seguinte. Um primeiro estimador é o valor médio de  $Y$  quando  $x = 0$  menos o valor médio de  $Y$  quando  $x = -1$ . Isto é,

$$T_1 = \bar{Y}_0 - \bar{Y}_{-1} = \frac{Y_{21} + Y_{22} + Y_{23}}{3} - \frac{Y_{11} + Y_{12} + Y_{13}}{3}$$

Mostre que  $T_1$  é uma combinação linear  $\sum_{ij} a_{ij} Y_{ij}$  dos  $Y$ 's e identifique os valores de  $a_{ij}$ .

- Mostre que  $E(T_1)$  é  $\frac{1}{2}$ -viciado para  $\beta$  e ache sua variância.
- De maneira análoga, defina

$$T_1 = \bar{Y}_1 - \bar{Y}_0$$

e ache sua média e variância.

- Um terceiro estimador, melhor que os dois anteriores, leva em conta apenas as observações nos dois extremos, quando  $x = -1$  e  $x = 1$ .

$$T_3 = \frac{1}{2} \bar{Y}_1 - \bar{Y}_{-1}$$

Mostre que  $T_3$  também é uma combinação linear dos  $Y$ 's, que é  $\frac{1}{2}$ -viciado e que possui risco quadrático (ou MSE) menor que  $T_1$  e  $T_2$ .

- (i) Uma operadora de planos de saúde sabe que o custo médio das internações varia muito de acordo com a idade do cliente. Aqueles com mais de 70 anos de idade acarretam a maior parte dos custos embora eles tenham uma participação pequena no portfolio de clientes.

A operadora decidiu investigar um pouco mais a incidência de internações entre seus clientes idosos. Para isto, escolheu uma amostra de clientes com idade acima de 70 anos e obteve o número de internações que cada um teve nos últimos dois anos. Decidiu-se adotar um modelo de Poisson para as contagens do número de internações.

Nem todos os selecionados foram clientes por todo o período de dois anos. Aqueles que estão na operadora há pouco tempo devem apresentar, em média, menos internações do que aqueles que estão na operadora durante os últimos dois anos. Por isto, a média da Poisson deveria refletir o tempo de permanência no plano de cada cliente. Dessa forma chegou-se ao seguinte modelo estatístico.

Sejam  $Y_1, \dots, Y_n$  a amostra de clientes. Suponha que essas sejam variáveis aleatórias independentes e que  $Y_i \sim \text{Poisson}(\lambda t_i)$  onde  $t_i$  é o tempo de permanência do  $i$ -ésimo cliente na empresa (em meses) e  $\lambda > 0$  é desconhecido e representa o número esperado de internações por mês. O interesse é estimar  $\lambda$  a partir dos dados que podem ser representados como na tabela abaixo:

$i$	$t_i$	$y_i$
1	24	4
2	12	1
3	3	0
4	24	1
...	...	...

- Pensou-se inicialmente em estimar  $\lambda$  simplesmente tomando o número médio de internações e dividir pelo tempo de observação de 24 meses. Isto é,  $T_1 = \bar{Y}/24$ . Mostre que este estimador é viciado para estimar  $\lambda$  a menos que  $\sum_i t_i = 24n$ . Por exemplo, se todos os clientes tiverem  $t_i = 24$  esta condição seria válida.
- Tentando corrigir o vício do estimador  $T_1$ , pensou-se então em adotar

$$T_2 = \frac{\bar{Y}}{\bar{t}} = \frac{Y_1 + \dots + Y_n}{t_1 + \dots + t_n}$$

Mostre que  $T_2$  é não-viciado para estimar  $\lambda$  e encontre seu risco quadrático de estimação.

- Mais tarde, outro analista resolveu considerar o estimador

$$T_3 = \frac{1}{n} \left( \frac{Y_1}{t_1} + \dots + \frac{Y_n}{t_n} \right)$$

Mostre que  $T_3$  é não-viciado para estimar  $\lambda$  e encontre seu risco quadrático de estimação.

- É possível dizer que  $T_2$  é sempre melhor ou igual a  $T_3$  considerando-se os riscos quadráticos dos dois. Prove isto usando a desigualdade entre a média aritmética e a média harmônica que diz que

$$\frac{x_1 + \dots + x_n}{n} \geq \frac{n}{\frac{1}{x_1} + \dots + \frac{1}{x_n}}$$

para quaisquer números reais positivos  $x_1, \dots, x_n$ .

---

## Capítulo 17

# Modelos Lineares Generalizados

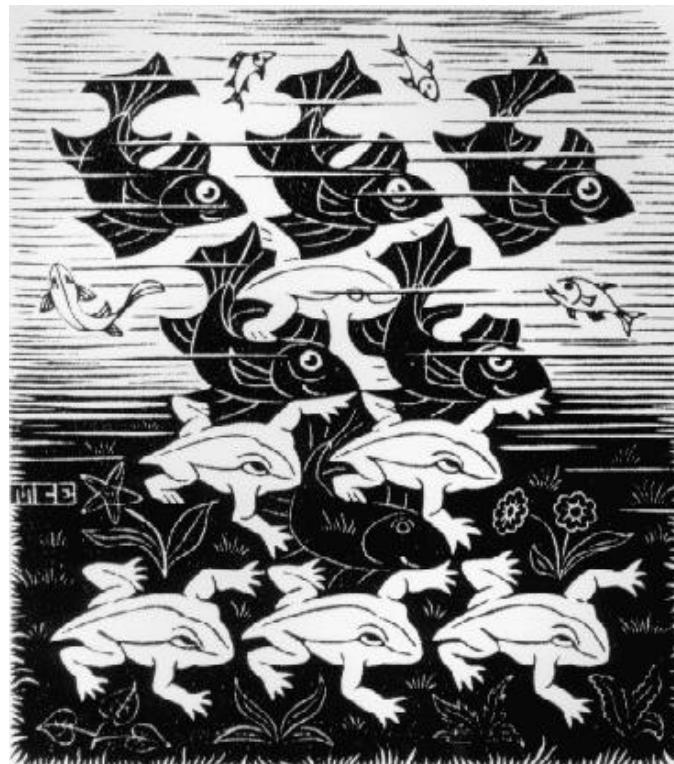


Aqui vao os exercícios



## Capítulo 18

# Regressão Não-Paramétrica

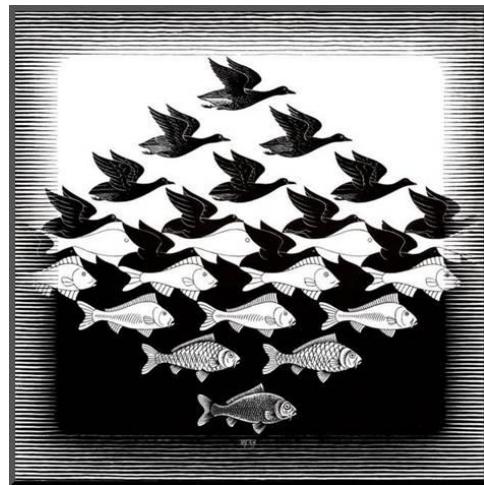


Aqui vao os exercícios



# Capítulo 19

## Seleção de Modelos



### 19.1 Entropia

### 19.2 Distância de Kullback-Leibler

### 19.3 Critério de Akaike

### 19.4 MDL: Minimum Description Length

Aqui vao os exercícios