Alunos: Álvaro Kothe, Giovanni Piccirilli, Larissa Eleutério, Marcos Andrade

Docente: Viviana Giampaoli

Data: 23/09/2021



Modelos Mistos - Lista 2

```
## importando pacote e dados necessários
library(nlme)
data("Orthodont")
data = Orthodont
```

Exercício 1

Cosidere a base Orthodont, ajuste o modelos misto da distância em função da idade e do sexo, com o efeito aleatório sujeito, considerando o método ML e REML. Observe se existe diferenças.

Resposta:

Primeiramente ajustou-se o modelo pelo método da máxima verossimilhança.

```
## ajustando um modelo de efeitos fixos pelo método da máxima verossimilhança
lmeML1=lme(fixed= distance~age + Sex, random=~ 1 |Subject, method="ML",data=data)
## resultados
lmeML1
```

```
## Linear mixed-effects model fit by maximum likelihood
##
     Data: data
##
     Log-likelihood: -217.4282
##
     Fixed: distance ~ age + Sex
## (Intercept)
                             SexFemale
                       age
   17.7067130
                 0.6601852 -2.3210227
##
##
## Random effects:
   Formula: ~1 | Subject
##
           (Intercept) Residual
              1.730079 1.422728
## StdDev:
## Number of Observations: 108
## Number of Groups: 27
```

As estimativas dos parâmetros são:

- intercepto: 17.71
- idade: 0.66
- sexo: -2.32
- desvio padrão dos resíduos: 1.42
- desvio padrão do efeito aleatório: 1.73

Ajustando agora o modelo com o método da máxima verossimilhança restrita é possível ver que as estimativas dos coeficientes de efeito fixo se mantiveram. As estimativas dos desvios tiveram uma pequena alteração.

```
## ajustando um modelo de efeitos fixos pelo método da máxima verossimilhança restrita
lmeREML1=lme(fixed= distance~age + Sex, random=~ 1 |Subject, method="REML",data=data)
## resultados
lmeREML1
```

```
## Linear mixed-effects model fit by REML
    Data: data
##
##
    Log-restricted-likelihood: -218.7563
##
    Fixed: distance ~ age + Sex
## (Intercept)
                             SexFemale
                       age
  17.7067130 0.6601852 -2.3210227
##
##
## Random effects:
## Formula: ~1 | Subject
           (Intercept) Residual
##
## StdDev:
             1.807425 1.431592
##
## Number of Observations: 108
## Number of Groups: 27
```

- desvio padrão dos resíduos: 1.43
- desvio padrão do efeito aleatório: 1.81

```
comparando_modelos <- rbind(lmeML1$coefficients$fixed, lmeREML1$coefficients$fixed) %>%
   cbind(rbind(as.numeric(VarCorr(lmeML1)[,2]), as.numeric(VarCorr(lmeREML1)[,2]))) %>%
   as.data.frame()

names(comparando_modelos) <- c("Intercepto", "Idade", "Sexo", "$\\hat{\\sigma}$", "$\\hat{\\sigma_d}$")

row.names(comparando_modelos) <- c("lmeML1", "lmeREML1")

kable(comparando_modelos)</pre>
```

	Intercepto	Idade	Sexo	$\hat{s}\hat{s}$	$\hat{s}\hat{s}_{d}$
lmeML1	17.70671	0.6601852	-2.321023	1.730079	1.422728
lmeREML1	17.70671	0.6601852	-2.321023	1.807425	1.431592

Exercício 2

Refaça o item anterior considerando outra parametrização.

Resposta:

A parametrização padrão para variáveis categóricas no pacote nlme é a casela de referência, onde crianças do sexo masculino foram marcadas com '0' e crianças do sexo femenino como '1'.

```
lmeML1$contrasts
```

```
## $Sex
## Female
## Male 0
## Female 1
```

Agora a parametricação será contraste da soma, onde o sexo masculino aparece como '1' e o sexo feminino como '-1'.

```
## $Sex
## [,1]
## Male 1
## Female -1
```

Ajustando o modelo com estimativa de máxima verossimilhança para os parâmetros, apenas as estimativas do intercepto e do coeficiente associado ao fator fixo de idade se alteram. As demais estimativas se mantêm iguais ao modelo ajustado pela máxima verissimilhança com a parametrização casela de referência.

lmeML2

```
## Linear mixed-effects model fit by maximum likelihood
##
    Data: data
##
    Log-likelihood: -217.4282
    Fixed: distance ~ age + Sex
##
## (Intercept)
                       age
                                  Sex1
##
   16.5462016 0.6601852
                            1.1605114
##
## Random effects:
   Formula: ~1 | Subject
##
           (Intercept) Residual
## StdDev:
              1.730079 1.422728
##
## Number of Observations: 108
## Number of Groups: 27
```

Similar a situação anterior, quando se comparam as estimativas do modelo estimado com máxima verossimilhança restrita, e diferença na parametrização de sexo, apenas intercepto e estimativa de coeficiente associado ao sexo são diferentes. Além disso, as variâncias de ambos os modelos permaneceram iguais.

```
## Linear mixed-effects model fit by REML
## Data: data
## Log-restricted-likelihood: -219.4494
## Fixed: distance ~ age + Sex
```

```
## (Intercept)
                                   Sex1
                        age
   16.5462016
                 0.6601852
                              1.1605114
##
##
## Random effects:
##
   Formula: ~1 | Subject
           (Intercept) Residual
##
              1.807425 1.431592
## StdDev:
##
## Number of Observations: 108
## Number of Groups: 27
```

É importante destacar que, independente da parametrização, a relação entre os fatores da variável sexo se mantém.

Quando se usa casela de referência, o fator referência é o masculino e o coeficiente traz informação que, o fato de ser menina diminui a estimativa de tamanho da glândula em -2.32.

Na utilização do contraste da soma, multiplicamos o coeficiente pela representação do sexo. No caso masculino a representação é '1' e no caso feminino a representação é '-1'. O valor do coeficiente é 1.16 (positivo). Isto significa que a estimativa de tamanho da glândula para meninos é 1*1.16 e para meninas é -1*1.16.

Portanto, em ambas as parametrizações, se interpreta que o sexo masculino influencia positivamente no tamanho da glândula.

```
comparando_modelos2 <- rbind(lmeML1$coefficients$fixed, lmeML2$coefficients$fixed, lmeREML1$coefficient
   cbind(rbind(as.numeric(VarCorr(lmeML1)[,2]), as.numeric(VarCorr(lmeML2)[,2]), as.numeric(VarCorr(lmeR
   as.data.frame()

names(comparando_modelos2) <- c("Intercepto", "Idade", "Sexo", "$\\hat{\\sigma}$", "$\\hat{\\sigma_d}$"

row.names(comparando_modelos2) <- c("lmeML1", "lmeML2", "lmeREML1", "lmeREML2")

kable(comparando_modelos2)</pre>
```

	Intercepto	Idade	Sexo	$\hat{s}\hat{s}$	$\hat{s}\hat{s}_{d}$
lmeML1	17.70671	0.6601852	-2.321023	1.730079	1.422728
lmeML2	16.54620	0.6601852	1.160511	1.730079	1.422728
lmeREML1	17.70671	0.6601852	-2.321023	1.807425	1.431592
lmeREML2	16.54620	0.6601852	1.160511	1.807425	1.431592

Exercício 3

Considerando valores próximos as estimativas de ML para os parâmetros fixos e de REML para as componentes de variância, simule duas novas bases de dados, uma em que o número de meninos é 32 e o de meninas é 22, e outra em que o número de meninos é 96 e o de meninas 33.

Resposta:

Para gerar a variável resposta simulada definimos os seguintes parâmetros:

Intercepto: 17Sexo: -2.5Idade: 0.6

desvio padrão dos resíduos: 1.45
desvio padrão do efeito aleatório: 1,85

Simulação para 54 indivívuos Vemos que as variáveis y (tamanho da glândula), intercepto e idade são numéricas, entquanto que sexo é uma variável categórica com dois fatores e sujeiro outr variável categórica com 54 fatores. O número total de linhas é 216 que representam os 54 indivíduos em cada uma das 4 idades observadas.

```
age = 0.6
sex = -2.5
intercepto = 17
sigmab = 1.85<sup>2</sup> #o summary solta o desvio padrão
sigma = 1.45^2
set.seed(2109)
#Para 32 meninos e 22 meninas
#head(data)
X = model.matrix(~age + Sex, data)
X2 = rbind(X,X) #Dobrei a matrix X
beta1 = c(intercepto, age, sex)
muv = X2%*%beta1
Zi = matrix(1,4,1) #matriz dos efeitos aletorios de cada individuo i (são iguais
#para todo i)
Vi = sigma*(diag(4)) + sigmab*(Zi\%*\((t(Zi)))) # Matriz de variância para indiv i
V = kronecker(diag(27*2), Vi) #matriz de variancia geral, essa multiplicação
#cria uma matriz quadrada em que cada elemento da diagonal é Vi
library(MASS)
y = mvrnorm(1, muv, V) #simulando da normal multivariada
individuo = rep(seq(1:54), each = 4) #qerando o indice dos individuos
datasim2 = data.frame(cbind(y, X2, individuo))
names(datasim2) = c("y","Intercept", "age", "Sex", "Subject")
datasim2$Sex <- as.factor(datasim2$Sex)</pre>
datasim2$Subject <- as.factor(datasim2$Subject)</pre>
str(datasim2)
## 'data.frame':
                    216 obs. of 5 variables:
           : num 21.6 25.2 25.5 25.9 24.6 ...
## $ Intercept: num 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
            : num 8 10 12 14 8 10 12 14 8 10 ...
## $ age
               : Factor w/ 2 levels "0", "1": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
## $ Sex
## $ Subject : Factor w/ 54 levels "1","2","3","4",...: 1 1 1 1 2 2 2 2 3 3 ...
# table(datasim2$Sex)/4 # 4 coletas por indivíduo
```

Simulação para 129 indivívuos Todas as catacterísticas observadas anteriormente se mantêm nesta simulação. O número total de linhas é 512 que representam os 129 indivíduos em cada uma das 4 idades observadas.

```
#Para 96 meninos e 32 meninas
X = model.matrix(~age + Sex, data)
```

```
Xmale = X[X[,3] == 0,]
Xmale = matrix(rep(t(Xmale), 6), ncol = ncol(Xmale), byrow = TRUE)
Xfemale = X[X[,3] == 1,]
Xfemale = matrix(rep(t(Xfemale), 3), ncol = ncol(Xfemale), byrow = TRUE)
X3 = rbind(Xmale, Xfemale)
beta1 = c(intercepto, age, sex)
muv = X3%*%beta1
Zi = matrix(1,4,1)
Z = kronecker(diag(129), Zi)
Vi = sigma*(diag(4)) + sigmab*(Zi%*%(t(Zi)))
V = kronecker(diag(129), Vi)
y = mvrnorm(1, muv, V)
individuo = rep(seq(1:129), each = 4)
datasim3 = data.frame(cbind(y, X3, individuo))
names(datasim3) = c("y","Intercept", "age", "Sex", "Subject")
datasim3$Sex <- as.factor(datasim3$Sex)</pre>
datasim3$Subject <- as.factor(datasim3$Subject)</pre>
str(datasim3)
```

```
## 'data.frame': 516 obs. of 5 variables:
## $ y : num 22.6 21.5 21.2 24.5 19.2 ...
## $ Intercept: num 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
## $ age : num 8 10 12 14 8 10 12 14 8 10 ...
## $ Sex : Factor w/ 2 levels "0","1": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
## $ Subject : Factor w/ 129 levels "1","2","3","4",..: 1 1 1 1 2 2 2 2 3 3 ...
```

Exercício 4

Realize o solicitado nos itens anteriores para a nova base.

Resposta:

Base simulada 1: 32 meninos e 22 meninas. Ajuste do modelo pelo método da máxima verossimilhança com dados de 54 crianças.

```
lmeML_sim1=lme(fixed= y~age + Sex, random=~ 1 | Subject, method="ML",data=datasim2)
lmeML_sim1
```

```
## Linear mixed-effects model fit by maximum likelihood
##
    Data: datasim2
##
    Log-likelihood: -428.5442
    Fixed: y ~ age + Sex
## (Intercept)
                                 Sex1
                      age
##
    17.052539
                 0.605882 -3.426249
##
## Random effects:
## Formula: ~1 | Subject
          (Intercept) Residual
             1.924368 1.330241
## StdDev:
```

```
##
## Number of Observations: 216
## Number of Groups: 54
```

Ajuste do modelo pelo método da máxima verossimilhança restrita com dados de 54 crianças.

```
lmeREML_sim1=lme(fixed= y~age + Sex, random=~ 1 | Subject, method="REML", data=datasim2)
lmeREML_sim1
```

```
## Linear mixed-effects model fit by REML
     Data: datasim2
     Log-restricted-likelihood: -430.8304
##
     Fixed: y ~ age + Sex
## (Intercept)
                                   Sex1
                       age
     17.052539
                  0.605882
                             -3.426249
##
##
## Random effects:
##
  Formula: ~1 | Subject
##
           (Intercept) Residual
## StdDev:
               1.96466 1.334366
##
## Number of Observations: 216
## Number of Groups: 54
```

Base simulada 2: 96 meninos e 33 meninas.

Ajuste do modelo pelo método da máxima verossimilhança com dados de 129 crianças.

```
lmeML_sim2=lme(fixed= y~age + Sex, random=~ 1 |Subject, method="ML",data=datasim3)
lmeML_sim2
```

```
## Linear mixed-effects model fit by maximum likelihood
     Data: datasim3
##
##
     Log-likelihood: -1059.951
     Fixed: y ~ age + Sex
## (Intercept)
                       age
                                   Sex1
   17.0602429
                 0.5663241 -2.1310935
##
##
## Random effects:
   Formula: ~1 | Subject
##
           (Intercept) Residual
## StdDev:
              1.833312 1.475319
## Number of Observations: 516
## Number of Groups: 129
```

Ajuste do modelo pelo método da máxima verossimilhança restrita com dados de 129 crianças.

```
lmeREML_sim2=lme(fixed= y~age + Sex, random=~ 1 |Subject, method="REML",data=datasim3)
lmeREML_sim2
```

```
## Linear mixed-effects model fit by REML
##
    Data: datasim3
##
     Log-restricted-likelihood: -1063.393
    Fixed: y ~ age + Sex
##
## (Intercept)
                       age
                                   Sex1
   17.0602429
                 0.5663241 -2.1310935
##
## Random effects:
##
   Formula: ~1 | Subject
##
           (Intercept) Residual
## StdDev:
              1.849627 1.477229
##
## Number of Observations: 516
## Number of Groups: 129
```

Exercício 5

Compare os resultados.

Resposta:

Modelo	Intercepto	Idade	Sexo	$\hat{\sigma}$	$\hat{\sigma_d}$	$\hat{\sigma_d}/\hat{\sigma}$
ML	17.70671	0.6601852	-2.321023	1.730079	1.422728	0.8223486
ML reparametrizado	16.54620	0.6601852	1.160511	1.730079	1.422728	0.8223486
ML Simulado 1	17.05254	0.6058820	-3.426249	1.924368	1.330241	0.6912612
ML Simulado 2	17.06024	0.5663241	-2.131093	1.833312	1.475319	0.8047288
REML	17.70671	0.6601852	-2.321023	1.807425	1.431592	0.7920616
REML reparametrizado	16.54620	0.6601852	1.160511	1.807425	1.431592	0.7920616
REML Simulado 1	17.05254	0.6058820	-3.426249	1.964660	1.334366	0.6791842
REML Simulado 2	17.06024	0.5663241	-2.131093	1.849627	1.477229	0.7986632

Pela tabela acima percebe-se que as estimativas dos efeitos fixos permanecem iguais quando ajustado no mesmo banco de dados, independente se foi utilizado o método de Maxíma verossimilhança ou máxima verossimilhança restrita.

A principal diferença entre os métodos se encontra nas estimativas dos desvios padrão, em que o método de máxima verossimilhança subestima σ .

Utilizando um banco de dados maior, que são as bases simuladas, vemos que a diferença entre os desvios é menor, o que leva a considerar que não existe diferença entre os métodos para uma amostra suficientemente grande.