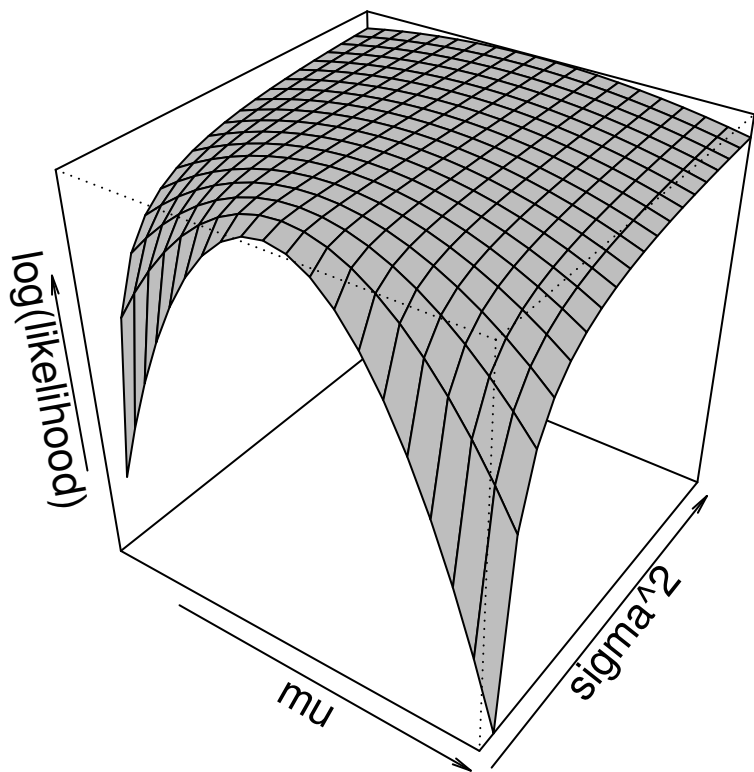
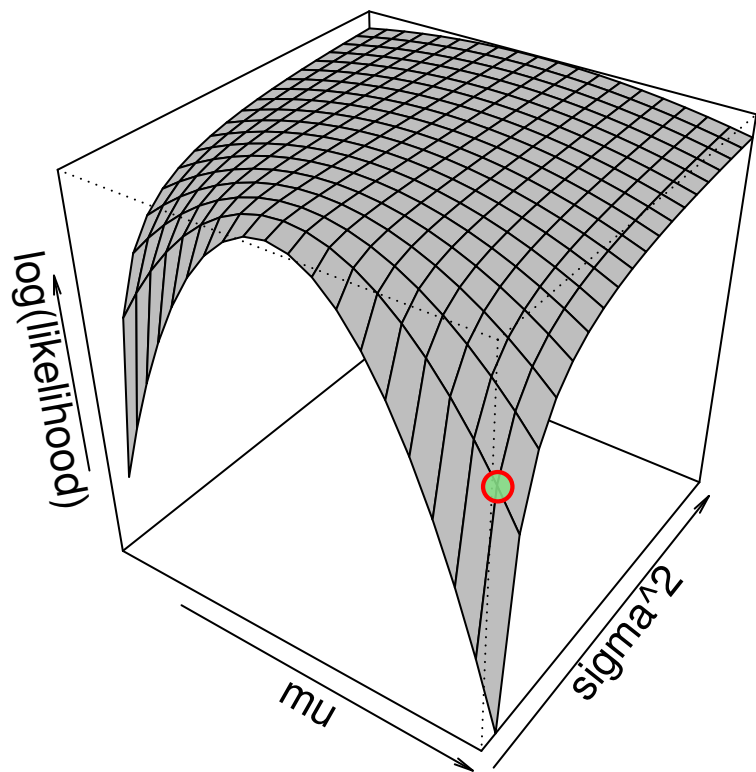


# Maximizar uma função

O método de busca mais simples tenta maximizar (ou minimizar) o valor de uma função.



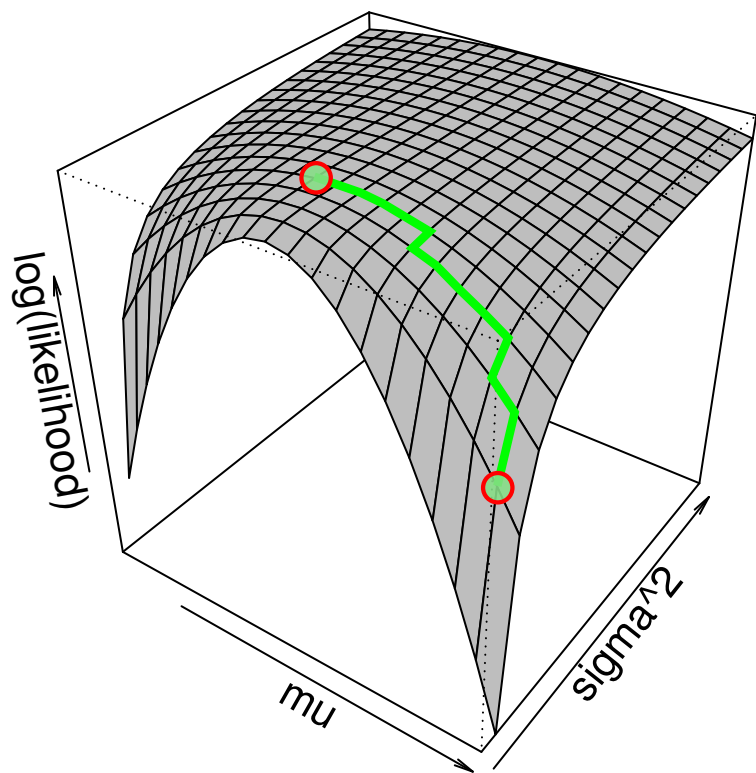
# Maximizar uma função



O método de busca mais simples tenta maximizar (ou minimizar) o valor de uma função.

Temos um valor inicial.

# Maximizar uma função



O método de busca mais simples tenta maximizar (ou minimizar) o valor de uma função.

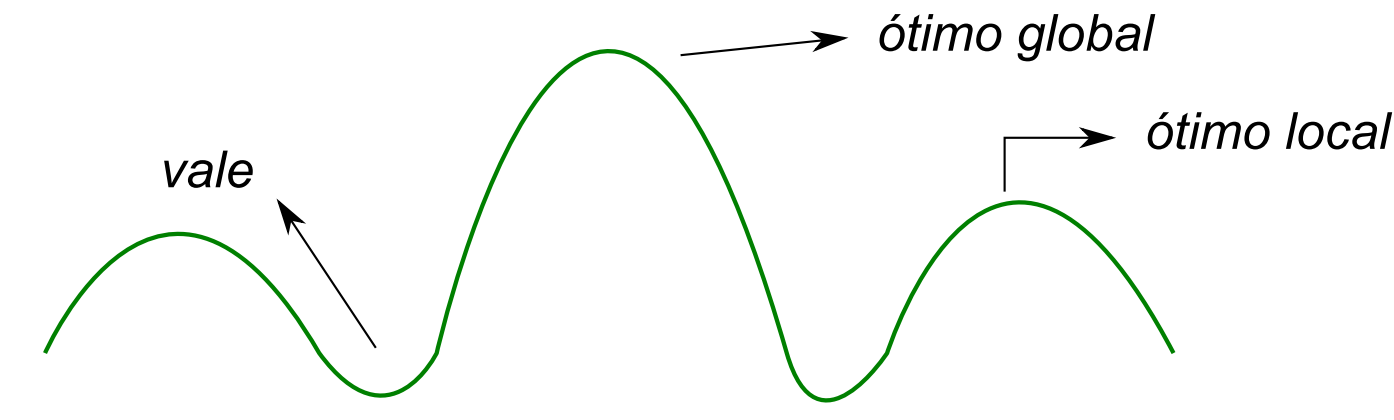
Temos um valor inicial.

Caminhamos pela superfície de verossimilhança até encontrarmos uma combinação de parâmetros que maximiza a verossimilhança.

# Maximizar uma função

Esse procedimento pode ser complicado quando a superfície apresenta *ótimos locais*.

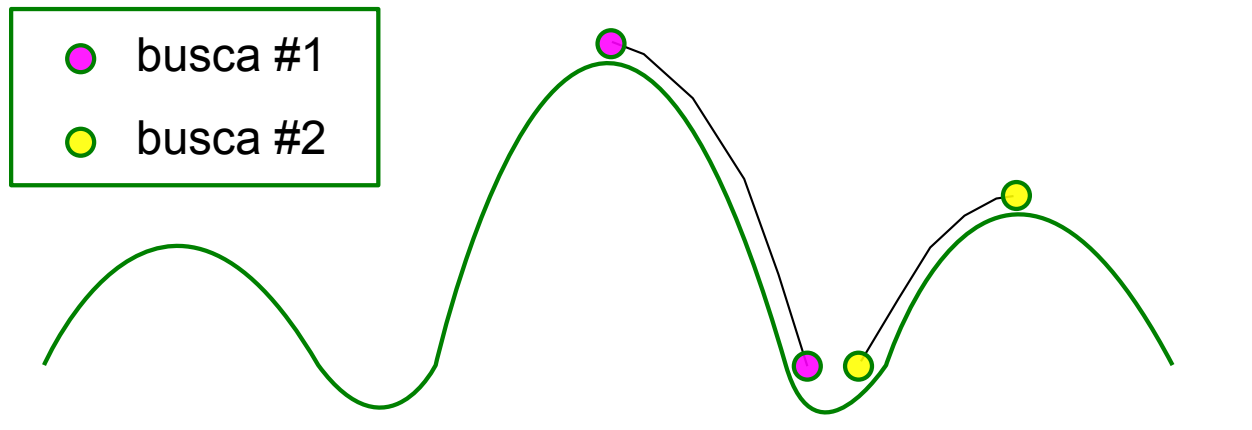
Ótimos locais são picos na superfície de likelihood separados por vales e que apresentam menores valores de likelihood.



# Maximizar uma função

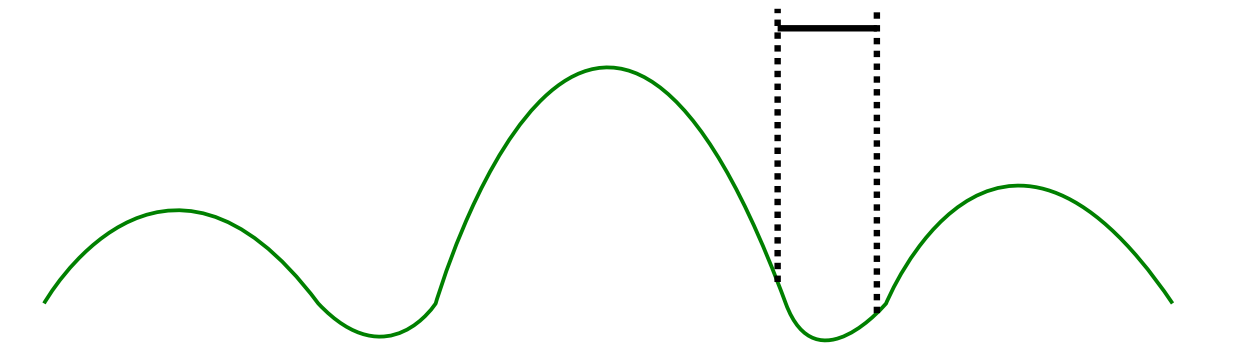
Métodos de busca baseados em "escalada estrita" (greedy algorithm ou algoritmo ambicioso).

Algoritmos ambiciosos buscam o ótimo local em cada um dos passos da busca. Podem ficar presos em um ótimo local.



# Maximizar uma função

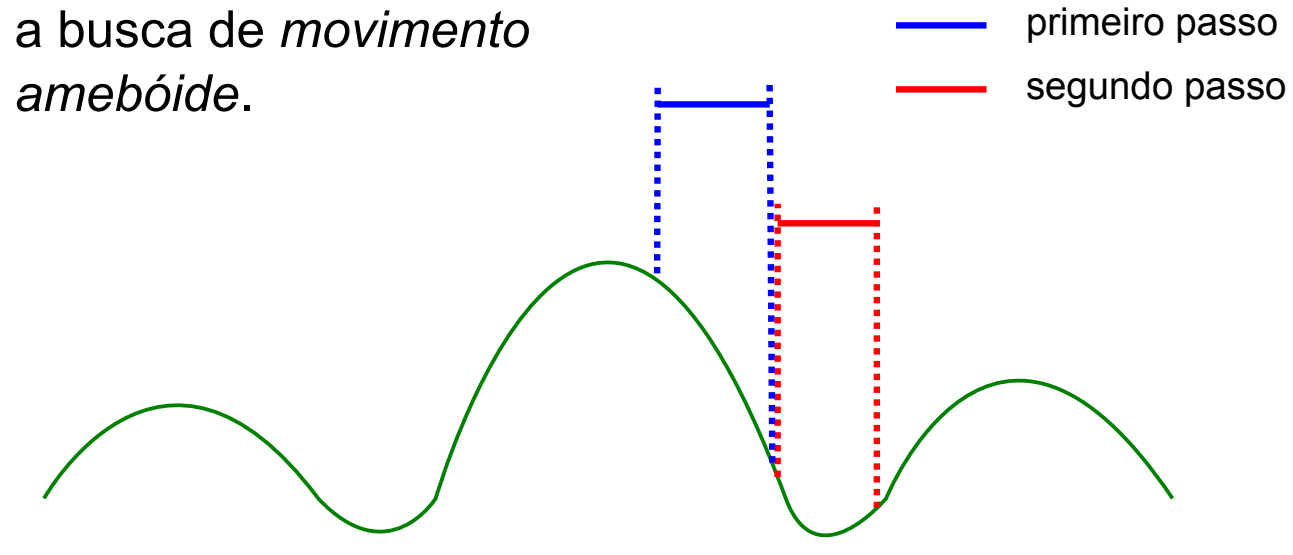
- O programa de busca para MLE mais usado no R é a função 'optim'. 'optim' aplica diversos algoritmos de busca.
- O mais usado é o Nelder and Meade (1965). Esse método se baseia em usar  $n+1$  pontos de referência. O comportamento da função é extrapolado usando os  $n+1$  pontos.



# Maximizar uma função

A distância entre os pontos avaliados varia durante a análise.  
Isso garante que o algoritmo de Nelson and Meade seja  
seja capaz de avaliar ótimos locais.

O método é conhecido como  
a busca de *movimento*  
*amebóide*.



# Maximizar uma função

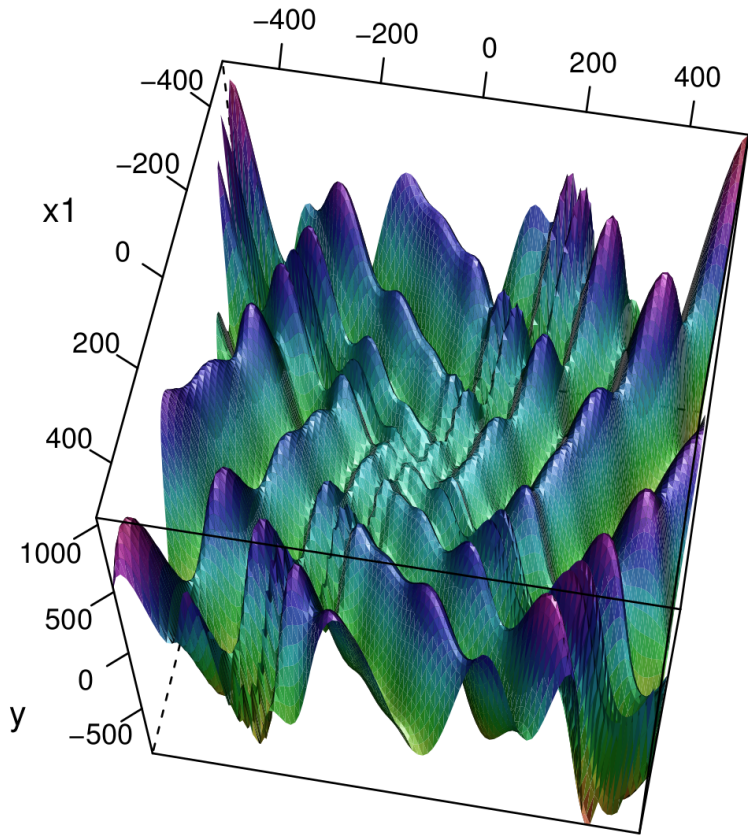
Um desafio para os métodos de busca são superfícies particularmente rugosas ou que possuem regiões planas (*flat regions*).

Superfícies rugosas apresentam muitos ótimos locais e regiões planas não deixam "pistas" para onde caminhar e a busca pode ficar presa.

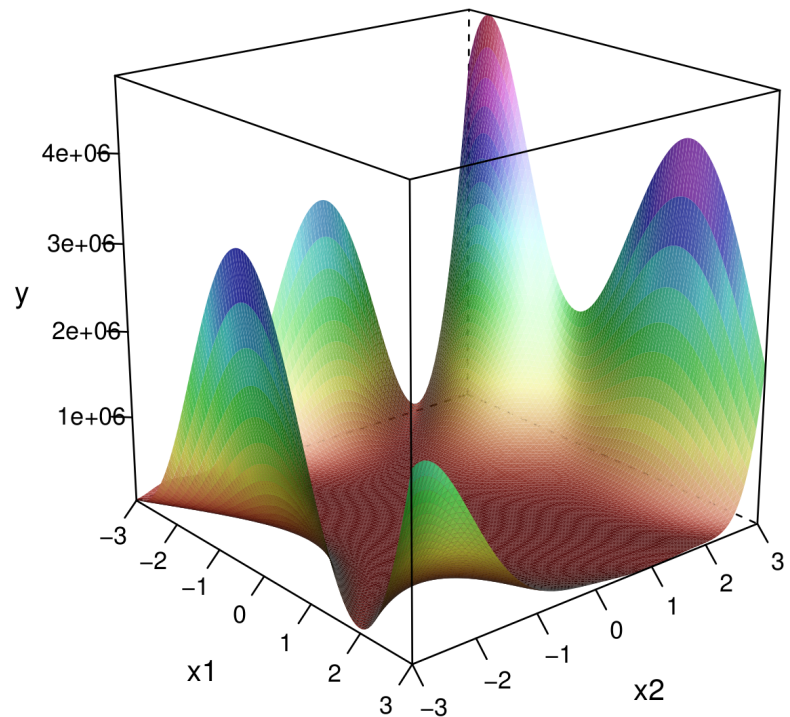
Uma série de métodos modernos, vários aplicados ao MCMC, tem por objetivo fazer buscas eficientes na presença destas dificuldades.



# Maximizar uma função



Eggholder function

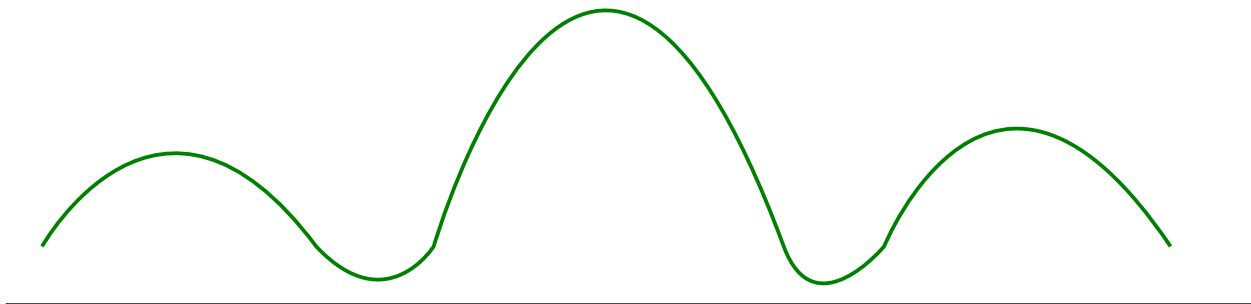


Goldstein Price function

# Maximizar uma função

O objetivo deste tipo de busca é partir do ponto de início e chegar no ótimo global. O resultado da busca é somente um ponto.

Sendo assim, não há preocupação em "mapear" a superfície de likelihood. Essa é a principal diferença "prática" entre os resultados de uma estimativa usando MLE e o MCMC.



# Exemplos de métodos

Agora vamos:

- Descrever alguns modelos de métodos comparativos.
- Explorar as funções de likelihood e as suas superfícies.

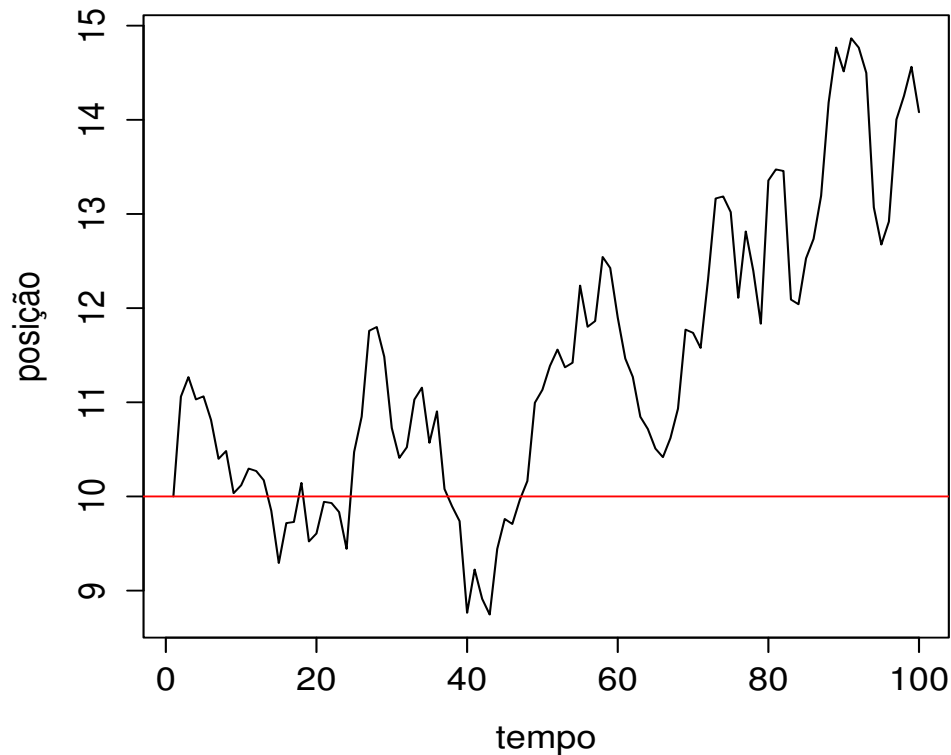
# Exemplos de métodos

## Brownian Motion (BM)

- Descreve a evolução de características contínuas.
- Apresenta dois parâmetros:
  - a) 'rate'
  - b) 'root value' ou 'mean'
- É um dos modelos mais simples e base para muitos PCMs para características contínuas.

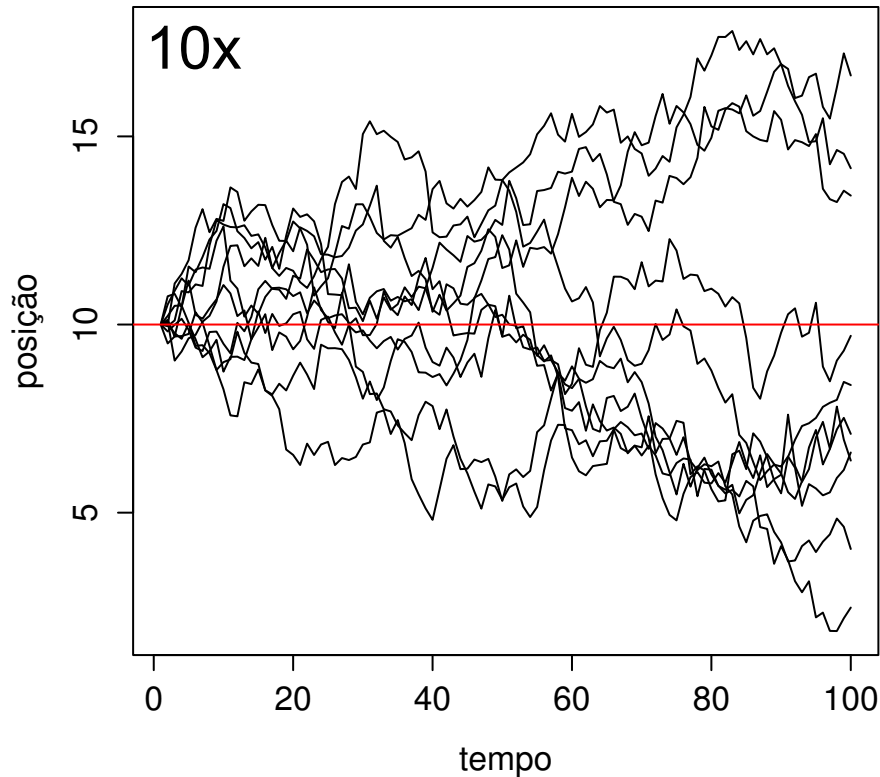
# Exemplos de métodos

O modelo **BM** é conhecido como o "andar do bêbado".  
O próximo passo pode aumentar, diminuir ou não mudar.



# Exemplos de métodos

Em média o valor não muda ao longo do tempo.  
Mas a variância aumenta em função do tempo.



# Exemplos de métodos

Mudança do valor (em cada ramo) pode ser descrita como:

$$dX_{(t)} = \sigma dB_{(t)}$$

# Exemplos de métodos

Mudança do valor (em cada ramo) pode ser descrita como:

$$dX_{(t)} = \sigma dB_{(t)}$$



Desvio padrão regula  
o processo.  
É a taxa do modelo BM.

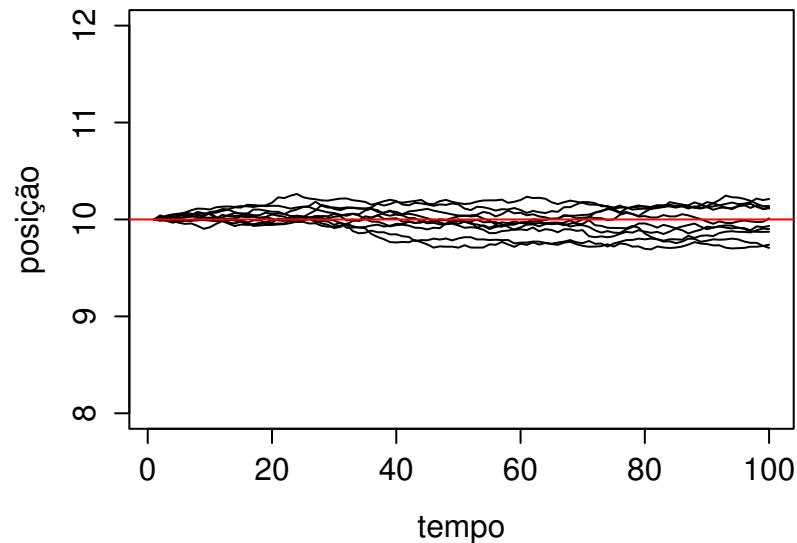
Retirado de uma  
distribuição normal com  
média 0.



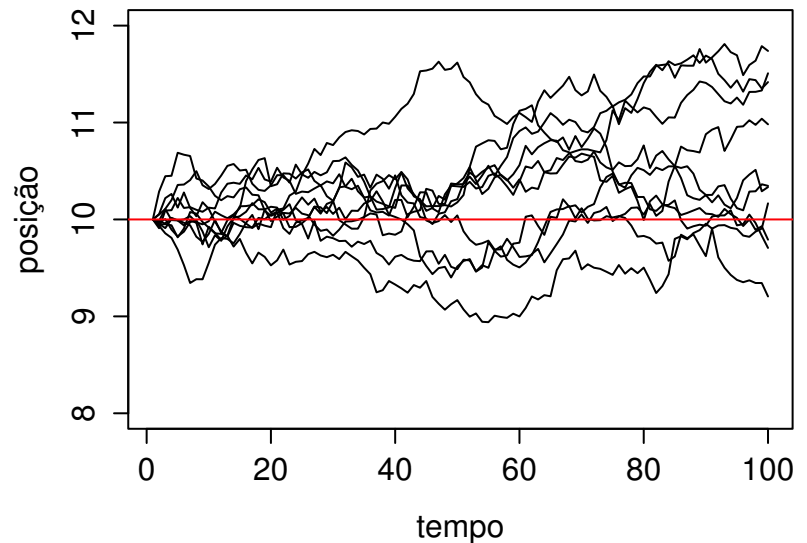
# Exemplos de métodos

$$dX_{(t)} = \sigma dB_{(t)}$$

$$\sigma = 0.02$$



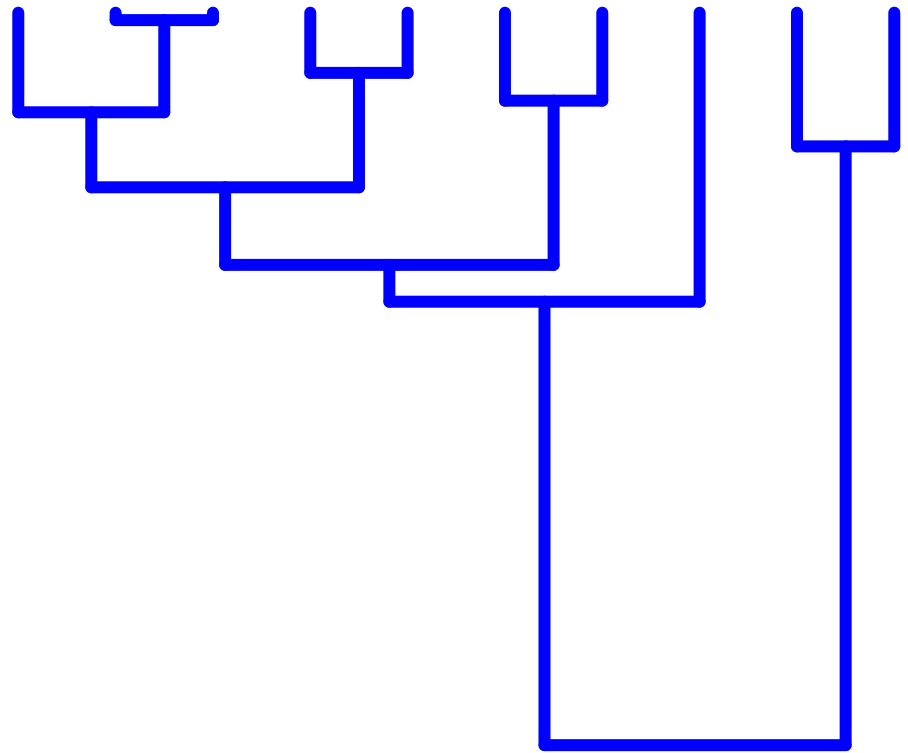
$$\sigma = 0.1$$



# Exemplos de métodos

Filogenia simulada.

Vamos usar o BM  
para simular um  
fenótipo evoluindo  
de acordo com  
essa árvore.

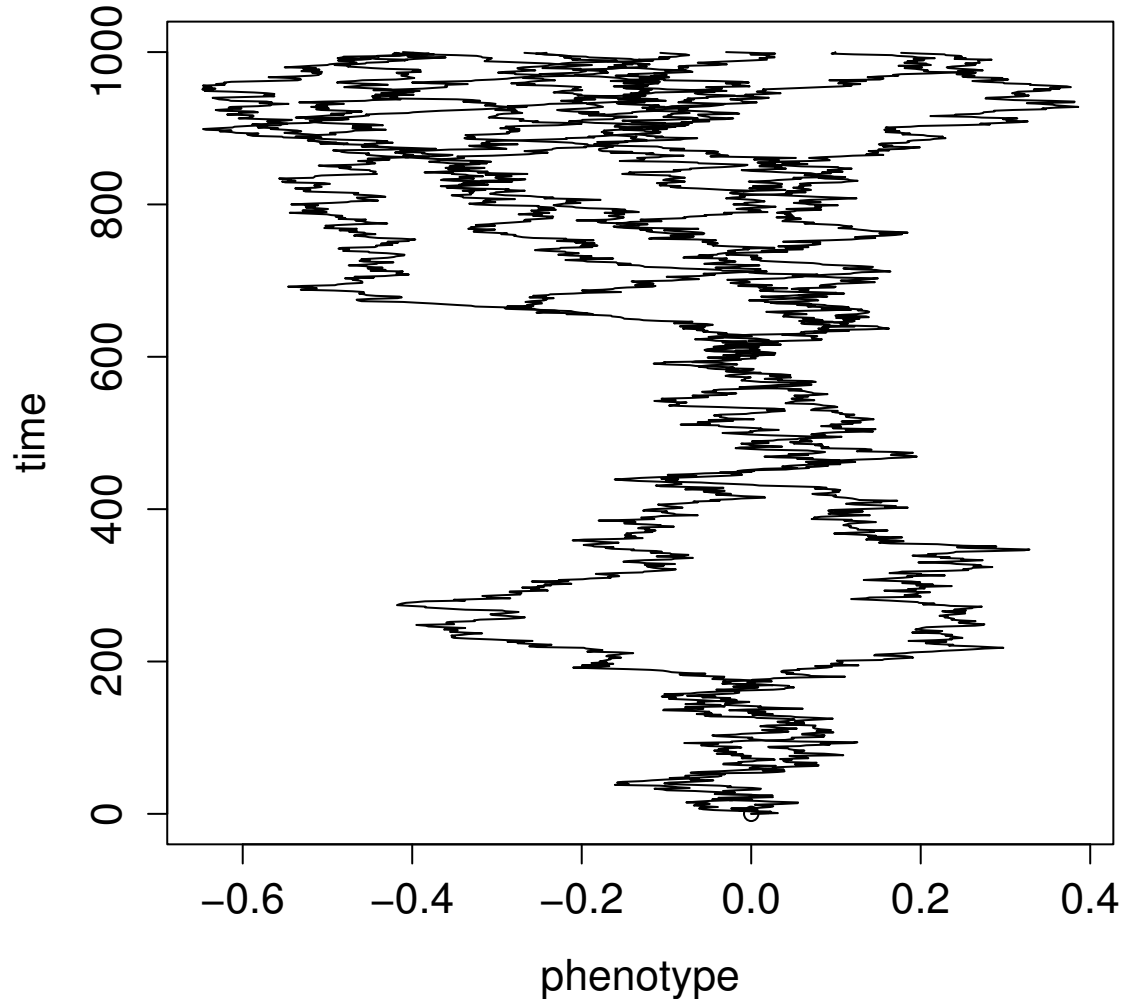


# Exemplos de métodos

Figura com o  
processo BM  
na filogenia.

$$\mu = 0$$

$$\sigma = 0.02$$

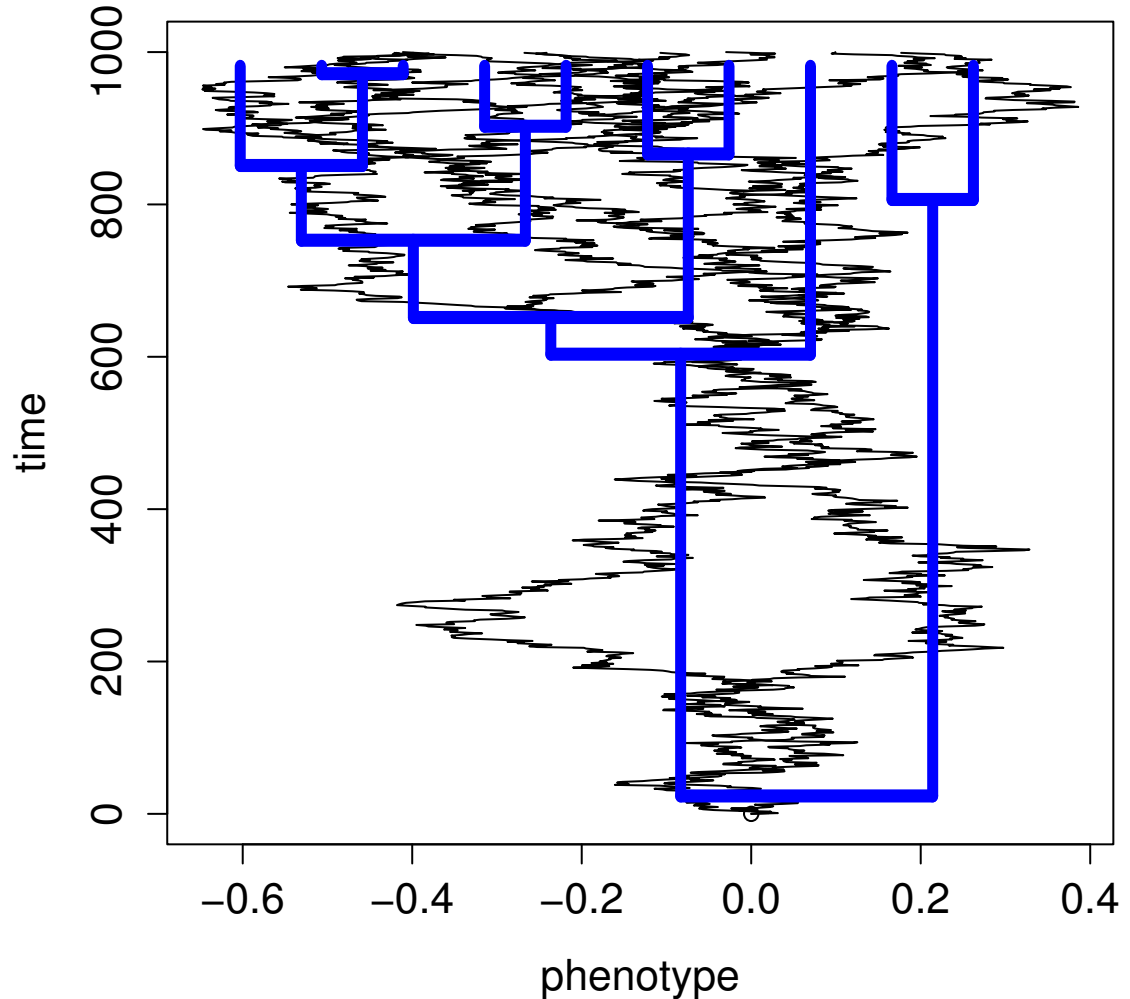


# Exemplos de métodos

Figura com o  
processo BM  
na filogenia.

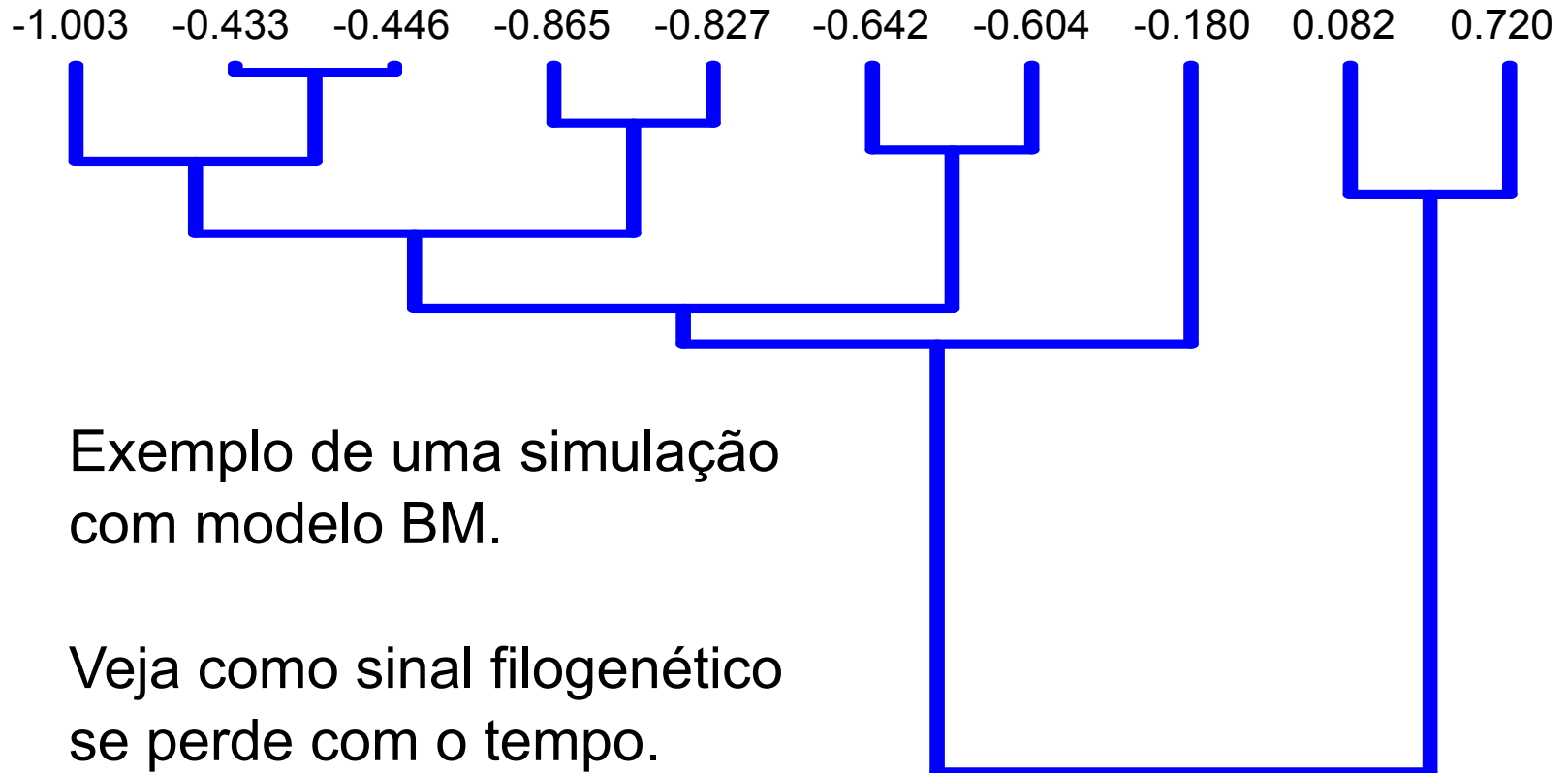
$$\mu = 0$$

$$\sigma = 0.02$$



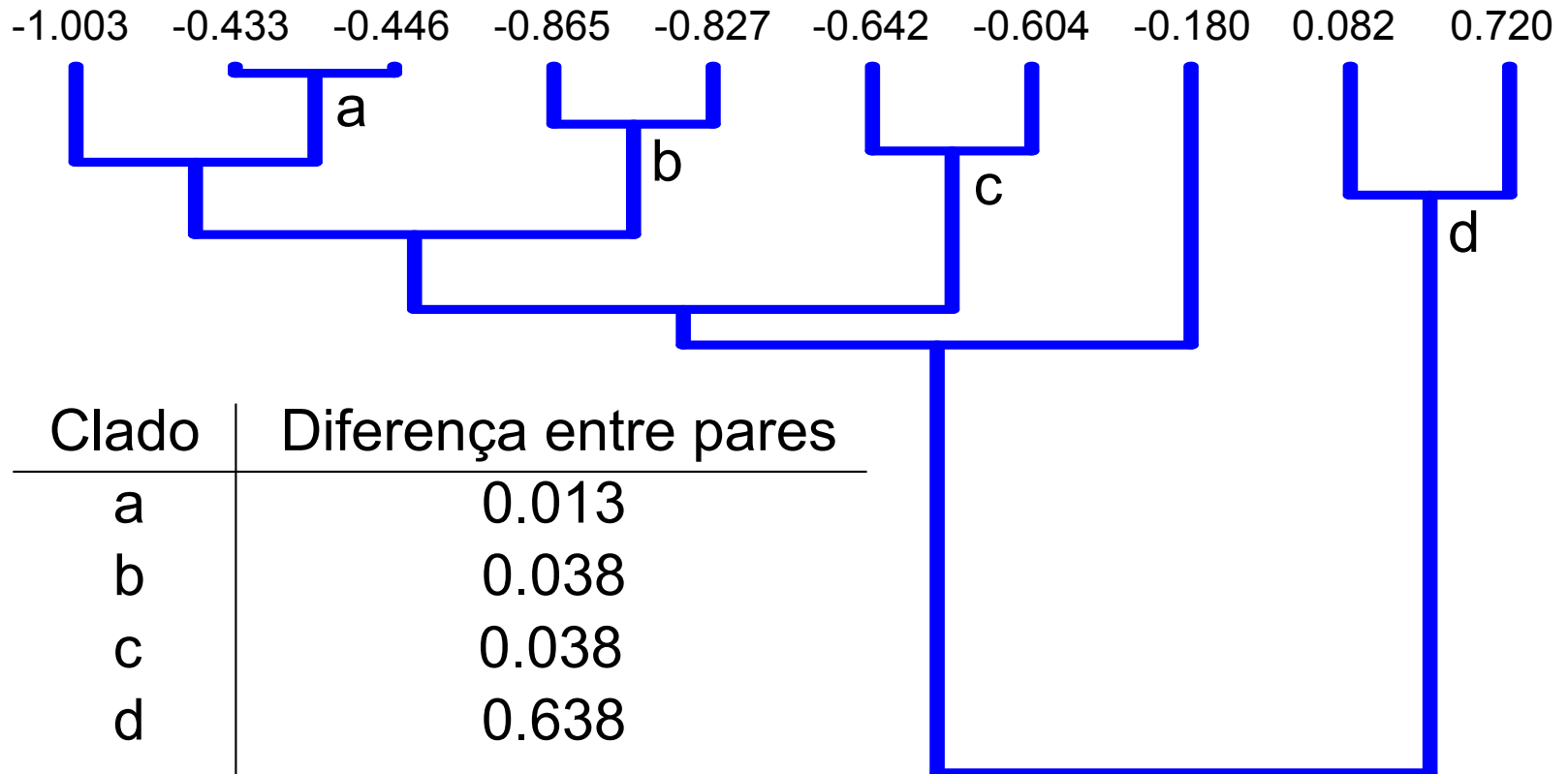
# Exemplos de métodos

$$\mu = 0 \quad \sigma = 0.02$$



# Exemplos de métodos

$$\mu = 0 \quad \sigma = 0.02$$



# Exemplos de métodos

Função de verossimilhança do modelo **BM**

$$\log P(y|\mu, \sigma^2, \mathbf{V}) = -0.5(y - \mu\mathbf{1})^T \mathbf{V}^{-1} (y - \mu\mathbf{1}) \\ - \log \left( \sqrt{(2\pi)^n \det(\mathbf{V})} \right)$$

onde:

$$\mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{C}$$

$y$  dados das espécies (tips).

$\mu$  valor para a raíz (root).

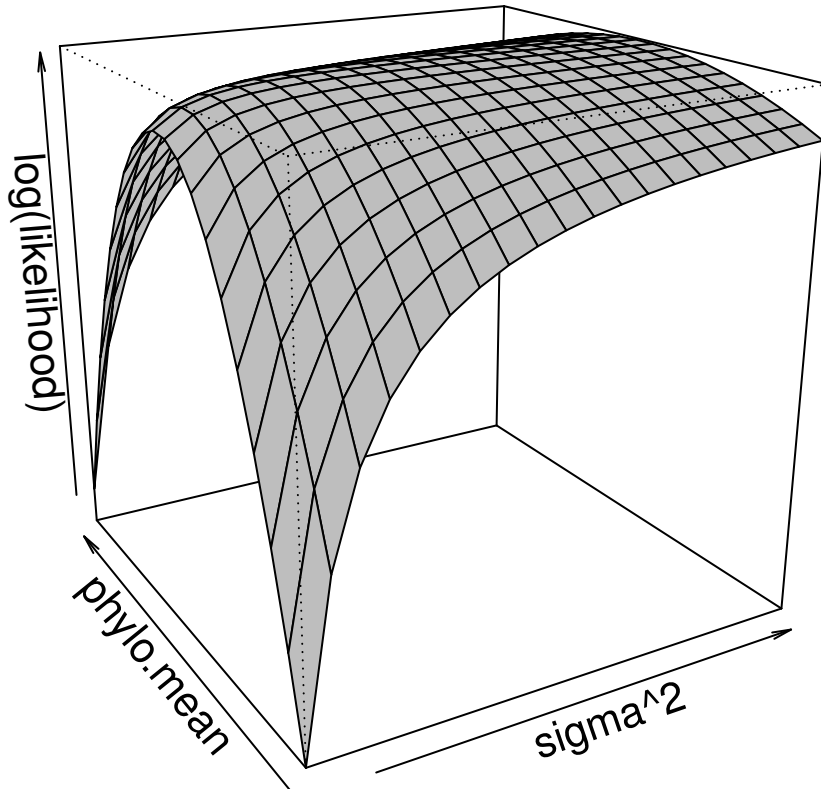
$\sigma^2$  taxa do modelo (desvio padrão).

$\mathbf{C}$  matrix de variância-covariância da filogenia.

$\mathbf{1}$  vetor de '1' com comprimento igual a  $y$ .

# Exemplos de métodos

$$\log P(y|\mu, \sigma^2, \mathbf{V}) = -0.5(y - \mu\mathbf{1})^T \mathbf{V}^{-1} (y - \mu\mathbf{1}) \\ - \log \left( \sqrt{(2\pi)^n \det(\mathbf{V})} \right)$$



Superfície de  
verossimilhança  
se assemelha à  
distribuição normal.



# Exemplos de métodos

## Ornstein-Uhlenbeck (OU)

- Introduz a noção de um *ótimo* para uma característica.
- O valor do ótimo é dado pelo parâmetro  $\theta$ .
- O modelo **OU** é uma extensão do modelo **BM**.
- Diferente do modelo **BM**, **OU** introduz uma noção mecanística de macroevolução. Agora as características evoluem em função da seleção que puxa os valores para próximo do valor ótimo.

# Exemplos de métodos

**Brownian Motion (BM)**

$$dX_{(t)} = \sigma dB_{(t)}$$

**Ornstein-Uhlenbeck (OU)**

$$dX_{(t)} = \alpha(\theta - X_{(t)})dt + \sigma dB_{(t)}$$

# Exemplos de métodos

## Brownian Motion (BM)

$$dX_{(t)} = \sigma dB_{(t)}$$

## Ornstein-Uhlenbeck (OU)

$$dX_{(t)} = \alpha(\theta - X_{(t)})dt + \sigma dB_{(t)}$$

Este termo adicional representa o efeito de atração para o valor de ótimo.

# Exemplos de métodos

## Ornstein-Uhlenbeck (OU)

$$dX_{(t)} = \alpha(\theta - X_{(t)})dt + \sigma dB_{(t)}$$

onde:

$\alpha$  "força" da seleção para o ótimo.

$\theta$  valor do ótimo.

$X_{(t)}$  valor da característica no tempo  $(t)$ .

$\sigma dB_{(t)}$  processo de Brownian motion.

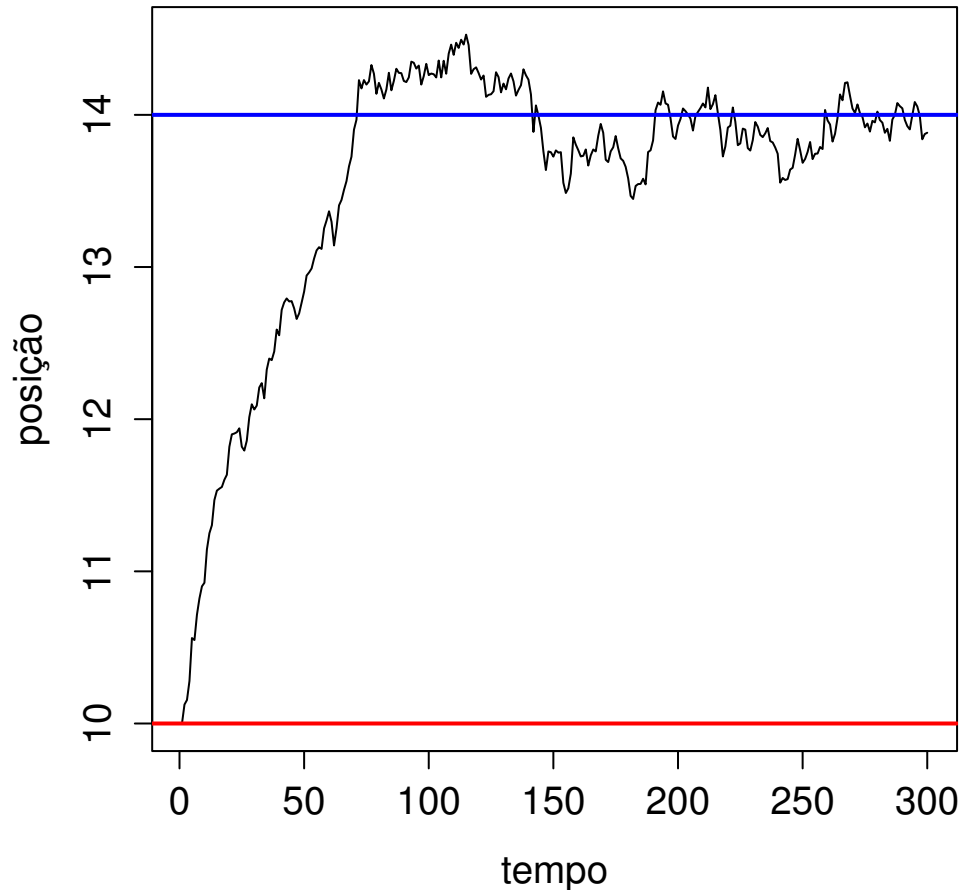
# Exemplos de métodos

$\alpha$  = força de seleção

$\sigma^2$  = taxa de BM

$\theta$  = valor ótimo

$X_{(t=0)}$  = valor inicial



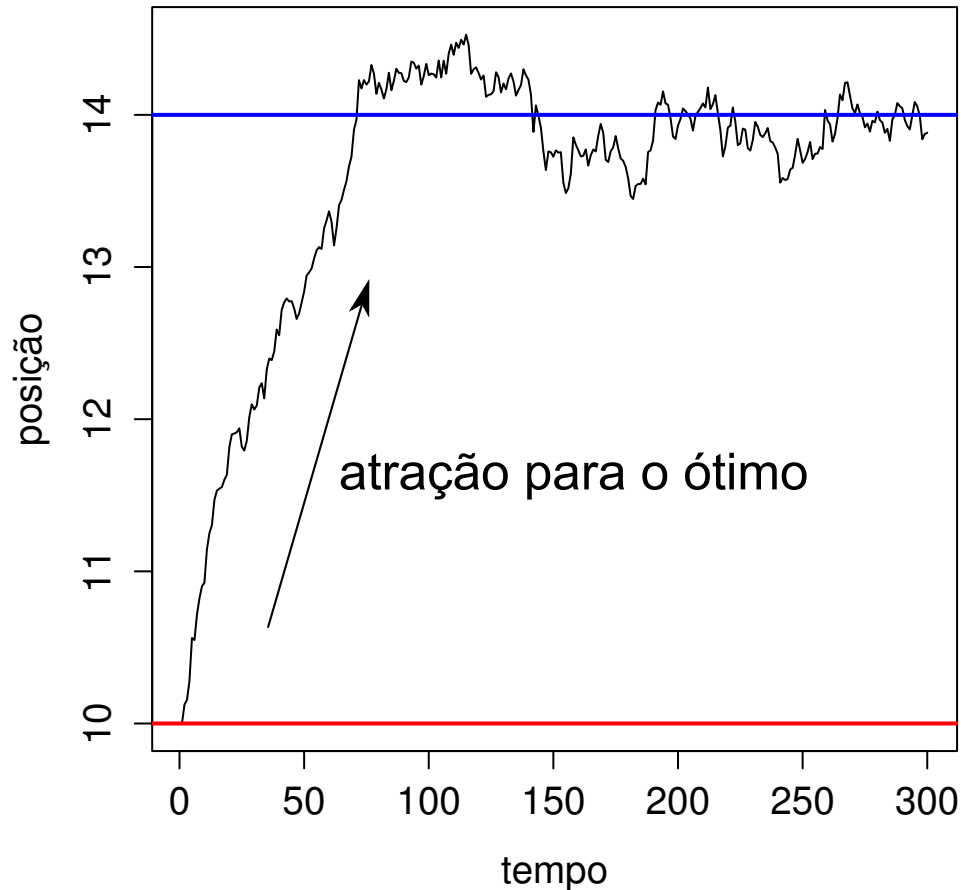
# Exemplos de métodos

$\alpha$  = força de seleção

$\sigma^2$  = taxa de BM

$\theta$  = valor ótimo

$X_{(t=0)}$  = valor inicial



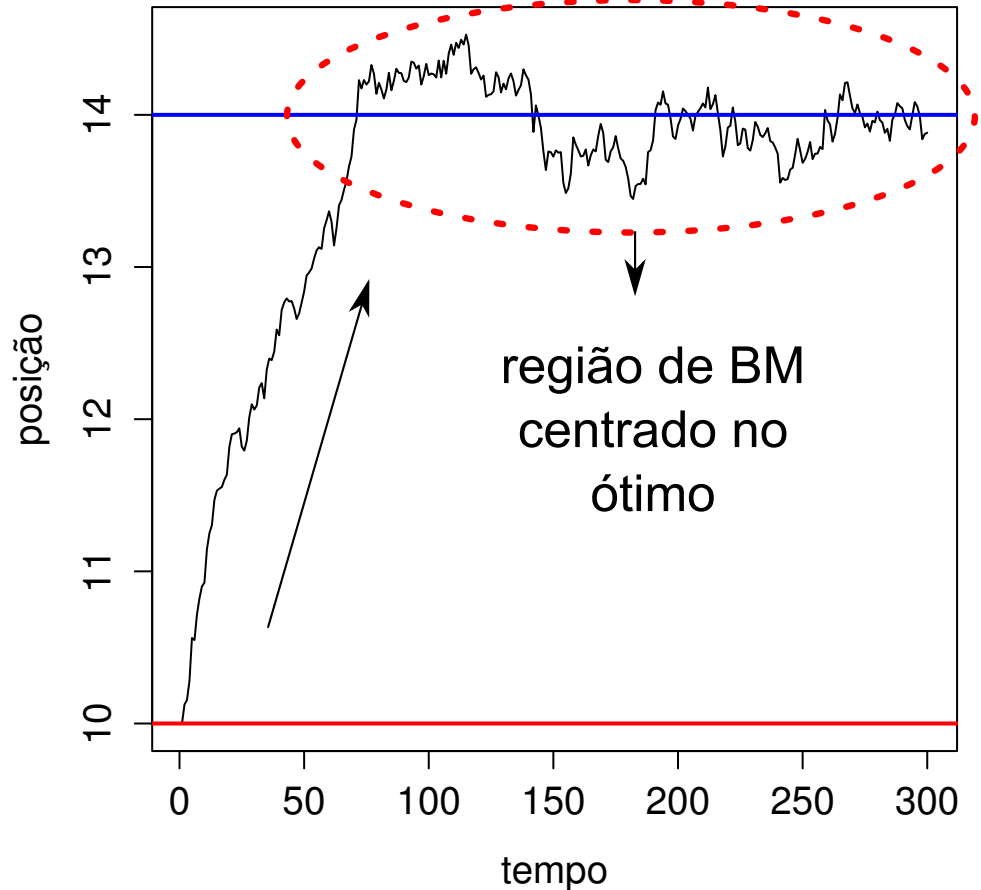
# Exemplos de métodos

$\alpha$  = força de seleção

$\sigma^2$  = taxa de BM

$\theta$  = valor ótimo

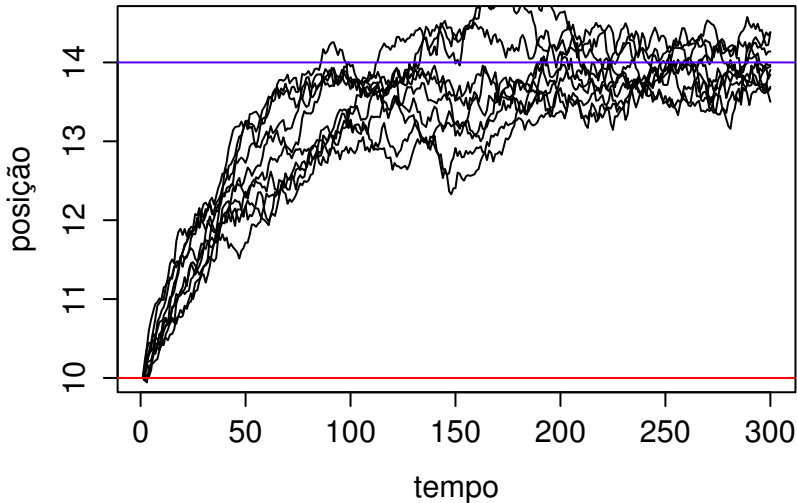
$X_{(t=0)}$  = valor inicial



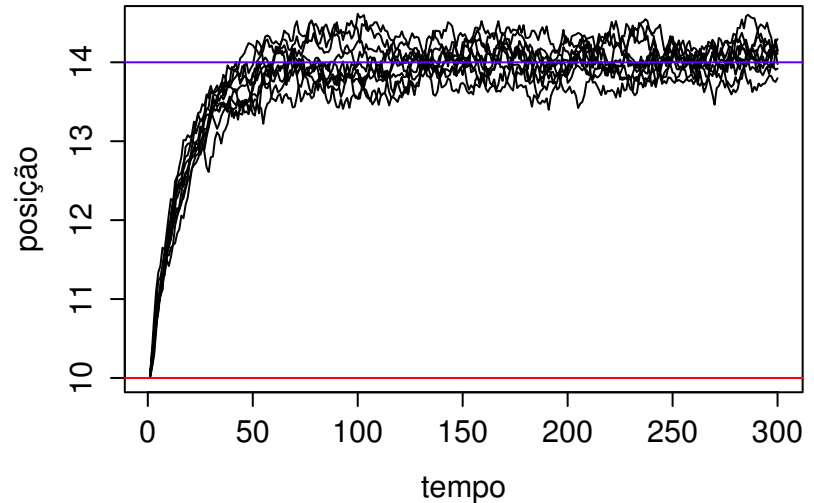
# Exemplos de métodos

Valores maiores de  $\alpha$  fazem com que o processo chegue no ótimo mais rapidamente.

**alpha = 0.02**



**alpha = 0.06**



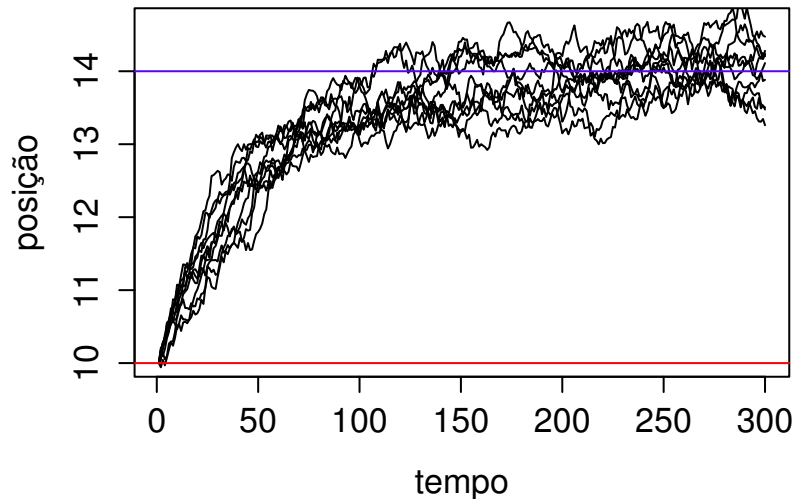


# Exemplos de métodos

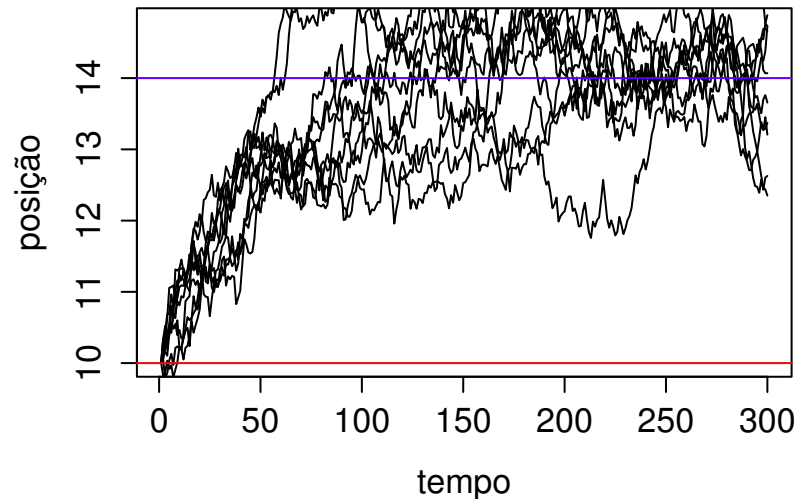
Valores maiores de  $\sigma$  inflam a variância da parte BM que faz parte do modelo OU.

A variância do trajeto é limitada pelo  $\alpha$ , pois a força de seleção é impede o desvio do valor ótimo.

**sigma = 0.08**



**sigma = 0.16**



# Exemplos de métodos

Dois parâmetros controlam a variância do processo em relação ao valor ótimo. Diferentes combinações podem mostrar padrões semelhantes:

↑  $\alpha$     ↑  $\sigma$

**Baixa** variância no ótimo.

↑  $\alpha$     ↓  $\sigma$

**Baixa** variância no ótimo.

↓  $\alpha$     ↑  $\sigma$

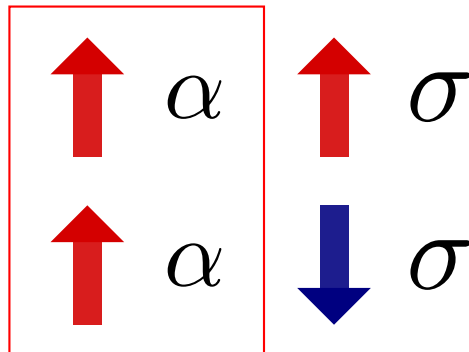
**Alta** variância no ótimo.

↓  $\alpha$     ↓  $\sigma$

**Baixa** variância no ótimo.

# Exemplos de métodos

Podemos diferenciar entre estes diferentes cenários?



Altos valores de  $\alpha$  erodem o sinal filogenético, pois a atração para o valor de ótimo produz forte convergências.



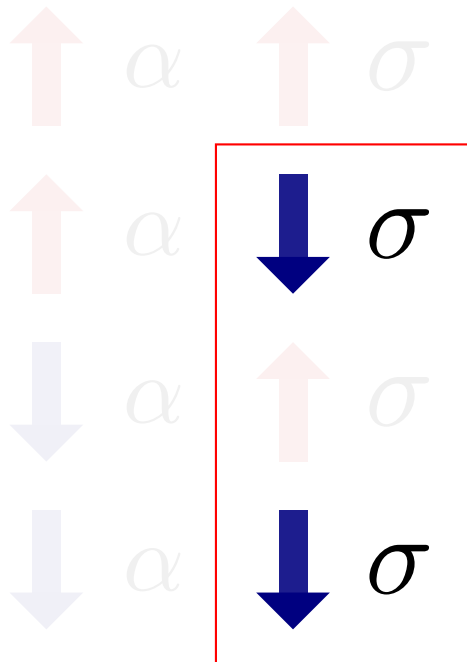
Alta variância no ótimo.



Baixa variância no ótimo.

# Exemplos de métodos

Podemos diferenciar entre estes diferentes cenários?



Baixa variância no ótimo.

Baixa variância no ótimo.

Baixa taxa ( $\sigma^2$ ) produz menor variância mas não erode o sinal filogenético.

Baixa variância no ótimo.

# Exemplos de métodos

Agora vamos explorar o modelo **BM** e **OU** no



Próximo passo será o tão esperado método de **MCMC** !!

