

Estimação em modelos lineares generalizados geoestatísticos por máxima verossimilhança baseada na aproximação de Laplace

Caio Gomes Alves

Orientador: Prof. Dr. Paulo Justiniano Ribeiro Júnior

Sumário I

- 1 Geoestatística
- 2 Implementação Computacional
- 3 Aplicação a Dados Reais
- 4 Estudo de Simulação
- 5 Considerações Finais
- 6 Referências

Geoestatística

Cada observação y_i é dada como uma realização parcial de um processo espacial contínuo não observado, denotado $S(x)$, nos pontos amostrais x_i .

Modelagem Geoestatística

Usualmente, considera-se que esse processo seja estocástico, com distribuição Normal, condicional em $S(x)$.

O objetivo principal da modelagem geoestatística é recuperar $S(x)$, para ser possível fazer predição (em pontos não amostrados) e estimação (médias, medianas, tendências espaciais) (Cressie 1993).

Os modelos geoestatísticos podem ser classificados como modelos de efeitos aleatórios, com alguma estrutura de dependência espacial entre eles (Isaaks e Srivastava 1989).

Modelos Lineares Generalizados Geoestatísticos

Em muitos casos, a distribuição das observações de um processo geoestatístico não possuem respostas gaussianas, como contagens e proporções.

Quando isso ocorre, usamos o seguinte modelo hierárquico para denotar os modelos lineares generalizados geoestatísticos:

$$\begin{aligned} [Y(x)|S(x)] &\sim f(\cdot; \mu(x), \psi) \\ g(\mu(x)) &= D\beta + S(x) \\ S(x) &= \sigma U(x; \phi) + \tau Z \end{aligned} \tag{1}$$

Modelos Lineares Generalizados Geoestatísticos

Os efeitos aleatórios espacialmente correlacionados são dados por $\sigma U(x; \phi)$, onde σ^2 (*sill*) denota a variância dos efeitos aleatórios e $U(x; \phi)$ é a variância unitária de um Campo Gaussiano Aleatório, com função de correlação $\rho(u, \phi)$.

Os efeitos aleatórios não correlacionados são dados por $\tau Z \sim N(0, \tau^2 I)$, onde τ^2 (*nugget*) representa as variações não espaciais e de micro escala no modelo.

Um dos principais objetivos da Geoestatística é estimar o vetor $\theta = (\beta, \sigma^2, \tau^2, \phi, \psi)$. Em *Model-based Geostatistics* (Diggle e Ribeiro Jr. 2007) é proposta uma abordagem baseada na maximização da log-verossimilhança dos modelos.

Verossimilhança marginal

A aplicação de métodos baseados em verossimilhança a modelos geoestatísticos para dados não-gaussianos é complicada e possui dificuldades computacionais, que surgem devido à alta dimensionalidade do vetor de efeitos aleatórios

$$S(x) = \{S(x_1), S(x_2), \dots, S(x_n)\}.$$

A maximização da verossimilhança marginal do modelo é obtida integrando os efeitos aleatórios da distribuição conjunta, definida na Equação 1, como segue:

$$L_p(\theta; y(x)) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y(x)|S(x))f(S(x))dS(x) \quad (2)$$

Verossimilhança Marginal

Exceto nos casos em que a distribuição de $f(y(x)|S(x))$ seja gaussiana, essa verossimilhança marginal é analiticamente intratável, por se tratar do produto de duas distribuições diferentes.

Como os valores do vetor $S(x)$ são correlacionados, a integral da Equação 2 possui tantas dimensões quanto observações na amostra coletada. Assim, métodos de integração numérica convencionais (Gauss-Hermite, quadratura gaussiana) não são computacionalmente viáveis.

Métodos Bayesianos

Outros métodos para aproximar a Equação 2 foram propostos, e os mais prevalentes são os baseados em integração de Monte Carlo (Geyer e Thompson (1992), Geyer (1994) e Zhang (2002)).

Ole F. Christensen (2004) descreve uma metodologia baseada em aproximações por algoritmo MCMC para simular da distribuição condicional de $S(x)$. Apesar de bem desenvolvidos, esses métodos são computacionalmente intensivos, lentos na estimação e precisam ter a convergência monitorada.

Aproximação de Laplace

Em *Practical likelihood analysis for spatial generalized linear mixed models* (Bonat e Ribeiro Jr (2016)) é proposta uma abordagem baseada na aproximação de Laplace (Tierney e Kadane (1986)), normalmente utilizada para análise de dados longitudinais.

O método é utilizado para aproximar integrais da seguinte forma:

$$\int_{\mathbb{R}^n} \exp(\varrho(u)) du \approx (2\pi)^{n/2} |-\varrho''(\hat{u})|^{-1/2} \exp(\varrho(\hat{u})) \quad (3)$$

Em que $\varrho(u)$ é uma função unimodal e limitada de uma variável u n -dimensional.

Aproximação de Laplace

Assumindo que a distribuição $f(y(x)|S(x))$ seja da família exponencial, podendo ser escrita da seguinte forma:

$$f(y(x)|S(x); \beta) = \exp\{y(x)^\top (D\beta + S(x)) - 1^\top b(D\beta + S(x)) + 1^\top c(y(x))\} \quad (4)$$

E considerando a distribuição Normal Multivariada, definida como:

$$f(S(x); \Sigma) = (2\pi)^{-n/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} S(x)^\top \Sigma^{-1} S(x)\right\} \quad (5)$$

Podemos ver que a Equação 3 é o produto das Equação 4 e Equação 5.

Aproximação de Laplace

Assim, temos que a aproximação de Laplace para a log-verossimilhança do modelo é dada por:

$$\begin{aligned}
 l(\theta; y(x)) = & \frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log |\text{diag} \{b''(D\beta + \hat{s}(\theta))\} + \Sigma^{-1}| + \\
 & y(x)^\top (D\beta + \hat{s}(\theta)) - 1^\top b(D\beta + \hat{s}(\theta)) + \\
 & 1^\top c(y(x)) - \frac{n}{2} \log(2\pi) - \\
 & \frac{1}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} \hat{s}(\theta)^\top \Sigma^{-1} \hat{s}(\theta)
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

Otimização

A otimização da Equação 6 é realizada com o modelo parametrizado como $\theta = (\beta, \log(\sigma^2), \log(\phi), \log(\tau^2), \log(\psi))$, e sendo $\hat{\theta}$ o estimador de máxima verossimilhança de θ , o mesmo tem distribuição assintótica dada por:

$$\hat{\theta} \sim N(\theta, I_O^{-1}(\hat{\theta})) \quad (7)$$

Com $I_O^{-1}(\hat{\theta})$ denotando a matriz de informação observada de θ .

Section 2

Implementação Computacional

Implementação Inicial

Junto ao artigo *Practical likelihood analysis for spatial generalized linear mixed models*, os autores disponibilizaram o código em R utilizado para ajuste de modelos lineares generalizados geoestatísticos por meio da aproximação de Laplace.

O objetivo deste trabalho é a otimização do código proposto, e posterior análise de duas bases de dados reais e um estudo de simulação, utilizando as funções criadas.

Maximização

Para montar a matriz de covariância espacial Σ dos dados (Equação 1), foi criada a função `monta.sigma`, que utiliza a função `geoR::varcov.spatial` (Ribeiro Jr et al. (2024)).

Para a maximização da Equação 3 foi implementada a função `newton.raphson`, que se utiliza das funções auxiliares `Q.b`, `Q.b.grad` e `Q.b.hess`, que representam $\varrho(S(x))$, $\varrho'(S(x))$ e $\varrho''(S(x))$, respectivamente.

Avaliação da Log-Verossimilhança

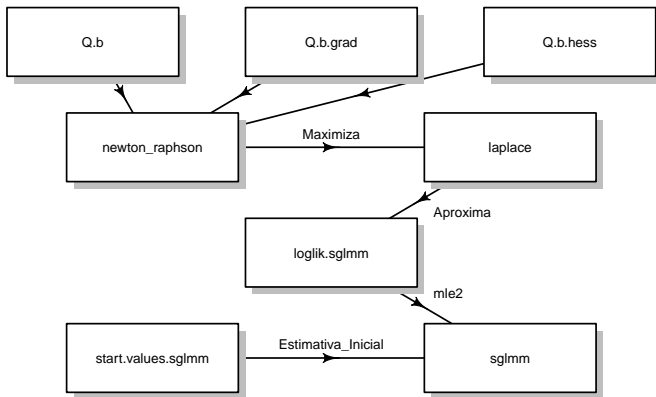
A avaliação da log-verossimilhança do modelo é feita usando a função `loglik.sglm`, que retorna o negativo da matriz de informação observada e as estimativas dos parâmetros.

Por dentro, a função `loglik.sglm` chama a função `laplace`, que retorna a aproximação a partir dos parâmetros informados. Para que a aproximação seja eficiente, é necessário que a estimativa inicial seja suficientemente boa, por isso foi implementada a função `start.values.sglm` para estimar θ inicial, a partir de uma heurística fornecida pelos autores.

Otimização da Log-Verossimilhança

A etapa de otimização é feita pela função `bbmle::lme2` (Bolker e R Development Core Team (2023)), que faz a otimização numérica da função `loglik.sglm`, utilizando as funções denotadas anteriormente. Tudo isso é feito dentro da função `sglm`, que retorna uma lista com os valores de $\hat{\theta}$, os valores preditos para os efeitos aleatórios de cada ponto amostral, e o modelo maximizado (um objeto `mle2`).

Diagrama



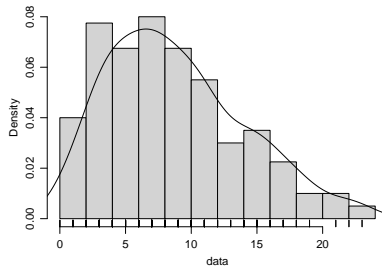
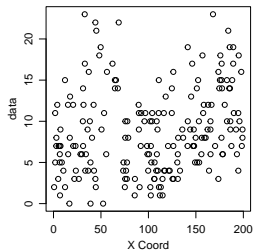
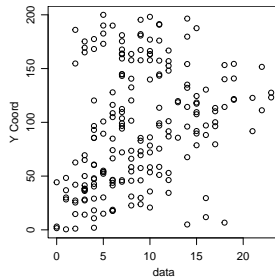
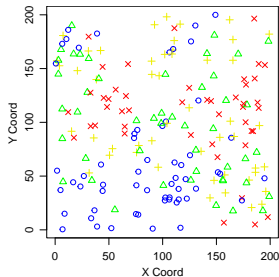
Exemplo de Ajuste

Considere o objeto `sim_df`, que foi simulado de um processo geoestatístico de Poisson, com `x1` e `x2` sendo as coordenadas dos pontos amostrais, e `y` sendo a variável de contagem. As primeiras dez linhas de `sim_df` são:

```
head(sim_df, 5)
```

| | x1 | x2 | y |
|---|-----------|-----------|----|
| 1 | 75.73466 | 72.02277 | 10 |
| 2 | 199.10033 | 31.01889 | 8 |
| 3 | 85.55225 | 36.85684 | 1 |
| 4 | 10.43933 | 177.45267 | 4 |
| 5 | 73.45251 | 85.40662 | 4 |

Exemplo de Ajuste



Exemplo de Ajuste

As estimativas iniciais para os parâmetros são obtidas pela função `start.values.sglm`, conforme segue:

```
# Valores iniciais para theta:
(inicial_simul <- start.values.sglm(
  y ~ 1,
  family="poisson",
  data = sim_df,
  coords = sim_df[, 1:2],
  nugget = T,
  offset = rep(1, dim(sim_df)[1])
))
```

'log Lik.' -694.9307 (df=1)

| (Intercept) | logsigma | logphi | logtau |
|-------------|------------|-----------|------------|
| 2.1815468 | -0.9605237 | 3.2769167 | -3.2631087 |

Exemplo de Ajuste

O modelo então é ajustado pela função `sglmm`, que retorna na posição 9 o modelo estimado:

```
# Ajuste do modelo:
```

```
fit_sglmm <- sglmm(  
  y ~ 1, cov.model = "matern", kappa = 2,  
  inits = inicial_simul, data = sim_df,  
  coords = sim_df[, 1:2], nugget = T,  
  family = "poisson"  
)
```

```
# Estimativas pontuais dos parâmetros:
```

```
coef(fit_sglmm[[9]])
```

| (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-------------|------------|-----------|------------|
| 1.9146920 | -0.9796929 | 3.5930527 | -2.9794818 |

Section 3

Aplicação a Dados Reais

Base de Dados Weed

A base de dados Weed, disponibilizada no pacote geoCount, consiste na contagem de ervas daninhas em uma plantação da fazenda Bjertorp, no sudoeste da Suécia. Os dados possuem as coordenadas (x_1 para L-O e x_2 para N-S), a contagem exata de ervas daninhas naquele ponto amostral, e a estimativa da contagem, obtida por meio de um software de detecção de imagens.

Base de Dados Weed

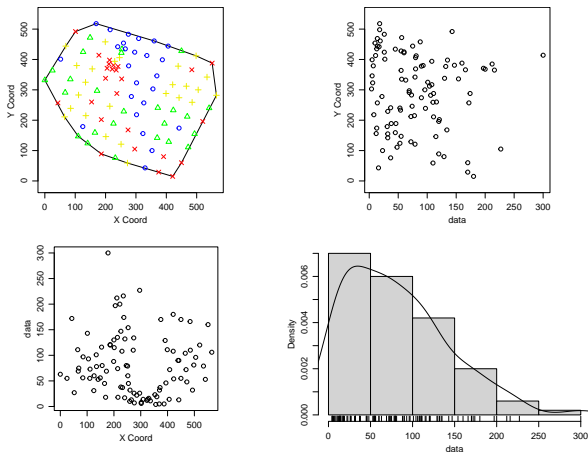


Figura 1: Gráfico da base Weed

Ajuste Inicial

Foi realizado o ajuste utilizando a função `sglmm`, considerando a distribuição de Poisson para a resposta, com diferentes funções de covariância espacial, para verificar qual melhor ajusta os dados.

Tabela

| Modelo | $\hat{\beta}_0$ | $\log(\hat{\sigma}^2)$ | $\log(\hat{\phi})$ | $\log(\hat{\tau}^2)$ | logLik |
|-------------------------------------|-----------------|------------------------|--------------------|----------------------|-----------|
| Exponencial + τ^2 | 4.0687 | -0.0859 | 4.2546 | -8.4476 | -518.6567 |
| Matèrn($\kappa = 1$) + τ^2 | 4.0415 | -0.1347 | 3.6391 | -3.5915 | -518.1001 |
| Matèrn($\kappa = 1.5$) + τ^2 | 4.0336 | -0.1838 | 3.3540 | -2.8767 | -518.2936 |
| Matèrn($\kappa = 2$) + τ^2 | 4.0297 | -0.2172 | 3.1676 | -2.5945 | -518.5377 |
| Esférico + τ^2 | 4.1464 | 0.8799 | 5.9958 | -2.9536 | -521.6954 |
| Exponencial | 4.0686 | -0.0856 | 4.2548 | - | -518.6550 |
| Matèrn($\kappa = 1$) | 4.0375 | -0.1082 | 3.5835 | - | -518.2112 |
| Matèrn($\kappa = 1.5$) | 4.0258 | -0.1281 | 3.2410 | - | -518.8948 |
| Matèrn($\kappa = 2$) | 4.0204 | -0.1421 | 3.0185 | - | -519.6152 |
| Esférico | 4.0260 | 0.1513 | 5.1439 | - | -518.4223 |

Tabela 1: Estimativas dos parâmetros

Anova

```
anova(fit_weed_1[[9]],  
      fit_weed_1_2[[9]])
```

Likelihood Ratio Tests

Model 1: fit_weed_1[[9]], [loglik.sglm]: (Intercept)+logsg
logtau2

Model 2: fit_weed_1_2[[9]], [loglik.sglm]: (Intercept)+log
Tot Df Deviance Chisq Df Pr(>Chisq)

1 4 1036.2

2 3 1036.4 0.2221 1 0.6374

Perfis de Verossimilhança

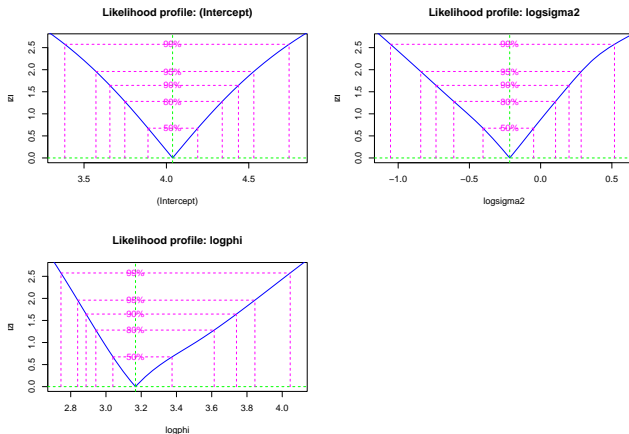


Figura 2: Perfis de Verossimilhança

Ajuste Incorporando Coordenadas

Apesar de não apresentar indícios de tendência espacial para as coordenadas, podemos incluí-las no modelo, para verificar se os efeitos estimados são significativos. De forma similar ao caso anterior, vários modelos foram ajustados, considerando diferentes funções de covariância espacial.

Tabela

| Modelo | $\hat{\beta}_0$ | $\hat{\beta}_1$ | $\hat{\beta}_2$ | $\log(\hat{\sigma}^2)$ | $\log(\hat{\phi})$ | $\log(\hat{\tau}^2)$ | logLik |
|-------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------------|--------------------|----------------------|-----------|
| $\kappa = 1 + \tau^2$ | 4.6360 | -0.0003 | -0.0018 | -0.1897 | 3.5880 | -3.7022 | -517.3814 |
| $\kappa = 1.5 + \tau^2$ | 4.6358 | -0.0004 | -0.0018 | -0.2342 | 3.3081 | -2.9736 | -517.5264 |
| $\kappa = 2 + \tau^2$ | 4.6378 | -0.0004 | -0.0017 | -0.2614 | 3.1184 | -2.7337 | -517.7336 |
| Exponencial + τ^2 | 4.6271 | -0.0001 | -0.0019 | -0.1494 | 4.1786 | -7.272 | -517.9993 |
| Esférico + τ^2 | 4.5737 | -0.0002 | -0.0017 | -0.1960 | 5.1375 | -2.2709 | -517.4351 |
| $\kappa = 1$ | 4.6343 | -0.0004 | -0.0018 | -0.1632 | 3.5392 | - | -517.4677 |
| $\kappa = 1.5$ | 4.6467 | -0.0005 | -0.0018 | -0.1807 | 3.2052 | - | -518.0529 |
| $\kappa = 2$ | 4.6430 | -0.0005 | -0.0017 | -0.1926 | 2.9874 | - | -518.6964 |
| Exponencial | 4.6265 | -0.0001 | -0.0019 | -0.1489 | 4.1792 | - | -517.9937 |
| Esférico | 4.5521 | -0.0002 | -0.0017 | 0.1382 | 5.1413 | - | -517.9959 |

Tabela 2: Estimativas dos parâmetros

Perfis de Verossimilhança

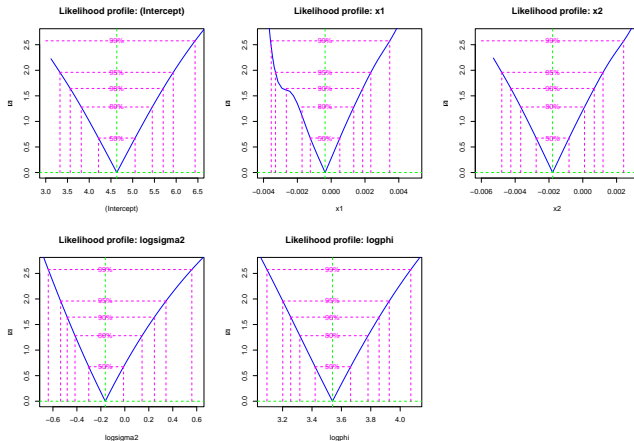


Figura 3: Perfis de Verossimilhança

Predição Espacial

Com os valores estimados pelos parâmetros, podemos realizar a predição dos valores estimados pelo modelo (considerando o com função de covariância Matèrn, $\kappa = 1$ e $\tau^2 = 0$) em pontos não amostrados.

A abordagem utilizada para a krigagem será utilizando as funções `geoR::krige.control`, `output.control` e `krige.conv`, e pode ser vista com mais detalhes em (Diggle e Ribeiro Jr. 2007).

Predição Espacial

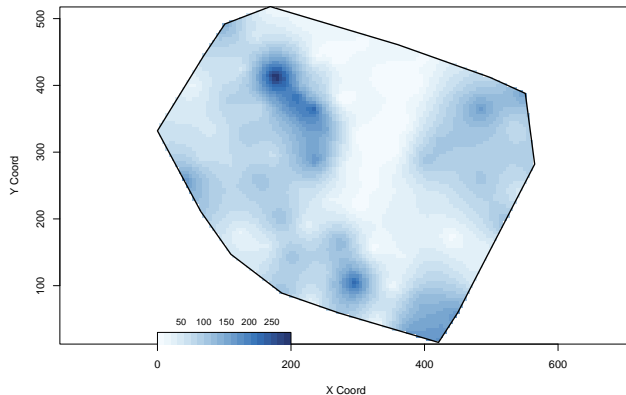


Figura 4: Predição para os dados Weed

Base de Dados SPT

A base de dados SPT foi disponibilizada pelo aluno de mestrado em Geotecnia pela UFPR, Lucas Michael Luzzi, e consiste na sondagem SPT em pontos amostrais do Aeroporto Internacional Afonso Pena. Os valores da variável resposta são a quantidade de marteladas necessárias para compactar o solo em uma certa quantidade.

A base possui 15 camadas amostrais, com profundidades crescentes. 2 delas foram escolhidas para ajustar os modelos e compará-los.

Base de Dados SPT

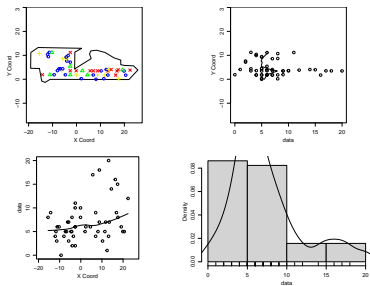


Figura 5: Profundidade 4 metros

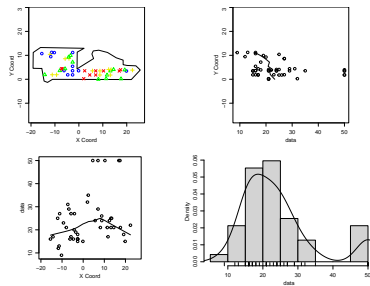


Figura 6: Profundidade 13 metros

Boxplot

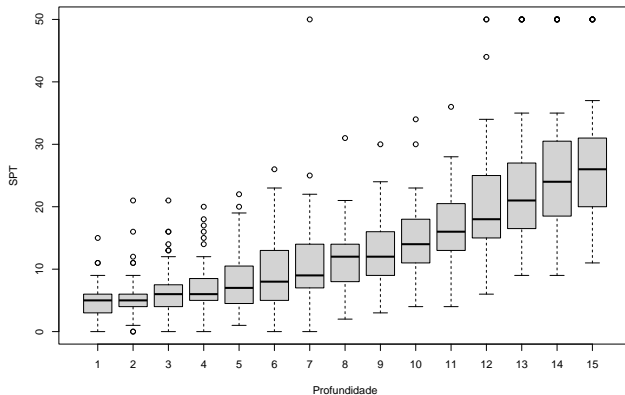


Figura 7: Boxplot de SPT pela profundidade

Ajustes Profundidade 4 Metros

| Modelo | $\hat{\beta}_0$ | $\log(\hat{\sigma}^2)$ | $\log(\hat{\phi})$ | logLik |
|--------------------------|-----------------|------------------------|--------------------|-----------|
| Exponencial | 1.8655 | -1.6576 | -1.4194 | -139.9930 |
| Matèrn($\kappa = 1$) | 1.8654 | -1.6574 | -1.7209 | -139.9898 |
| Matèrn($\kappa = 1.5$) | 1.8653 | -1.6574 | -1.8687 | -139.9872 |
| Matèrn($\kappa = 2$) | 1.8656 | -1.6574 | -3.2607 | -140.0011 |
| Esférico | 1.8639 | -1.6562 | -0.0246 | -139.9393 |

Tabela 3: Estimativas para profundidade 4 metros

Ajustes Profundidade 13 Metros

| Modelo | (Intercept) | logsigma2 | logphi | LogLik |
|--------------------------|-------------|-----------|---------|-----------|
| Exponencial | 3.0828 | -2.1232 | 0.7264 | -165.1396 |
| Matèrn($\kappa = 1$) | 3.0868 | -2.1145 | 0.2089 | -164.8328 |
| Matèrn($\kappa = 1.5$) | 3.0902 | -2.1128 | -0.0747 | -164.7751 |
| Matèrn($\kappa = 2$) | 3.0925 | -2.1126 | -0.2666 | -164.7747 |
| Esférico | 3.0884 | -2.0803 | 1.6073 | -165.2236 |

Tabela 4: Estimativas para profundidade 13 metros

Perfis de Verossimilhança

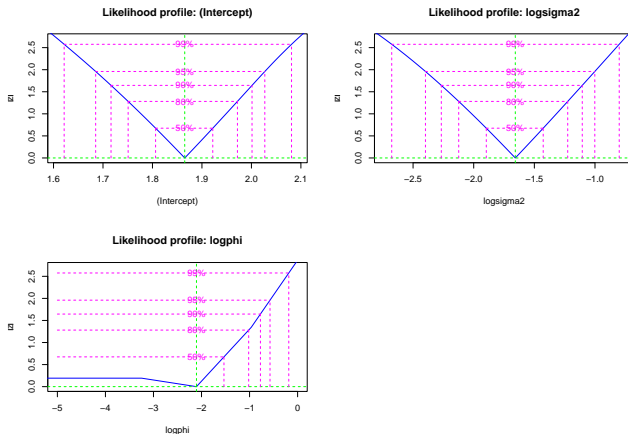


Figura 8: Perfis de Verossimilhança para $Z = 4$

Perfis de Verossimilhança

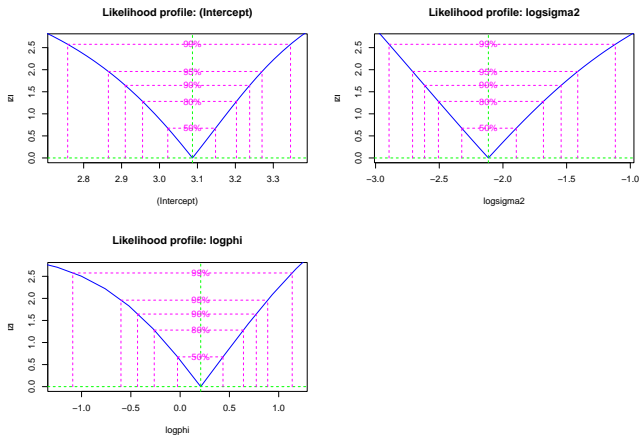


Figura 9: Perfis de Verossimilhança para $Z = 13$

Predição Espacial

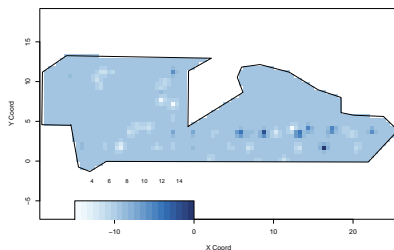


Figura 10: Profundidade 4 metros

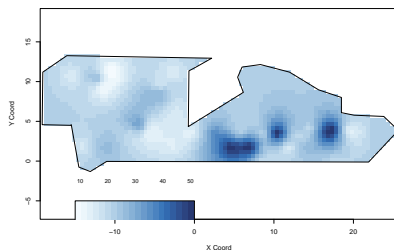


Figura 11: Profundidade 13 metros

Section 4

Estudo de Simulação

Estudo de Simulação

Por fim, será realizado um estudo de simulação, para verificar propriedades para os estimadores obtidos pela função `sglmm`. Foi criada a função `simulation_function`, que segue o seguinte esquema: uma *seed* para reprodução é definida, gera-se uma amostra de tamanho n usando a função `geoR::grf`, utilizando os parâmetros $\theta = (\beta_0 = 2, \sigma^2 = 0.5, \phi = 30, \tau^2 = 0.05)$, com função de covariância espacial exponencial, em posições de uma malha irregular de 200×200 .

As amostras y_i (geradas de um campo aleatório gaussiano não condicional) são usados para simular valores de uma Poisson, com $\lambda_i = y_i$.

Diferentes Tamanhos Amostrais

Para explorar o comportamento do estimador para diferentes tamanhos amostrais, foram geradas 100 repetições de amostras com $n = 50, 100, 200$ valores.

A partir dos valores simulados, podemos ver como se comportam a média e o erro quadrático médio dos estimadores, bem como sua variância e seu viés.

Diferentes Tamanhos Amostrais

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-----------|-------------|-----------|--------|---------|
| $n = 50$ | 2.0445 | -1.1534 | 3.5340 | -6.2878 |
| $n = 100$ | 2.0750 | -1.0385 | 3.9488 | -4.7257 |
| $n = 200$ | 1.9696 | -0.9616 | 3.9306 | -4.0778 |

Figura 12: Média dos estimadores

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-----------|-------------|-----------|--------|---------|
| $n = 50$ | 0.1808 | 0.4694 | 1.4915 | 19.9334 |
| $n = 100$ | 0.1449 | 0.4418 | 0.6122 | 11.2527 |
| $n = 200$ | 0.1093 | 0.2861 | 0.4882 | 5.8837 |

Figura 13: Erro Quadrático Médio dos estimadores

Diferentes Tamanhos Amostrais

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-----------|-------------|-----------|--------|---------|
| $n = 50$ | 0.1806 | 0.2602 | 0.8866 | 9.1874 |
| $n = 100$ | 0.1406 | 0.3258 | 0.4810 | 8.3434 |
| $n = 200$ | 0.1095 | 0.2162 | 0.3419 | 4.7605 |

Figura 14: Variância dos estimadores

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-----------|-------------|-----------|--------|---------|
| $n = 50$ | 0.0002 | 0.2092 | 0.6049 | 10.7460 |
| $n = 100$ | 0.0042 | 0.1160 | 0.1311 | 2.9093 |
| $n = 200$ | -0.0002 | 0.0699 | 0.1463 | 1.1232 |

Figura 15: Viés dos estimadores

Especificação Incorreta da Função de Covariância Espacial

Foram comparados os resultados anteriores com os estimadores gerados utilizando as funções de covariância espacial Matèrn (com $\kappa = 1, 2$) e Esférica. Em todos os casos, o tamanho da amostra é de $n = 100$, e os parâmetros usados para geração são os especificados anteriormente.

Especificação Incorreta da Função de Covariância Espacial

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|----------------------|-------------|-----------|--------|---------|
| Exponencial | 2.0750 | -1.0385 | 3.9488 | -4.7257 |
| Esférica | 2.0726 | -1.1012 | 4.6881 | -3.6271 |
| Matèrn, $\kappa = 1$ | 2.0760 | -1.1247 | 3.4352 | -3.2753 |
| Matèrn, $\kappa = 2$ | 2.0752 | -1.1973 | 2.9698 | -2.8384 |

Figura 16: Média dos estimadores

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|----------------------|-------------|-----------|--------|---------|
| Exponencial | 0.1449 | 0.4418 | 0.6122 | 11.2527 |
| Esférica | 0.1482 | 0.4951 | 0.4586 | 4.7508 |
| Matèrn, $\kappa = 1$ | 0.1457 | 0.5300 | 1.1587 | 3.8064 |
| Matèrn, $\kappa = 2$ | 0.1447 | 0.5801 | 2.1222 | 2.1448 |

Figura 17: Erro Quadrático Médio dos estimadores

Especificação Incorreta da Função de Covariância Espacial

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|----------------------|-------------|-----------|--------|---------|
| Exponencial | 0.1406 | 0.3258 | 0.4810 | 8.3434 |
| Esférica | 0.1444 | 0.3319 | 0.3245 | 4.3961 |
| Matèrn, $\kappa = 1$ | 0.1413 | 0.3472 | 0.3842 | 3.7659 |
| Matèrn, $\kappa = 2$ | 0.1405 | 0.3292 | 0.3091 | 2.1415 |

Figura 18: Variância dos estimadores

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|----------------------|-------------|-----------|--------|---------|
| Exponencial | 0.0042 | 0.1160 | 0.1311 | 2.9093 |
| Esférica | 0.0038 | 0.1632 | 0.1341 | 0.3547 |
| Matèrn, $\kappa = 1$ | 0.0044 | 0.1828 | 0.7745 | 0.0405 |
| Matèrn, $\kappa = 2$ | 0.0042 | 0.2509 | 1.8132 | 0.0034 |

Figura 19: Viés dos estimadores

Diferentes Regiões Amostrais

Por fim, foi verificado o comportamento dos estimadores quando aumentamos e diminuimos a região da qual a amostra é coletada. Foram simulados em uma malha menor (50×50 , com dados mais “densos”) e uma maior (500×500 , com dados mais “esparsos”), para conferir o comportamento dos estimadores.

Diferentes Regiões Amostrais

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-----------|-------------|-----------|--------|---------|
| 50 × 50 | 2.0931 | -1.7802 | 2.7482 | -4.6425 |
| 100 × 100 | 2.0750 | -1.0385 | 3.9488 | -4.7257 |
| 200 × 200 | 2.0381 | -0.9060 | 4.1668 | -4.8777 |

Figura 20: Média dos estimadores

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|-----------|-------------|-----------|--------|---------|
| 50 × 50 | 0.3645 | 1.6704 | 3.7563 | 8.3343 |
| 100 × 100 | 0.1449 | 0.4418 | 0.6122 | 11.2527 |
| 200 × 200 | 0.0522 | 0.2557 | 0.4888 | 12.5154 |

Figura 21: Erro Quadrático Médio dos estimadores

Diferentes Regiões Amostrais

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|------------------|-------------|-----------|--------|---------|
| 50×50 | 0.3594 | 0.4936 | 1.3068 | 5.6792 |
| 100×100 | 0.1406 | 0.3258 | 0.4810 | 8.3434 |
| 200×200 | 0.0512 | 0.2125 | 0.4708 | 9.0643 |

Figura 22: Variância dos estimadores

| | (Intercept) | logsigma2 | logphi | logtau2 |
|------------------|-------------|-----------|--------|---------|
| 50×50 | 0.0051 | 1.1768 | 2.4495 | 2.6551 |
| 100×100 | 0.0042 | 0.1160 | 0.1311 | 2.9093 |
| 200×200 | 0.0009 | 0.0432 | 0.0180 | 3.4511 |

Figura 23: Viés dos estimadores

Section 5

Considerações Finais

Considerações Finais

Como visto, os estimadores obtidos por meio da aproximação de Laplace possuem propriedades estatísticas ótimas, como o não-viés assintótico e ser erro quadrático médio consistente, além de vantagens computacionais sobre os ajustes baseados no paradigma bayesiano.

Ainda que seja computacionalmente intensivo, o ajuste é obtido por uma maximização de alta dimensionalidade, que pode ser resolvida por diversas heurísticas além das apresentadas neste trabalho.

Considerações Finais

O ajuste às bases de dados reais foi satisfatória, sendo possível comparar os diferentes modelos ajustados de maneira direta, por meio do valor retornado pela log-verossimilhança, e pelo teste de razão de verossimilhança para considerar a inclusão de variáveis no modelo.

Section 6

Referências

Referências I

- Banerjee, Sudipto, Bradley P. Carlin, e Alan E. Gelfand. 2004. *Hierarchical modeling and analysis for spatial data*. Monographs on statistics e applied probability 101. Boca Raton, Fla: Chapman & Hall/CRC.
- Bates, Douglas, Martin Mächler, Ben Bolker, e Steve Walker. 2015. «Fitting Linear Mixed-Effects Models Using lme4». *Journal of Statistical Software* 67 (1): 1–48.
<https://doi.org/10.18637/jss.v067.i01>.
- Bolker, Ben, e R Development Core Team. 2023. *bbmle: Tools for General Maximum Likelihood Estimation*.
<https://CRAN.R-project.org/package=bbmle>.
- Bonat, Wagner Hugo, e Paulo Justiniano Ribeiro Jr. 2016. «Practical likelihood analysis for spatial generalized linear mixed models». *Environmetrics* 27 (2): 83–89.
<https://doi.org/10.1002/env.2375>.

Referências II

- Breslow, N. E., e D. G. Clayton. 1993. «Approximate Inference in Generalized Linear Mixed Models». *Journal of the American Statistical Association* 88 (421): 9–25.
<https://doi.org/10.1080/01621459.1993.10594284>.
- Casella, George, e Roger L. Berger. 2011. *Inferência estatística*. São Paulo: Cengage Learning.
- Christensen, O. F., e P. J. Ribeiro Jr. 2002. «geoRglm - a package for generalised linear spatial models». *R-NEWS* 2 (2): 26–28.
- Christensen, Ole F. 2004. «Monte Carlo Maximum Likelihood in Model-Based Geostatistics». *Journal of Computational and Graphical Statistics* 13 (3): 702–18.
<https://doi.org/10.1198/106186004X2525>.
- Corporation, Microsoft, e Steve Weston. 2022. *doParallel: Foreach Parallel Adaptor for the 'parallel' Package*.
<https://CRAN.R-project.org/package=doParallel>.

Referências III

- Cressie, Noel A. C. 1993. *Statistics for Spatial Data*. 1.^a ed. Wiley Series em Probability e Statistics. Wiley.
<https://doi.org/10.1002/9781119115151>.
- Diggle, Peter J., e Paulo J. Ribeiro Jr. 2007. *Model-based Geostatistics*. Springer series em statistics. Guildford Boulder: Springer London NetLibrary, Inc. [distribuidor].
- Geyer, Charles J. 1994. «On the Convergence of Monte Carlo Maximum Likelihood Calculations». *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology* 56 (1): 261–74. <https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1994.tb01976.x>.
- Geyer, Charles J., e Elizabeth A. Thompson. 1992. «Constrained Monte Carlo Maximum Likelihood for Dependent Data». *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology* 54 (3): 657–83.
<https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1992.tb01443.x>.

Referências IV

- Guillot, Gilles, Niklas Lorén, e Mats Rudemo. 2009. «Spatial Prediction of Weed Intensities From Exact Count Data and Image-Based Estimates». *Journal of the Royal Statistical Society Series C: Applied Statistics* 58 (4): 525–42.
<https://doi.org/10.1111/j.1467-9876.2009.00664.x>.
- Isaaks, Edward H., e R. Mohan Srivastava. 1989. *Applied geostatistics*. New York: Oxford University Press.
- Jing, Liang, e Victor) De Oliveira. 2015. «geoCount: An R Package for the Analysis of Geostatistical Count Data». *Journal of Statistical Software* 63 (11): 1–33.
<http://www.jstatsoft.org/v63/i11/>.
- Lee, Y., e J. A. Nelder. 1996. «Hierarchical Generalized Linear Models». *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology* 58 (4): 619–56.
<https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1996.tb02105.x>.

Referências V

- McCulloch, Charles E. 1997. «Maximum Likelihood Algorithms for Generalized Linear Mixed Models». *Journal of the American Statistical Association* 92 (437): 162–70.
<https://doi.org/10.1080/01621459.1997.10473613>.
- Pinheiro, José C., e Douglas M. Bates. 1995. «Approximations to the Log-Likelihood Function in the Nonlinear Mixed-Effects Model». *Journal of Computational and Graphical Statistics* 4 (1): 12–35.
- R Core Team. 2024. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing. <https://www.R-project.org/>.
- Ribeiro Jr, Paulo Justiniano, Peter Diggle, Ole Christensen, Martin Schlather, Roger Bivand, e Brian Ripley. 2024. *geoR: Analysis of Geostatistical Data*.
<https://CRAN.R-project.org/package=geoR>.

Referências VI

- Tierney, Luke, e Joseph B. Kadane. 1986. «Accurate Approximations for Posterior Moments and Marginal Densities». *Journal of the American Statistical Association* 81 (393): 82–86. <https://doi.org/10.1080/01621459.1986.10478240>.
- Venables, W. N., e B. D. Ripley. 2002. *Modern Applied Statistics with S*. Fourth. New York: Springer. <https://www.stats.ox.ac.uk/pub/MASS4/>.
- Zhang, Hao. 2002. «On Estimation and Prediction for Spatial Generalized Linear Mixed Models». *Biometrics* 58 (1): 129–36. <https://doi.org/10.1111/j.0006-341X.2002.00129.x>.