### Seleção de modelos



Prof. Marcus Vinícius Vieira – Instituto de Biologia UFRJ

# Seleção de modelos

 Como trabalhar e comparar hipóteses múltiplas ? (= diferentes modelos)

 Como medir a evidência a favor de uma hipótese em comparação com outra(s)?

### Verossimilhança Máxima

 Se a probabilidade de um evento x depende de parâmetros p de um modelo, escrevemos
 P ( x | p )

mas quando falamos de verossimilhança

(a verossimilhança dos parâmetros considerando o evento x)

### Probabilidade

Sabendo os parâmetros -> Previsão de resultado

### Verossimilhança

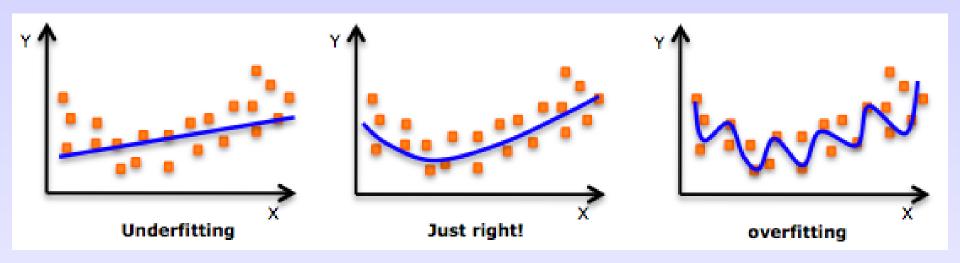
Observação de resultdo -> Estimativa de parâmetros

Prof. Marcus Vinícius Vieira – Instituto de Biologia UFRJ

### Verossimilhança Máxima

- Pode ser extendida para comparar hipóteses
- Princípio da verossimilhança (controverso)
   (Likelihood principle):
   "Toda a informação de uma amostra está contida em sua função de verossimilhança"
- Lei de verossimilhança (*Likelihood law*):
   "A razão entre verossimilhanças seria uma medida da *evidência* de uma hipótese em relação

a outra"



http://www.patheos.com/blogs/unequallyyoked/2011/11/how-do-you-pick-a-teacher.html

## Entropia de Boltzmann

- A entropia termodinâmica:
  - constante de proporcionalidade k (de Boltzman) multiplicada pelo logaritmo do número de microestados independentes (w) disponíveis ao sistema:

 $S = k \log (w)$ 

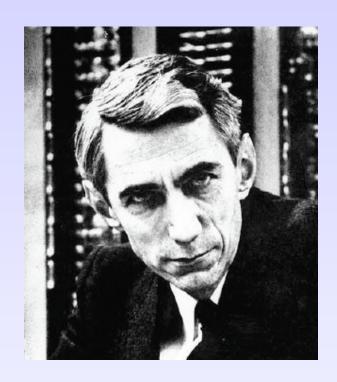
- Mede o grau de desorganização de um sistema.
- Quando a concentração de partículas é homogênea a desorganização e a entropia são máximas.
- Shannon utilizou o mesmo conceito para o grau de entropia "de informação" (H) a partir da fórmula termodinâmica de Boltzman (S).



Figure 1 - Boltzmann's Theorem Engraved on his Tomb in Vienna (1906)

## Entropia de Claude Shannon

- $H = \sum p_i \log p_i$
- Incerteza: quantidade de respostas possíveis que conhecemos, mas não sabemos qual delas é verdadeira
- Informação: redução da incerteza quando se obtém resposta a uma pergunta
- log p<sub>i</sub>: quanto menor p<sub>i</sub>, maior o valor
- Quanto mais raro for a probabilidade de uma categoria, mais a a incerteza será reduzida caso a categoria ocorra
- Ex. palavras que começam com z e palavras que começam com a



- Com uma moeda viciada, que sempre dá cara, quanta informação é necessária para prever o resultado?
- Nenhuma informação, já que o resultado é sempre o mesmo -> não há incerteza!
- Com uma moeda "justa", é preciso mais informação?
- Sim, mais informação já que os resultados têm igual probabilidade de ocorrência
- E uma moeda com algum viés?
- Qualquer moeda com algum viés exigirá menos informação

## Perda de Informação dos modelos

- A realidade em sua totalidade não pode ser medida devido à nossas limitações sensoriais
- Temos apenas modelos
- Um modelo da realidade é apenas uma aproximação desta realidade
- Quanta informação é perdida por esta aproximação representada no modelo?
- Distância de Kullback-Leibler

### Distância de Kullback-Leibler

- Suponha que a realidade seja f(x), isto é a probabilidade de x dada a realidade
- Podemos aproximar por g(x|p)
- Se (f,g) é a informação perdida nesta aproximação de f com g,
- $(f,g) \neq 0$  quase sempre
- (f,g) = 0 somente se f = g

$$I(f,g) = \int f(x) \log \left(\frac{f(x)}{g(x|p)}\right) dx$$

## Distância K-L para dados categóricos

- Com binomiais
- Suponha que a probabilidade real seja p<sub>1</sub> e p<sub>2</sub>
- As probabilidades segundo um modelo sejam  $\pi_1$  e  $\pi_2$

$$I(f,g) = \sum_{i=1}^{2} p_i \log \left(\frac{p_i}{\pi_i}\right) = p_1 \log \left(\frac{p_1}{\pi_1}\right) + p_2 \log \left(\frac{p_2}{\pi_2}\right)$$

$$I(f,g) = p_1 \log(p_1/\pi_1) + p_2 \log(p_2/\pi_2)$$

- Suponha que tenhamos estimativas perfeitas:
- $\pi_1 = p_1$
- $\pi_2 = p_2$

$$I(f,g) = p_1 \log(1) + p_2 \log(1) = p_1(0) + p_2(0) = 0$$

Suponha que p₁ e p₂ sejam ambos 0,20 maiores:

$$I(f,g) = p_1 \log(1/1.2) + p_2 \log(1/1.2) = \log(1/1.2)(p_1 + p_2) = \log(1/1.2)$$
  
= -0,1823

• E se forem 0,40 maiores:

$$I(f,g) = p_1 \log(1/1.4) + p_2 \log(1/1.4) = \log(1/1.4)$$
  
= -0,3365

- Informação e entropia são aditivas -> escala logarítmica
- Probabilidade é multiplicativa
- Se  $P_1 = 0.3$ ,  $P_2 = 0.2$

Assumindo que são independentes:  $P_1 * P_2 = 0.06$ 

### Em escala logarítimica:

$$Log(P_1) = -1,204$$

$$Log(P_2) = -1,609$$

$$e^{(-1,204 + -1,609)} = 0,06$$

# Mas não é possível conhecer a verdade!

- Verdade =  $p_1$ ,  $p_2$ , f(x)
- Não é preciso conhecê-la!
- Lembre-se:

$$\log(a/b) = \log(a) - \log(b)$$

$$I(f,g) = \sum_{i=1}^{2} p_{i} \log \left(\frac{p_{i}}{\pi_{i}}\right) = p_{1} \log \left(\frac{p_{1}}{\pi_{1}}\right) + p_{2} \log \left(\frac{p_{2}}{\pi_{2}}\right)$$

$$I(f,g) = p_{1} \log(p_{1}) - p_{1} \log(\pi_{1}) + p_{2} \log(p_{2}) - p_{2} \log(\pi_{2})$$

$$= \sum_{i} p_{i} \log(p_{i}) - \sum_{i} p_{i} \log(\pi_{i})$$

### A verdade é constante, modelos não

- Diferenças de I(f,g) entre modelos (g):
  - nos dizem o que precisamos: qual modelo mais se aproxima da realidade:

$$I(f, g_1) = \sum_{i} p_i \log(p_i) - \sum_{i} p_i \log(\pi_{i,1})$$

$$I(f, g_2) = \sum_{i} p_i \log(p_i) - \sum_{i} p_i \log(\pi_{i,2})$$

$$I(f, g_1) - I(f, g_2) = -\sum_{i} p_i \log(\pi_{i,1}) - \sum_{i} p_i \log(\pi_{i,2})$$

- A realidade pode ser cancelada então ...
- Não precisamos conhecê-la!





- Só precisamos das estimativas pi
- Hitsoguro Akaike (1971) demonstrou que a distância relativa à realidade (incomensurável),

### é proporcional:

- ao logaritmo da verossimilhança máxima do modelo
- subtraída de um valor proporcional ao número de parâmetros no modelo (K)

$$\sum_{i} p_{i} \log(\pi_{i}) \propto \log \left( \Pr(\text{data}|\hat{p}) \right) - K$$





Akaike definiu um critério de informação, AIC,
 "Akaike Information Criterion"

$$AIC = -2\log(\Pr(\operatorname{data}|\hat{p})) + 2K$$

- AIC estima a distância relativa de um modelo por
  - log (verossimilhança máxima)
- Valores menores indicam modelos mais próximos à realizadade, ou ...
- que têm menor perda de informação em relação a realidade

### **AICc**

- A demonstração de que AIC é uma medida relativa da distância à realidade vale somente para grandes quantidades de dados
- Quando existem muitos parâmetros a serem estimados em relação à quantidade de evidência (dados), AIC tem um viés
- Correção de "2a  $\mathrm{AIC}_c = \mathrm{AIC} + \frac{2K(K+1)}{n-K-1}$
- n = número de observações (dados)
- Conforme n aumente, AICc -> AIC

# Seleção de modelos na prática



- (1) Defina o conjunto de modelos a serem comparados
- (2) Obtenha estimativas de ajuste de cada um aos dados através de verossimilhança máxima
- (3) Calcule o AIC ou AICc de cada um
- (4) Calcule o ajuste relativo:  $\Delta_i = AIC_i AIC_{min}$

# Seleção de modelos na prática

• É possível converter valores do ajuste relativo ( $\Delta_i$ )em estimativas de verossimilhança do modelo considerando os dados:  $\Pr(g_i|\mathrm{data}) \propto \exp(-\frac{1}{2}\Delta_i)$ 

- Pr(g<sub>i</sub>|data) é a probabilidade que o modelo i é o melhor no conjunto de modelos comparado
- AIC presume que todos os modelos são "errados", não são a realidade
- Estas verossimilhanças relativas são mais fáceis de interpretar, mas não há um limiar de "significância" baseado na teoria da informação e de seleção de modelos.

# Seleção de modelos na prática

• Pesos de Akaike são bastante úteis:

$$w_i = \frac{\exp(-\frac{1}{2}\Delta_i)}{\sum_j \exp(-\frac{1}{2}\Delta_j)}$$

 w<sub>i</sub> varia de 0 a 1 e estima o peso de evidência a favor de um modelo i, considerando o conjunto de modelos comparado

 Pesos de Akaike podem ser usados para previsões baseadas na média dos modelos

# Scaling body mass and use of space in three species of marsupials in the Atlantic Forest of Brazil

#### MARCUS VINÍCIUS VIEIRA1\* AND ANDRÉ DE ALMEIDA CUNHA2

<sup>1</sup>Laboratório de Vertebrados, Departamento de Ecologia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CP 68020, Rio de Janeiro RJ, CEP 21941-590, (Email: mvvieira@biologia.ufrj.br, mvvieira@gmail.com), and <sup>2</sup>Pós-Graduação em Ecologia, Conservação e Manejo da Vida Silvestre, ICB, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brazil

As a measurement of area, and assuming a circular shape DHR would be proportional to the square of its linear distance

Hence proportional to the square of day range

$$DHR \approx DR^2$$

If Day range  $\approx M^{0.25}$  (Carbone *et al.* 2005), then

$$DHR \approx \left(M^{0.25}\right)^2 \approx M^{0.5}$$

### Los marsupiales



Didelphis aurita (ca. 1800 g)



Philander frenatus (ca. 400 g)

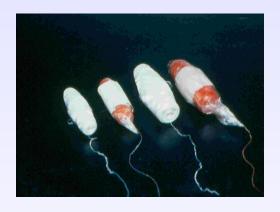


*Metachirus nudicaudatus* (ca. 450 g) *Prof. Marcus Vinícius Vieira – Instituto de Biologia UFRJ* 

### Métodos

 Gradeados de trampas y animales liberados con carretel de rastreo







Prof. Marcus Vinícius Vieira – Instituto de Biologia UFRJ

#### Vieira & Cunha (2008)

**Table 1.** Performance of models predicting daily home range (DHR) and its intensity of use (IU) of individuals of three species of didelphid marsupials.

|     | Model | Variables                            | d.f. | K | AICc    | $\Delta_i$ | $w_i$ |
|-----|-------|--------------------------------------|------|---|---------|------------|-------|
|     |       |                                      |      |   |         |            |       |
| DHR | 1     | Thread + Body mass                   | 2    | 4 | 185.229 | 0.000      | 0.501 |
|     | 2     | Thread + Body mass + Species         | 4    | 5 | 186.544 | 1.315      | 0.260 |
|     | 3     | Thread + Species                     | 3    | 4 | 188.290 | 3.061      | 0.109 |
|     | 4     | Thread + Body mass + Species + 2*3   | 6    | 6 | 190.686 | 5.457      | 0.033 |
|     | 5     | Thread + Body mass + Species + 1*3   | 6    | 6 | 190.858 | 5.629      | 0.030 |
|     | 6     | Thread + Body mass + Species + 1*2*3 | 6    | 6 | 190.899 | 5.670      | 0.029 |
|     | 7     | Thread                               | 1    | 3 | 192.517 | 7.288      | 0.013 |
| IU  | 1     | Thread + Body mass                   | 2    | 4 | 82.643  | 0.000      | 0.501 |
|     | 2     | Thread + Body mass + Species         | 4    | 5 | 83.958  | 1.315      | 0.260 |
|     | 3     | Thread + Species                     | 3    | 4 | 85.704  | 3.061      | 0.109 |
|     | 4     | Thread + Body mass + Species + 2*3   | 6    | 6 | 88.100  | 5.457      | 0.033 |
|     | 5     | Thread + Body mass + Species + 1*3   | 6    | 6 | 88.272  | 5.629      | 0.030 |
|     | 6     | Thread + Body mass + Species + 1*2*3 | 6    | 6 | 88.313  | 5.670      | 0.029 |
|     | 7     | Thread                               | 1    | 3 | 89.931  | 7.288      | 0.013 |

K is number of parameters of the model, AICc is the Akaike Information Criteria corrected for small samples,  $\Delta_i$  is the difference in AICc between the given model and the best model, and  $w_i$  is the Akaike weight, the relative likelihood of a model given the data and the set of models analyzed. Asterisks indicate interactions between variables, coded by numbers (Thread = 1, Body mass = 2, Species = 3).

# Cálculo de AIC na prática

Modelos lineares generalizados (Generalized linear models):

```
AIC = -2ln(verossimilhança) + 2K
-2ln(verossimilhança) = desviança
AICc = -2ln(verossimilhança) + 2K(K+1) / (n - K - 1)
K = número de parâmetros
AICc = AIC * (K + 1) / (n - K - 1)
```

Regressão por quadrados mínimos comum (Ordinary least squares regression)

```
AIC = n*ln(RSS/n) + 2K
onde n = número de observações (dados)
RSS = residual sum of squares = Soma dos Quadrados dos Resíduos
```

### Referências

- Burnham, K.P., & D. R. Anderson. 2002. Model selection and multimodel inference: A practical information-theoretic approach, 2nd ed (Caps. 1 e 2). Springer-Verlag, Heidelberg.
- Epstein, I. 1986. Teoria da Informação. Coleção Primeiros Passos, Editora Ática, São Paulo.
- McElreath, R. Statistical thinking in evolutionary ecology (http://xcelab.net/rm/?p=198).
- Vieira & Cunha (2008). Austral Ecology 33:872-879