

Estatística Computacional

Simulação de Monte Carlo



Prof. Paulo Cerqueira Jr
Faculdade de Estatística - FAEST
Programa de Pós-graduação em Matemática e Estatística - PPGME

<https://github.com/paulocerqueirajr> 

Introdução

Introdução

- A simulação de Monte Carlo (SMC) é uma técnica amplamente utilizada para entender o comportamento de modelos estatísticos sob diferentes cenários de incerteza.
- Na estatística, as simulações de Monte Carlo são úteis para explorar distribuições de variáveis aleatórias, estimar incertezas, e validar modelos em cenários onde soluções analíticas são complexas ou impossíveis.
- Elas têm aplicações em diversas áreas, incluindo ciências sociais, economia, finanças e estudos ambientais.

Introdução

- A metodologia da simulação de Monte Carlo consiste em quatro etapas principais:
 1. Definir o modelo estatístico: O modelo é formulado para descrever a relação entre variáveis de interesse.
 2. Gerar amostras aleatórias: Utilizando distribuições de probabilidade apropriadas, geramos amostras de variáveis aleatórias que representam os inputs do modelo.
 3. Calcular o resultado para cada amostra: Aplicamos o modelo às amostras geradas, obtendo uma distribuição dos resultados.
 4. Analisar os resultados: Com base nos resultados, estimamos estatísticas, intervalos de confiança e outras métricas que representam a incerteza do modelo.

Modelo Normal

Modelo Normal

- Suponha que X seja uma variável aleatória que segue uma distribuição normal, $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, onde:
 - μ é a média da população (desconhecida),
 - σ^2 é a variância da população (também desconhecida).
- Dado um conjunto de n observações independentes X_1, X_2, \dots, X_n , nossos estimadores de μ e σ^2 são definidos como:

- **Média Amostral ($\hat{\mu}$):**

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

- **Variância Amostral ($\hat{\sigma}^2$):**

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \hat{\mu})^2$$

- Esses estimadores são não-viesados, o que significa que em média eles convergem para os valores reais de μ e σ^2 quando n é suficientemente grande.

Passos para a Simulação de Monte Carlo

1. **Definir os Parâmetros Verdadeiros:** Especificar os valores de μ e σ^2 para o modelo populacional.
2. **Especificar o Tamanho da Amostra e o Número de Simulações:** Definir o tamanho de cada amostra (n) e o número total de simulações.
3. **Gerar Amostras Aleatórias:** Para cada simulação, gerar uma amostra aleatória de tamanho n de uma distribuição normal com média μ e desvio padrão σ .
4. **Calcular as Estimativas para Cada Amostra:** Calcular $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$ para cada amostra gerada.
5. **Analisar os Resultados:** Examinar a distribuição das estimativas de $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$ e calcular as médias e os desvios padrão dessas distribuições.

Resultados

Vamos implementar a metodologia acima em R para realizar uma simulação de Monte Carlo, estimando os parâmetros μ e σ^2 de uma distribuição normal.

```
1 # Definindo os Parâmetros Verdadeiros
2 set.seed(123456789) # Para replicar
3 true_mu <- 5         # Média verdadeira
4 true_sigma <- 2      # Desvio padrão
5 n <- 30              # Tamanho da amostra
6 n_simulations <- 1000 # Número de simulações
7
8 # Inicializando vetores para armazenar resultados
9 mu_estimates <- numeric(n_simulations)
10 sigma2_estimates <- numeric(n_simulations)
11
12 # Simulação de Monte Carlo
13 for (i in 1:n_simulations) {
14   # Gerando uma amostra da distribuição normal
15   sample <- rnorm(n, mean = true_mu, sd = true_sigma)
```

```
1 # Análise dos Resultados
2 mean_mu_estimate <- mean(mu_estimates)
3 mean_sigma2_estimate <- mean(sigma2_estimates)
4 sd_mu_estimate <- sd(mu_estimates)
5 sd_sigma2_estimate <- sd(sigma2_estimates)
6
7 cat("Estimativa da média (mu):", mean_mu_estimate, "\n")
8 cat("Erro padrão da média estimada:", sd_mu_estimate, "\n")
9 cat("Estimativa da variância (sigma^2):", mean_sigma2_estimate, "\n")
10 cat("Erro padrão da variância estimada:", sd_sigma2_estimate, "\n")
11
12 # Visualização das Distribuições das Estimativas
13 par(mfrow = c(1, 2)) # Dividir a janela em duas colunas
14 hist(mu_estimates, breaks = 30, main = "Distribuição de Mu", col = "blue", las = 1)
15 hist(sigma2_estimates, breaks = 30, main = "Distribuição de Sigma^2", col = "red", las = 1)
```


Resultados

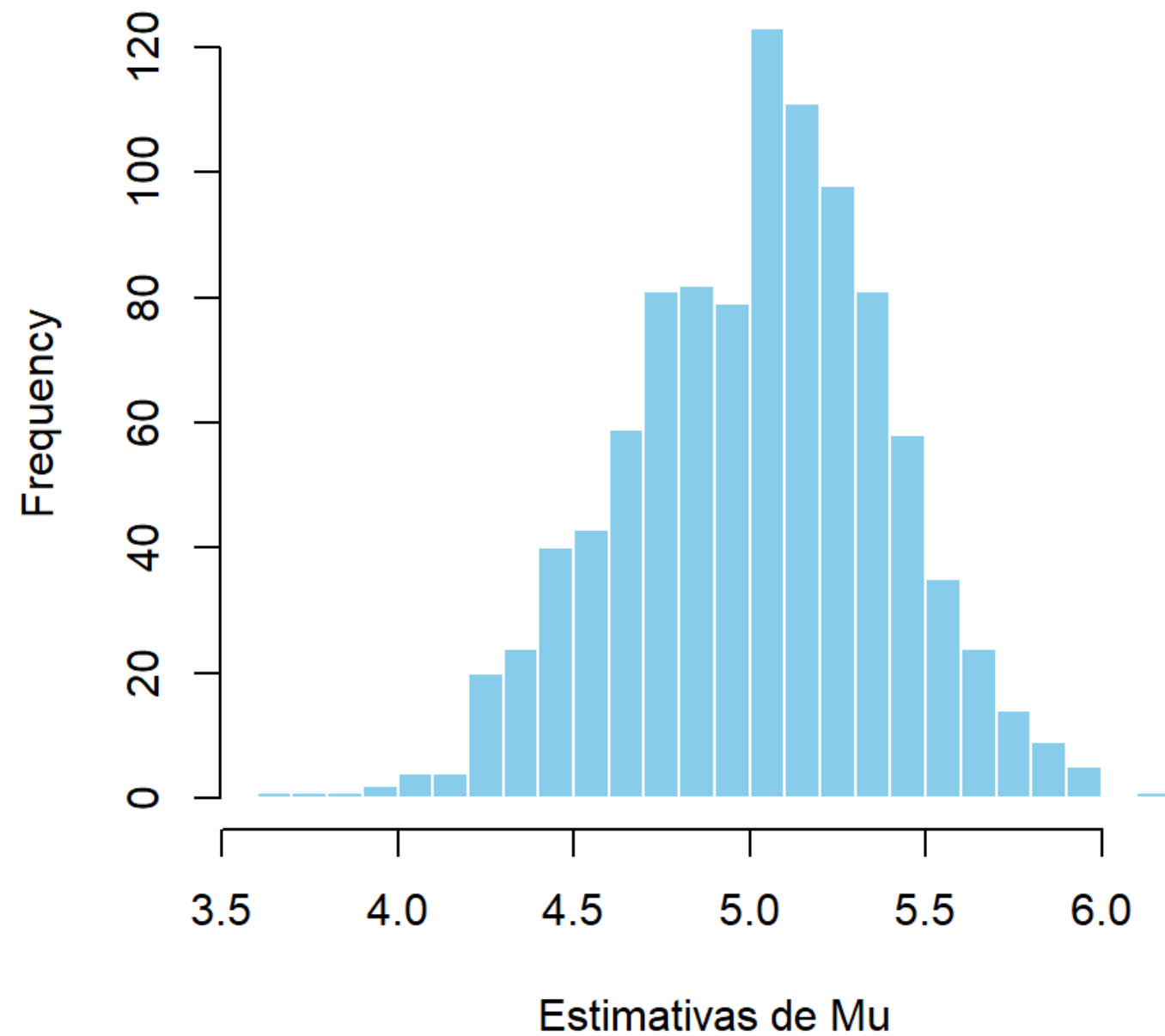
Estimativa da média (μ): 5.016872

Erro padrão da média estimada: 0.3745315

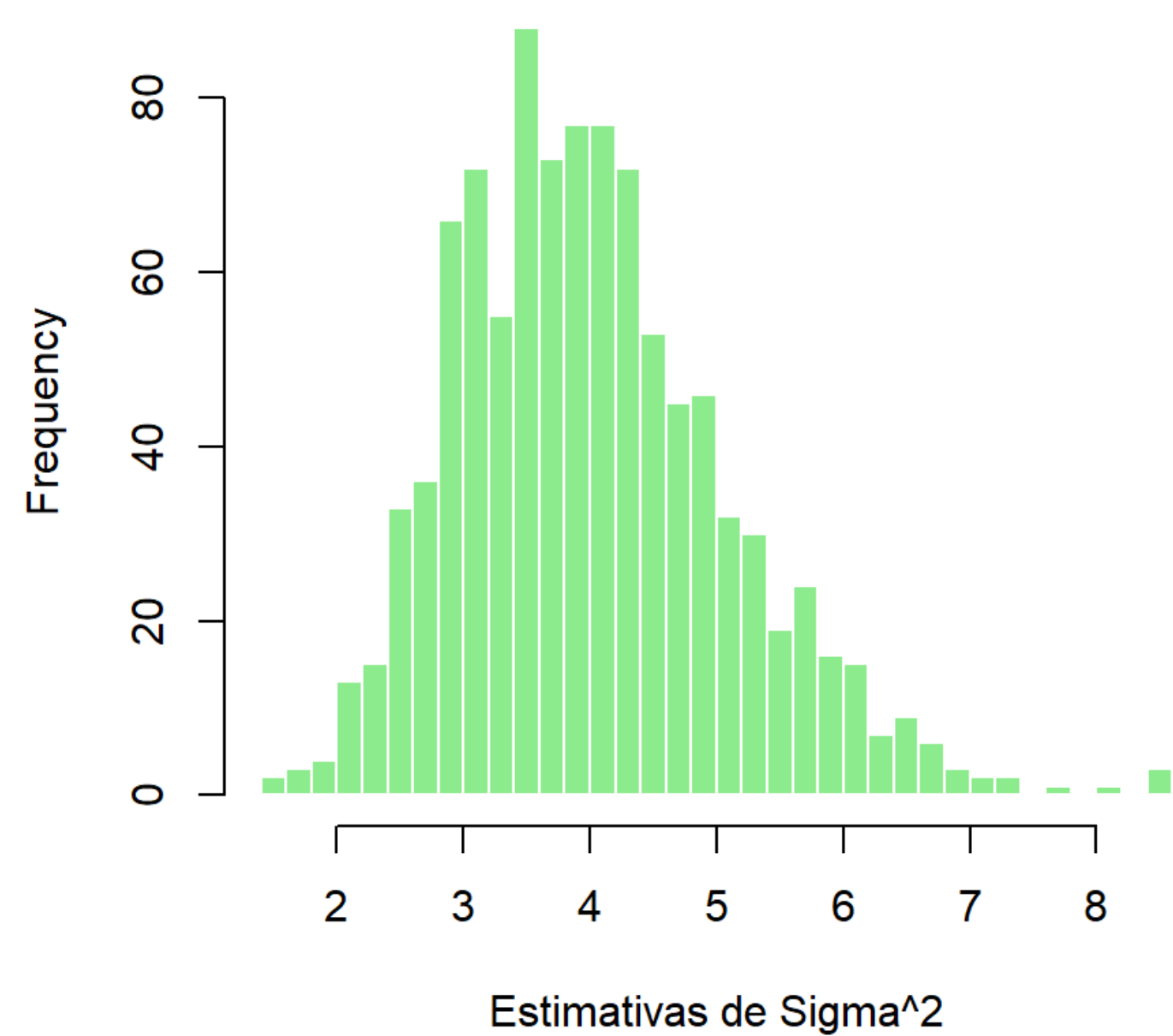
Estimativa da variância (σ^2): 4.016886

Erro padrão da variância estimada: 1.079607

Distribuição das Estimativas de Mu



Distribuição das Estimativas de Sigma^2



Interpretação dos resultados

- Após a simulação de Monte Carlo, obtemos distribuições das estimativas $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$.
- Essas distribuições fornecem uma ideia da variabilidade esperada das estimativas de μ e σ^2 para o tamanho amostral dado.
- A média das estimativas de $\hat{\mu}$ deve ser próxima da média verdadeira μ .
- A média das estimativas de $\hat{\sigma}^2$ deve ser próxima da variância verdadeira σ^2 .
- Os desvios padrão das distribuições de $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$ fornecem uma medida da precisão das estimativas para o tamanho amostral utilizado.

Caso mais geral

- Seja (X_1, X_2, \dots, X_n) uma amostra aleatória da variável X .
- A função de verossimilhança de $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$, correspondente a amostra observada $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e será denotada por

$$L(\theta \mid \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n f(x_i \mid \theta)$$

- A função de log-verossimilhança é dada por

$$\ell(\theta \mid \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \log f(x_i \mid \theta)$$

Estimativa da variância

- $I(\theta)$ é a informação de Fisher de θ e é definida como:

$$I_F(\theta) = E \left[\left(\frac{\partial \log L(\theta \mid \mathbf{X})}{\partial \theta} \right)^2 \right] = -E \left[\frac{\partial^2 \log L(\theta \mid \mathbf{X})}{\partial \theta^2} \right] = -E \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \log f(X_i \mid \theta)}{\partial \theta^2} \right] = \sum_{i=1}^n E \left[-\frac{\partial^2 \log f(X_i \mid \theta)}{\partial \theta^2} \right]$$

- No caso multiparamétrico, temos que $I_F(\theta)$ é vista como uma matriz.
- Uma alternativa para o cálculo da Informação de Fisher é considerar o caso “observado” ao invés do “esperado”.
- Informação de Fisher observada é dada por

$$\hat{I}(\theta) = \frac{\partial^2 \ell(\theta)}{\partial \theta^2} \Big|_{\theta = \hat{\theta}}$$

Estimativa da variância

- A estimativa da variância do estimador é obtida tomando

$$Var(\hat{\theta}) = diag\left(\hat{I}(\theta)^{-1}\right) = \left[Var(\hat{\theta}_1), Var(\hat{\theta}_2), \dots, Var(\hat{\theta}_k)\right]$$

- Dessa forma podemos calcular o intervalo de $\gamma\%$ de confiança assintótico:

$$IC(\theta, \gamma\%) = \hat{\theta} \pm z_{\gamma/2} \frac{\sqrt{Var(\hat{\theta})}}{\sqrt{n}} = \hat{\theta} \pm z_{\gamma/2} EP(\hat{\theta})$$

Modelo Weibul

- A função de densidade de probabilidade (fdp) de Weibull é dada por:

$$f(x; s, a) = asx^{a-1}\exp(-sx^a)$$

- A função de log-verossimilhança para uma amostra de n observações é dada por:

$$\ln L(s, a) = n \ln a + n \ln s + (a - 1) \sum_{i=1}^n \ln x_i - s \sum_{i=1}^n x_i^a$$

Derivadas de primeira ordem

As derivadas parciais da função de log-verossimilhança em relação a a e s são:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial a} = \frac{n}{a} + \sum_{i=1}^n \ln x_i - s \sum_{i=1}^n x_i^a \ln x_i$$

e

$$\frac{\partial \ln L}{\partial s} = \frac{n}{s} - \sum_{i=1}^n x_i^a$$

Derivadas de Segunda Ordem

As derivadas parciais de segunda ordem são:

$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial a^2} = -\frac{n}{a^2} - s \sum_{i=1}^n x_i^a (\ln x_i)^2,$$

$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial s^2} = -\frac{n}{s^2},$$

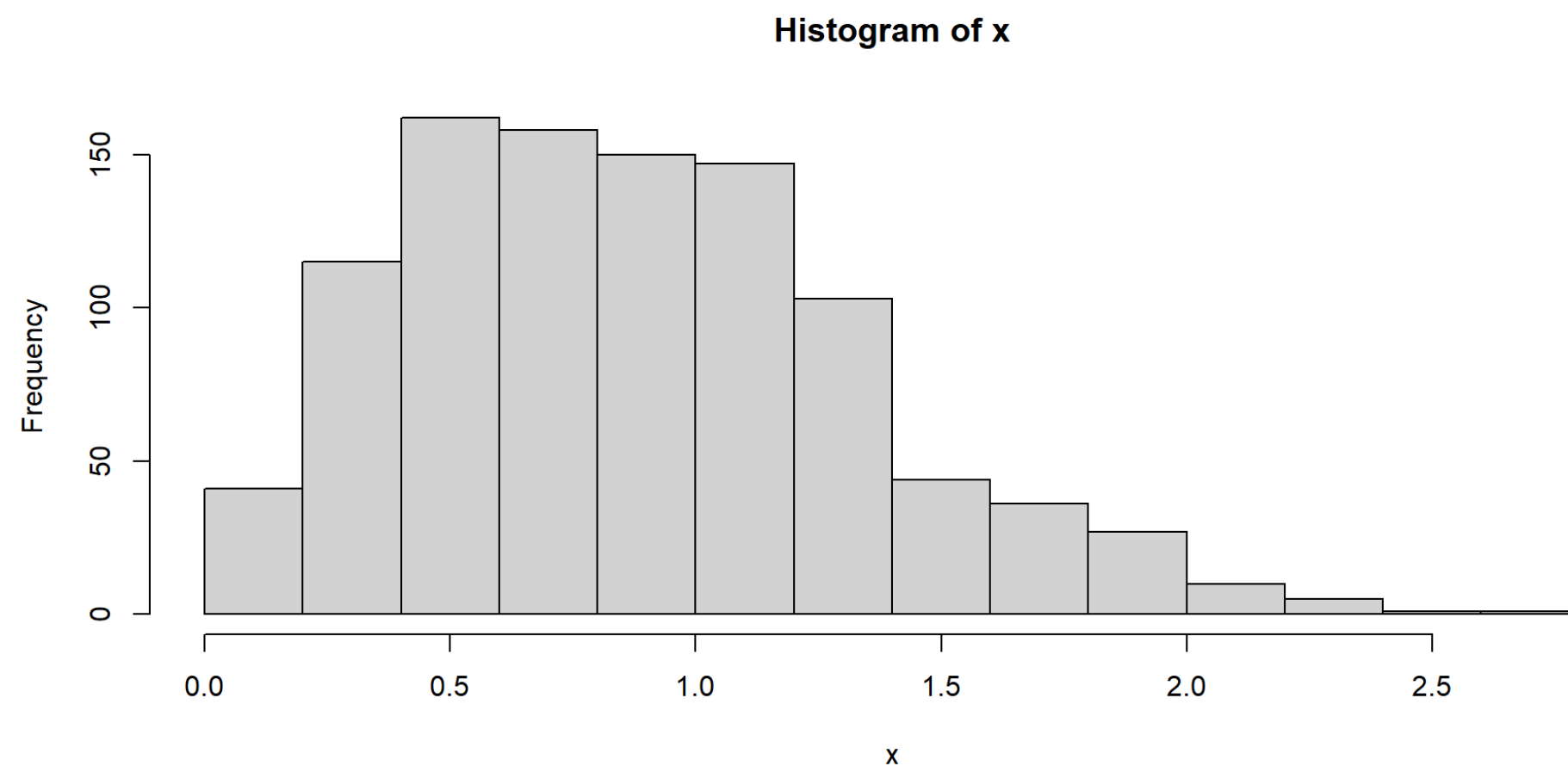
e

$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial s \partial a} = -\sum_{i=1}^n x_i^a \ln x_i.$$

Gerando os dados:

Foi gerado uma amostra de tamanho 1000 de uma distribuição de Weibull com parâmetro de forma $a = 2$ e escala $s = 1$.

```
1 ## Modelo Weibull:
2
3 set.seed(1234567890)
4
5 n <- 1000 # tamanho da amostra
6 a.p <- 2 # forma
7 s.p <- 1 # escala
8 x <- rweibull(n, shape = a.p, scale = 1/(s.p^a.p)) # dados gerados
9 hist(x)
```



Usando a função de log-verossimilhança

Neste passo precisamos somente da função de log verossimilhança.

```
1 logWeibull <- function(theta, dados) {  
2   a <- theta[1]  
3   s <- theta[2]  
4   n <- length(dados)  
5   x <- dados  
6  
7   l <- n*log(a) + n*log(s) + (a-1)*sum(log(x)) - s*sum((x)^a)  
8   return(-l)  
9 }
```

Usando a função **optim** para otimização

Dentro da função `logWeibull` o objeto `l` dará retorno negativo, pois a função `optim` determina ponto de mínimo.

```
1 theta0 <- c(3, 2) # Chute inicial
2 est <- optim(par = theta0, fn = logWeibull, gr = NULL, method = "BFGS",
3             hessian = TRUE, dados=x)
4
5 est$par
```

```
[1] 1.974179 1.020102
```

```
1 est$hessian
```

```
      [,1]      [,2]
[1,] 459.6588 198.7491
[2,] 198.7491 960.9790
```

- Tomando a diagonal da inversa da matriz hessiana

```
1 ep <- sqrt(diag(solve(est$hessian)))
2 ep
```

```
[1] 0.04887924 0.03380534
```