

R per l'analisi statistica multivariata

Unità K: analisi di verosimiglianza

Tommaso Rigon

Università Milano-Bicocca



Argomenti affrontati

- Aspetti numerici legati all'inferenza tramite verosimiglianza
- Stima numerica di massima verosimiglianza
- Il caso multiparametrico (grafici contour)
- Derivate numeriche e informazione osservata
- Esercizi **R** associati: https://tommasorigon.github.io/introR/exe/es_4.html

Un breve sommario

- In questa unità procederemo tramite **esempi**, volti a mostrare alcuni **aspetti numerici** e **grafici** legati alla verosimiglianza in modelli parametrici.
- In primo luogo, considereremo un esempio di modello con parametro **scalare**.
- Quindi, considereremo un esempio modello con parametro **vettoriale**.
- Per ovvie ragioni, non avremo tempo / modo di ripercorrere l'intero programma di Statistica II.
- Pertanto è di fondamentale importanza che gli argomenti di **inferenza statistica** siano ben chiari.

Inferenza statistica parametrica (recap)

- Nel caso assolutamente continuo, un **modello statistico** è una collezione di funzioni di densità

$$\mathcal{F} = \{f(\cdot; \theta) : \theta \in \Theta\},$$

indicizzata da un vettori di parametri $\theta \in \Theta$, dove $\Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ è lo **spazio parametrico**.

- Nel **caso discreto**, la definizione di modello statistico è la medesima, ma considerando delle funzioni di probabilità $p(x; \theta)$ al posto delle densità.
- Assumiamo inoltre che $y = (y_1, \dots, y_n)$ sia un campione (spesso iid) con legge congiunta $f(y; \theta)$, per un qualche **ignoto** valore del parametro θ .
- Relativamente ad un modello statistico \mathcal{F} di cui è stato osservato un campione y , si chiama **verosimiglianza** la funzione da Θ in $\mathbb{R} \cup \{0\}$

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathcal{L}(\theta; y) = C f(y; \theta),$$

dove $C = C(y)$ è una costante positiva che non dipende da θ .

Verosimiglianza e log-verosimiglianza (recap)

- Assumiamo che campione $y = (y_1, \dots, y_n)$ sia composto da realizzazioni **indipendenti** ed **identicamente distribuite** da una variabile casuale legge $f(y; \theta)$. Quindi, si ottiene

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathcal{L}(\theta; y) = C \prod_{i=1}^n f(y_i; \theta).$$

- Dato che $\mathcal{L}(\theta)$ è non-negativa, spesso si lavora con la funzione di **log-verosimiglianza**

$$\ell(\theta) = \ell(\theta; y) = \log \mathcal{L}(\theta) = c + \sum_{i=1}^n \log f(y_i; \theta),$$

dove $c \in \mathbb{R}$ è una costante additiva che non dipende da θ .

La stima di massima verosimiglianza

- La **stima di massima verosimiglianza** (SMV) è il valore $\hat{\theta}$ che rende massima la funzione di verosimiglianza $\mathcal{L}(\theta)$ sullo spazio Θ , cioè tale per cui

$$\mathcal{L}(\hat{\theta}) = \sup_{\theta \in \Theta} \mathcal{L}(\theta).$$

- La SMV rende massimo anche la funzione di log-verosimiglianza, per cui

$$\ell(\hat{\theta}) = \sup_{\theta \in \Theta} \ell(\theta).$$

- Di conseguenza, sotto opportune **condizioni di regolarità**, la SMV si ottiene come soluzione dell'equazione $\ell'(\theta) = 0$.
- Non è detto che la SMV esista.
- La SMV $\hat{\theta} = \hat{\theta}(y)$ è una **funzione del campione**, anche se a volte tale funzione non è rappresentabile esplicitamente.

Parametro scalare: modello esponenziale

- Sia $y = (y_1, \dots, y_n)$ un campione iid da una variabile casuale esponenziale con **tasso di guasto** λ , ovvero $Y \sim \text{Exp}(\lambda)$.

- Si ricordi che la densità di un modello esponenziale è

$$f(y; \lambda) = \lambda e^{-\lambda y}, \quad y, \lambda > 0.$$

- Di conseguenza, la funzione di log-verosimiglianza associata al campione y è

$$\ell(\lambda) = \ell(\lambda; y) = n \log \lambda - \lambda \sum_{i=1}^n y_i.$$

- **Esercizio.** Nel caso la derivazione di $\ell(\lambda)$ non fosse immediatamente chiara, si svolgano per esercizio tutti i passaggi.

Parametro scalare: modello esponenziale

- La funzione che calcola la verosimiglianza in **R** può essere implementata in vari modi.

```
loglik <- function(lambda, y) {  
  length(y) * log(lambda) - lambda * sum(y)  
}
```

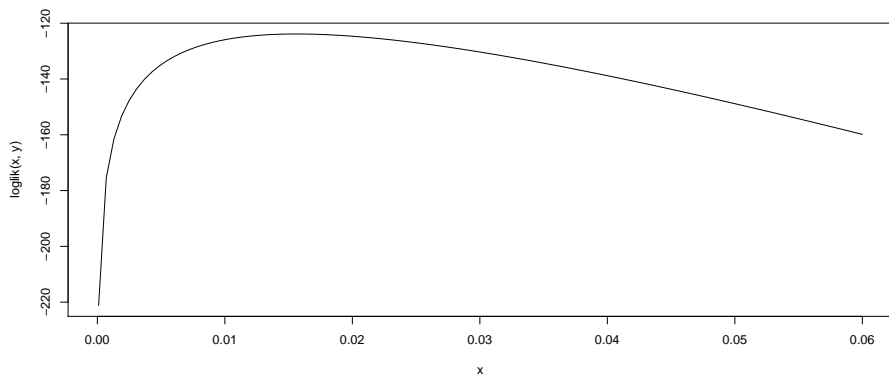
```
loglik2 <- function(lambda, y) {  
  sum(dexp(y, rate = lambda, log = TRUE))  
}
```

```
loglik3 <- function(lambda, y) {  
  sum(log(lambda) - lambda * y)  
}
```

- Consideriamo il dataset `aircondit7` della libreria `boot`, contenente i **tempi di rottura** relativi al sistema di condizionamento di alcuni aeroplani.

```
library(boot)  
data("aircondit7")  
y <- aircondit7$hours  
# [1] 3 5 5 13 14 15 22 22 23 30 36 39 44 46 50 72 79 88 97 102  
# [21] 139 188 197 210
```

Grafico della verosimiglianza



```
curve(loglik(x, y), 1e-4, 0.06) # log-verosimiglianza nell'intervallo (0.001, 0.06)
```

Le funzione *vettorizzabili*

- Le tre funzioni implementate sono **apparentemente** equivalenti:

```
loglik(0.01, y)
# [1] -125.9141
loglik2(0.01, y)
# [1] -125.9141
loglik3(0.01, y)
# [1] -125.9141
```

- Tuttavia, solamente la prima è correttamente **vettorizzata**:

```
# Risultato corretto
loglik(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
# [1] -125.9141 -124.6686 -130.3274

# I seguenti comandi producono invece dei risultati errati
loglik2(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
# [1] -127.97
loglik3(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
# [1] -127.97
```

Le funzioni *vettorizzabili*

- Il linguaggio **R** ama lavorare in modo **vettoriale** (e tipicamente odia i cicli for...)
- Solamente `loglik` è una funzione **vettorizzata** rispetto al parametro `lambda`.
- In altri termini, la funzione `loglik` può essere valutata in un vettore di punti ed il risultato sarà il vettore di valori di log-verosimiglianza associati.
- Fortunatamente, le funzioni possono essere "convertite" come segue:

```
loglik2 <- Vectorize(loglik2, vectorize.args = "lambda")
loglik3 <- Vectorize(loglik3, vectorize.args = "lambda")

loglik(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
# [1] -125.9141 -124.6686 -130.3274
loglik2(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
# [1] -125.9141 -124.6686 -130.3274
loglik3(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
# [1] -125.9141 -124.6686 -130.3274
```

Qualche cenno alle performance...

- Nonostante producano lo stesso risultato, le tre funzioni non hanno la stessa efficienza in termini di tempo.
- Una funzione **nativamente** vettorizzata è tipicamente più rapida di una conversione.
- Possiamo misurare le **performance** usando ad esempio il pacchetto `microbenchmark`.

```
library(microbenchmark) # Se assente, va installata
microbenchmark(
  L1 = loglik(c(0.01, 0.02, 0.03), y),
  L2 = loglik2(c(0.01, 0.02, 0.03), y),
  L3 = loglik3(c(0.01, 0.02, 0.03), y)
)
```

```
# Unit: microseconds
#  expr    min      lq    mean  median      uq    max neval
#   L1  1.333  1.5755  2.38046  2.2140  2.3895  19.897   100
#   L2 40.653 42.0615 47.96649 42.5525 43.2095 398.304   100
#   L3 36.854 38.6075 39.50370 38.9860 39.6790  55.612   100
```

La stima di massima verosimiglianza

- La **funzione punteggio** e l'**informazione osservata** del modello esponenziale sono pari a

$$\ell'(\lambda) = \frac{n}{\lambda} - \sum_{i=1}^n y_i, \quad j(\lambda) = -\ell''(\lambda) = \frac{n}{\lambda^2}.$$

- Entrambe queste funzioni sono utili per motivi inferenziali. Ad esempio la **stima di massima verosimiglianza** si ottiene (nei casi regolari) ponendo $\ell'(\lambda) = 0$.

- In questo caso quindi avremo

$$\hat{\lambda} = \frac{n}{\sum_{i=1}^n y_i} = \frac{1}{\bar{y}}.$$

- L'informazione osservata (in questo caso coincidente con l'informazione attesa) è invece estremamente utile per costruire ad esempio **intervalli di confidenza** (?!).

La stima di massima verosimiglianza (numerica)

- Come vedremo in seguito, risolvere l'equazione $\ell'(\lambda) = 0$ può essere problematico (ovviamente non nel caso esponenziale...).
- In questi casi “difficili”, la stima di massima verosimiglianza può essere ottenuta tramite procedure **numeriche**.
- In altri termini, utilizzeremo un **algoritmo iterativo** che produce una sequenza di valori $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, tali che, quantomeno idealmente,

$$\ell(\lambda_{k+1}) \geq \ell(\lambda_k).$$

- Il nuovo valore λ_{k+1} è tipicamente ottenuto a partire dal valore precedente λ_k .
- Pertanto, questa tipologia di algoritmi hanno bisogno di un **valore iniziale** λ_1 definito dall'utente.
- Dopo un certo numero di iterazioni, quando non si osservano più variazioni significative in termini di λ e/o $\ell(\lambda)$, l'algoritmo si ferma e si dice che è arrivato a **convergenza**.

Il metodo di Newton-Raphson I

- Nel metodo di **Newton-Raphson**, consideriamo lo sviluppo di Taylor della funzione di log-verosimiglianza $\ell(\lambda)$ nel generico punto λ_k , troncato al termine **quadratico**

$$\ell(\lambda) \approx \ell(\lambda_k) + \ell'(\lambda_k)(\lambda - \lambda_k) + \frac{\ell''(\lambda_k)}{2}(\lambda - \lambda_k)^2.$$

- Massimizziamo tale sviluppo, equivalente a trovare il vertice di una parabola, e quindi otteniamo l'equazione di verosimiglianza approssimata

$$\ell'(\lambda) - j(\lambda_k)(\lambda - \lambda_k) = 0,$$

che risolta rispetto a λ porta allo schema iterativo

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + j(\lambda_k)^{-1} \ell'(\lambda_k), \quad k = 1, 2, \dots$$

- **Nota.** Il metodo considera di fatto una serie di **approssimazioni paraboliche** della log-verosimiglianza, per le quali si va ogni volta a valutare il punto di massimo.

Il metodo di Newton-Raphson II

- Il metodo **Newton-Raphson** appena descritto si può implementare in **R** come segue:

```
lambda <- numeric(10); lambda[1] <- 0.005 # Punto iniziale (cosa succede cambiandolo?)
n <- length(y); sum_y <- sum(y)
# Algoritmo Newton-Raphson
for(k in 1:5){
  score <- n / lambda[k] - sum_y # Funzione score
  obs_info <- n / lambda[k]^2 # Informazione osservata
  lambda[k + 1] <- lambda[k] + score / obs_info # Passo iterativo
  print(c(lambda[k + 1], loglik(lambda[k + 1], y)), digits = 3) # Mostro i risultati
}
# [1]      0.0084 -127.6403
# [1]      0.0123 -124.4969
# [1]      0.0149 -123.8855
# [1]      0.0156 -123.8601
# [1]      0.0156 -123.8600
```

- Il risultato esatto, in questo caso, è facile da calcolare e lo riportiamo per un confronto:

```
lambda_hat <- 1 / mean(y)
c(lambda_hat, loglik(lambda_hat, y))
# [1]      0.01559454 -123.86002328
```

Metodi di massimizzazione

- In pratica, in **R** esistono diverse funzioni per la massimizzazione, basate su varie elaborazioni del metodo di Newton-Raphson (che noi non vedremo).
- Tutte queste funzioni richiedono un **valore iniziale** ma non necessitano dei valori delle derivate, che vengono approssimate internamente.
- Le funzioni richiedono inoltre un qualche **criterio di arresto**.
- Alcuni metodi permettono l'utilizzo di **vincoli sui parametri**.
- **Nota.** Per ragioni storiche, le funzioni di **R** identificano sempre il minimo della funzione cercata. Tuttavia:

$$\arg \max_{\lambda \in \mathbb{R}} \ell(\lambda) = \arg \min_{\lambda \in \mathbb{R}} -\ell(\lambda).$$

In altri termini, è sufficiente **cambiare di segno** la funzione obiettivo.

La funzione `nlminb`

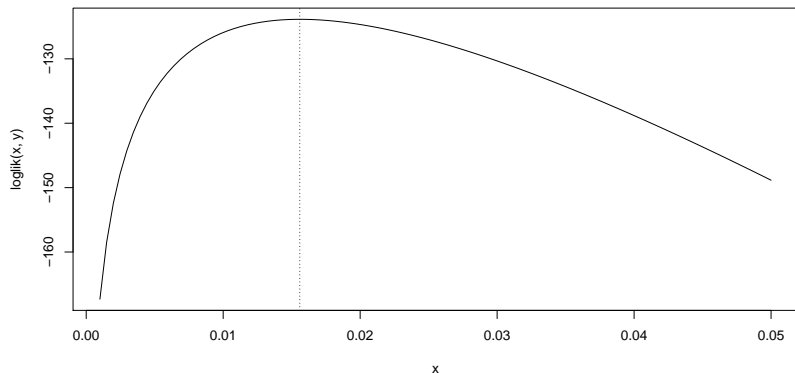
- La funzione `nlminb` effettua **minimizzazioni numeriche**, anche vettoriali.
- È una routine generalmente considerata più stabile, robusta ed affidabile della funzione concorrente `optim`, che vedremo in seguito.
- Inoltre, consente di incorporare dei **vincoli** sui parametri, qualora questi fossero presenti.
- Nel modello esponenziale, per esempio, si ha il vincolo $\lambda > 0$.
- La funzione `nlminb` tuttavia non produce la **derivata seconda** (a volte risulta utile), che fortunatamente è ottenibile tramite il comando `hessian` della libreria `numDeriv`.

```
library(numDeriv) # Libreria per il calcolo di derivate numeriche
hessian(func = function(lambda) loglik(lambda, y), x = lambda_hat) # Derivata seconda
#           [,1]
# [1,] -98688.38
```

La funzione nlminb

```
fit_exp <- nlminb(start = 1, objective = function(lambda) - loglik(lambda, y), lower = 1e-5)
fit_exp
# $par
# [1] 0.01559454
#
# $objective
# [1] 123.86
#
# $convergence
# [1] 0
#
# $iterations
# [1] 16
#
# $evaluations
# function gradient
#      24      19
#
# $message
# [1] "relative convergence (4)"
```

Grafico della verosimiglianza



```
lambda_hat <- fit_exp$par # Stima di massima verosimiglianza  
curve(loglik(x, y), 0.001, 0.05)  
abline(v = lambda_hat, lty = "dotted")
```

La funzione optim

```
obs_info <- length(y) / lambda_hat^2
```

```
obs_info
# [1] 98688.38

optim(par = 1, fn = function(lambda) - loglik(lambda, y), lower = 1e-5, method = "L-BFGS-B", hessian = TRUE)
# $par
# [1] 0.01561446
#
# $value
# [1] 123.86
#
# $counts
# function gradient
#      29      29
#
# $convergence
# [1] 0
#
# $message
# [1] "CONVERGENCE: REL_REDUCTION_OF_F <= FACTR*EPSMCH"
#
# $hessian
#      [,1]
# [1,] 99253.17
```

Vincoli e riparametrizzazioni

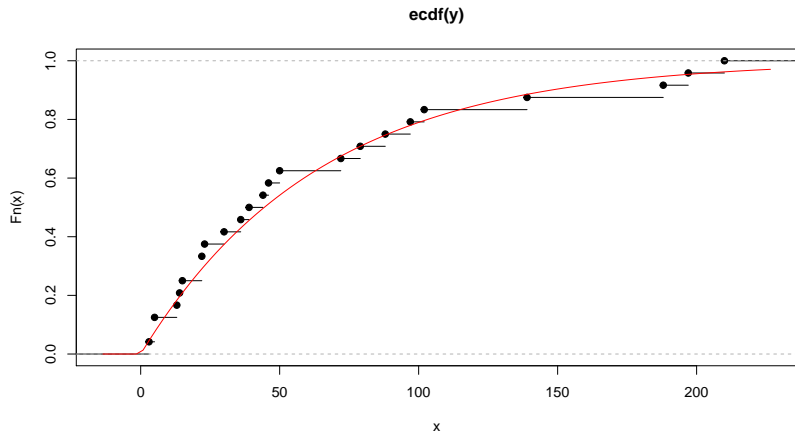
- Spesso, per motivi numerici, è più conveniente **riparametrizzare** il modello in modo tale che il nuovo spazio parametrico sia illimitato (ad es. \mathbb{R}^p).
- Il principio fondamentale (**invarianza**) di questo approccio si basa sul fatto che la stima di massima verosimiglianza è tale che $\hat{\lambda} = \lambda(\hat{\psi})$.
- Nel caso esponenziale, questo si può facilmente ottenere considerando la seguente riparametrizzazione: $\psi = \psi(\lambda) = \log \lambda$.
- In altre parole, è sufficiente calcolare $\hat{\psi}$ massimizzando la log-verosimiglianza

$$\ell(\psi; y) = n \psi - e^{\psi} \sum_{i=1}^n y_i.$$

Quindi è si considera la trasformata inversa per ottenere $\hat{\lambda} = e^{\hat{\psi}}$.

```
fit_exp_reparam <- nlminb(start = 1, objective = function(psi) - loglik(exp(psi), y))  
exp(fit_exp_reparam$par) # Trasformazione inversa  
# [1] 0.01559454
```

Adeguatezza del modello



```
plot(ecdf(y))  
curve(pexp(x, lambda_hat), col = "red", add = TRUE)
```

Parametro vettoriale: il modello Weibull

- Sia $y = (y_1, \dots, y_n)$ un campione iid da una variabile casuale Weibull di **parametri** (γ, β) , ovvero $Y \sim \text{Weib}(\gamma, \beta)$.

- Si ricordi che la densità di un modello Weibull è

$$f(y; \gamma, \beta) = \frac{\gamma}{\beta} \left(\frac{y}{\beta} \right)^{\gamma-1} e^{-(y/\beta)^\gamma}, \quad y, \gamma, \beta > 0.$$

- Di conseguenza, la funzione di **log-verosimiglianza** associata al campione y è

$$\ell(\gamma, \beta) = \ell(\gamma, \beta; y) = n \log \gamma - n\gamma \log \beta + \gamma \sum_{i=1}^n \log y_i - \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{\beta} \right)^\gamma.$$

- **Esercizio.** Si ottenga la precedente log-verosimiglianza.

Parametro vettoriale: il modello Weibull

- La funzione che calcola la verosimiglianza in **R** può essere implementata in vari modi. Ne presentiamo qui uno dei tanti basato sulla funzione `dweibull`

```
loglik <- function(par, y) {  
  sum(dweibull(y, shape = par[1], scale = par[2], log = TRUE))  
}
```

- Siamo interessati a capire se il modello Weibull, che **generalizza** quello esponenziale, rappresenta una scelta modellistica migliore.
- Consideriamo anche in questo caso il dataset `aircondit7` della libreria `boot`:

```
library(boot)  
data("aircondit7")  
y <- aircondit7$hours  
# [1] 3 5 5 13 14 15 22 22 23 30 36 39 44 46 50 72 79 88 97 102  
# [21] 139 188 197 210
```

Grafico della verosimiglianza I

- In generale non è possibile disegnare dei grafici della verosimiglianza con parametri vettoriali.
- L'unica eccezione è il caso $p = 2$, in cui possiamo usare i cosiddetti grafici **contour**, basati sulle **curve di livello**.
- Per fare questo tipo di grafico, bisogna procedere per step.
- **Step 1.** Anzitutto bisogna definire un **intervallo di punti** per ciascuna componente del parametro.
- **Step 2.** Bisogna quindi calcolare la log-verosimiglianza in ciascuna coppia di punti della griglia definita dal **prodotto cartesiano** dei due intervalli.

Grafico della verosimiglianza II

- Gli estremi degli intervalli vanno scelti **manualmente**. In pratica, bisogna procedere per tentativi se si vuole disegnare la verosimiglianza in una regione "sensata".

```
# Definizione degli intervalli di punti
```

```
gamma <- seq(0.1, 2.25, length = 200)
```

```
beta <- seq(0.5, 400, length = 200)
```

```
# Ottenimento della griglia tramite prodotto cartesiano
```

```
parvalues <- expand.grid(gamma, beta)
```

```
# Calcolo valori di verosimiglianza
```

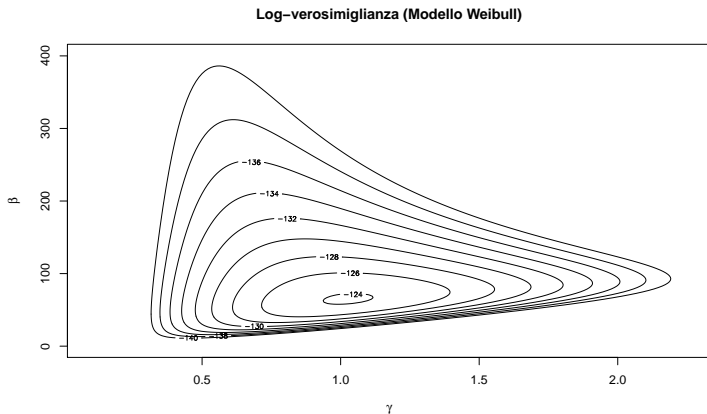
```
llikvalues <- apply(parvalues, 1, loglik, y = y)
```

```
# Ri-organizzazione dei valori della log-verosimiglianza in forma matriciale
```

```
llikvalues <- matrix(llikvalues, nrow = length(gamma), ncol = length(beta), byrow = F)
```

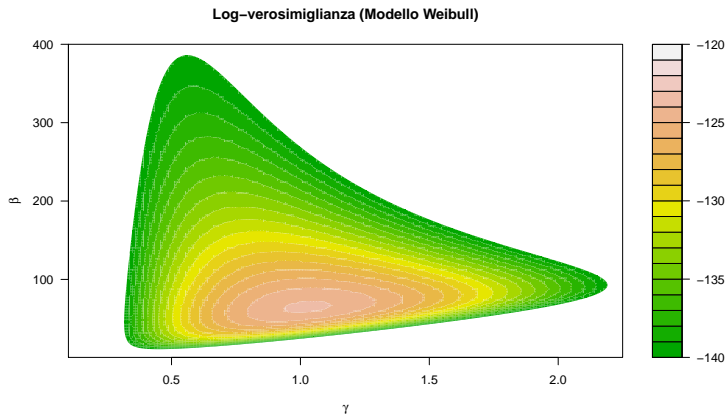
- Quindi, il grafico contour oppure sua variante filled.contour si possono ottenere abbastanza facilmente.

Grafico della verosimiglianza III



```
contour(gamma, beta, llikvalues,  
  xlab = expression(gamma), ylab = expression(beta), # Produce le lettere greche nel grafico  
  levels = seq(from = -140, to = -120, by = 2),  
  main = "Log-verosimiglianza (Modello Weibull)")
```

Grafico della verosimiglianza IV



```
filled.contour(gamma, beta, llikvalues,  
  xlab = expression(gamma), ylab = expression(beta),  
  levels = seq(from = -140, to = -120, by = 1),  
  col = terrain.colors(20), main = "Log-verosimiglianza (Modello Weibull)")
```

Stima di massima verosimiglianza

- Nel caso Weibull la **funzione punteggio** è un vettore di dimensione due, che conduce alle seguenti equazioni di verosimiglianza

$$\frac{\partial}{\partial \gamma} \ell(\gamma, \beta) = \frac{n}{\gamma} - n \log \beta + \sum_{i=1}^n \log y_i - \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{\beta} \right)^{\gamma} \log \left(\frac{y_i}{\beta} \right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \ell(\gamma, \beta) = -\frac{n\gamma}{\beta} + \frac{\gamma}{\beta^{\gamma+1}} \sum_{i=1}^n y_i^{\gamma} = 0.$$

- Risolvendo la seconda equazione otteniamo la stima vincolata $\hat{\beta}_{\gamma} = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i^{\gamma} \right)^{1/\gamma}$, per ogni γ fissato.

- **Problema chiave.** Sostituendo $\hat{\beta}_{\gamma}$ nella prima equazione otteniamo quindi:

$$\frac{n}{\gamma} + \sum_{i=1}^n \log y_i - n \frac{\sum_{i=1}^n y_i^{\gamma} \log y_i}{\sum_{i=1}^n y_i^{\gamma}} = 0.$$

Quest'ultima equazione purtroppo **non** ammette una **soluzione analitica**.

Stima di massima verosimiglianza

- Per trovare la **stima di massima verosimiglianza** dobbiamo quindi procedere per via numerica.
- Sebbene esistano in **R** dei comandi che calcolano gli zeri di una funzione (`uniroot`), per identificare il massimo è numericamente più stabile far uso di funzioni dedicate.
- Oltretutto, questo ci evita di dover fare dei conti analitici, come la derivata prima.
- Anche in questo caso, potremmo **riparametrizzare** (γ, β) ad esempio considerandone il logaritmo, cosicché siano definiti in \mathbb{R}^2 .
- In questo semplice caso bivariato, si è direttamente specificato il **limite inferiore** del dominio della funzione, ovvero $\gamma, \beta > 0$.

La funzione nlminb

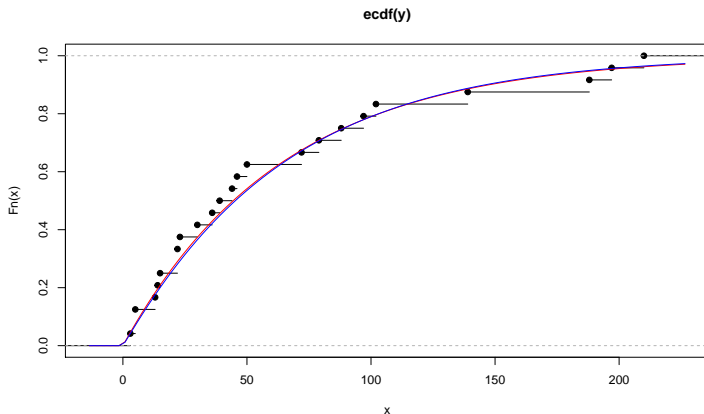
```
fit_weibull <- nlminb(start = c(1, 1), function(par) -loglik(par, y), lower = c(1e-7, 1e-7))
fit_weibull
# $par
# [1] 1.024919 64.792419
#
# $objective
# [1] 123.8483
#
# $convergence
# [1] 0
#
# $iterations
# [1] 21
#
# $evaluations
# function gradient
#      22      49
#
# $message
# [1] "relative convergence (4)"
```

Informazione osservata

- L'informazione osservata corrisponde alla matrice hessiana cambiata di segno e calcolata nel punto di massima verosimiglianza.
- La **varianza** dello **stimatore di massima verosimiglianza** è connessa all'inversa di tale matrice (**?!**).
- Usando il pacchetto `numDeriv`, possiamo quindi calcolarla nel modo seguente

```
obs_info <- -hessian(func = function(par) loglik(par, y), x = fit_weibull$par)
solve(obs_info)
#           [,1]      [,2]
# [1,] 0.02683981 0.7177585
# [2,] 0.71775848 185.7114164
```

Adeguatezza del modello



```
plot(ecdf(y))  
curve(pexp(x, fit_exp$par), col = "red", add = TRUE)  
curve(pweibull(x, fit_weibull$par[1], fit_weibull$par[2]), col = "blue", add = TRUE)
```

Sulla scelta del modello...

- In questo caso specifico, il modello esponenziale e il modello Weibull sembrano essere sostanzialmente equivalenti.
- Per poterlo affermare in modo più preciso, potremmo fare un **test**. Per esempio, potremmo considerare il seguente sistema d'ipotesi

$$\mathcal{H}_0 : \lambda = 1, \quad \mathcal{H}_1 : \lambda \neq 1.$$

- **Esercizio (difficile)**. Supponendo di disporre degli strumenti di inferenza statistica adeguati, si conduca un opportuno test statistico usando **R**.