Métodos de Monte Carlo em inferência estatística

Estimação

Fernando P. Mayer

1 Introdução

- Métodos de Monte Carlo representam uma série de ferramentas computacionais na estatística moderna.
- Os métodos de Monte Carlo podem se referir à qualquer método em inferência estatística ou análise numérica onde algum método de simulação é utilizado.
- Os métodos de Monte Carlo podem ser usados para:
    - Estimar parâmetros através da distribuição amostral de uma estatística
    - Calcular o erro quadrático médio (EQM) de uma estimativa
    - Estimar o nível de cobertura de intervalos de confiança
    - Encontrar a taxa empírica do erro tipo I em um teste de hipótese
    - Estimar o poder de um teste de hipótese
    - Comparar a performance de diferentes procedimentos aplicados a um mesmo problema
- Na inferência estatística, sabemos que sempre existe incerteza associada a qualquer estimativa
- Para investigar a incerteza, o método apresentado aqui, também chamado de **bootstrap paramétrico**, utiliza repetidas amostragens de um modelo probabilístico

- Se podemos simular o processo estocástico que gerou os dados, através da geração de diferentes amostras sob as mesmas condições, esperamos ao final ter uma réplica aproximada do processo em si, refletido nas amostras

2 Métodos de Monte Carlo para estimação

Suponha $X_1, \dots, X_n$ uma amostra aleatória da distribuição de X. Um estimador $\hat{\theta}$ para um parâmetro θ é a função

$$\hat{\theta} = T(x_1, \dots, x_n)$$

da amostra. Seja $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)' \in \mathcal{R}^n$, e vamos denotar por $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots$, uma sequência de amostras aleatórias **independentes** geradas a partir da distribuição de X.

Valores aleatórios da **distribuição amostral** de $\hat{\theta}$ podem ser obtidos através de N repetidas amostras aleatórias independentes $\mathbf{x}^{(j)}$, e calculando-se

$$\hat{\theta}^{(j)} = T(x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}) \quad j = 1, \dots, N$$

Dessa forma, se $\hat{\theta}$ é uma estimativa de θ da distribuição f, então as **amostras de um bootstrap paramétrico** de $f_{\hat{\theta}}$ são

$$f_{\hat{\theta}} \longrightarrow \mathbf{x}^{(j)} \longrightarrow \hat{\theta}^{(j)}$$

A distribuição amostral de $\hat{\theta}^{(j)}$ deve ser próxima da distribuição amostral verdadeira para N grande. A média da distribuição

$$\hat{\theta}_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \hat{\theta}^{(j)}$$

será então uma estimativa pontual para θ.

Um dos principais objetivos de se usar métodos de Monte Carlo para estimação de algum parâmetro, é o cálculo da **incerteza** associada à estimativa, expressa geralmente pelo **erro padrão**.

- Em muitos casos, o erro padrão de uma estimativa pode ser obtido diretamente de forma analítica
- Em casos mais complexos, a forma analítica pode não existir e mesmo a distribuição amostral pode ser desconhecida
- Nesses casos, a distribuição amostral **empírica** construída pelo método de Monte Carlo pode ser utilizada

Portanto, a estimativa do erro padrão pelo método de Monte Carlo é o **desvio padrão empírico** da amostra dos $\hat{\theta}^{(j)}$,

$$ep_{MC} = \frac{1}{N-1}\sqrt{\sum_{j=1}^{N}(\hat{\theta}^{(j)} - \hat{\theta}_{MC})^2}$$

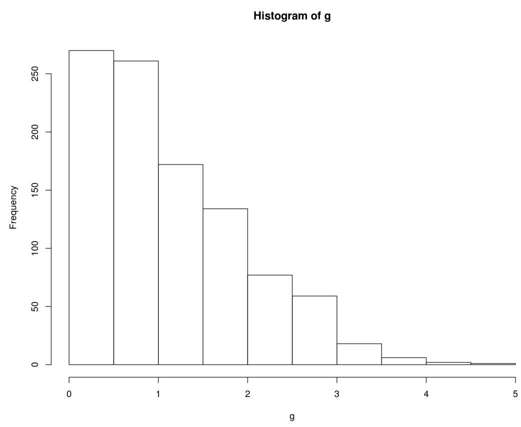
2.1 Exemplo: Estimação de Monte Carlo de um erro padrão

Suponha X_1, X_2 são duas VAs iid de uma normal padrão. Usando simulação de Monte Carlo, obtenha uma estimativa de $\mathrm{E}(|X_1 - X1|)$, e seu erro padrão.

Para estimar $\theta = \mathrm{E}(g(X_1, X_2)) = \mathrm{E}(|X_1 - X_2|)$, baseado em N amostras, gere as variáveis aleatórias $\mathrm{x}^{(j)} = (x_1^{(j)}, x_2^{(j)})$ da normal padrão, $j = 1, \ldots, N$.

Calcule $\hat{\theta}^{(j)} = g_j(x_1^{(j)}, x_2^{(j)}) = |x_1^{(j)} - x_2^{(j)}|$, e calcule a média.

```
N <- 1000
g <- numeric(N)
for (i in 1:N) {
    x <- rnorm(2)
    g[i] <- abs(x[1] - x[2])
}
(est <- mean(g))
# [1] 1.131141
hist(g)
```



Por integração, o resultado é $\mathrm{E}(|X_1 - X_2|) = 2/\sqrt{\pi} = 1.1284$

Em uma amostra de Monte Carlo, o tamanho da amostra é N, por isso, o erro padrão da estimativa será

```
## Variância da distribuição amostral
sum((g - est)^2)/(N - 1)
# [1] 0.7158632
var(g)
# [1] 0.7158632
## Erro padrão = desvio padrão da distribuição amostral
sqrt(sum((g - est)^2))/(N - 1)
# [1] 0.02676901
sd(g)/sqrt(N - 1)
# [1] 0.02676901
```

Pode-se mostrar que o valor exato é $ep = \sqrt{(2 - 4/\pi)/N} = 0.0269$.

2.2 Exemplo: Erro

Quadrático Médio

Erro Quadrático Médio

O Erro Quadrático Médio (EQM) de um estimador $\hat{\theta}$ de θ é dado por

$$\begin{aligned} \text{EQM}[\hat{\theta}] &= \text{E}[(\hat{\theta} - \theta)^2] \\ &= \text{Var}[\hat{\theta}] + \text{B}[\hat{\theta}]^2 \end{aligned}$$

onde

$$\text{B}[\hat{\theta}] = \text{E}[\hat{\theta}] - \theta$$

é denominado de **vício** do estimador $\hat{\theta}$. Portanto, dizemos que um estimador é **não viciado** para θ quando

$$\text{B}[\hat{\theta}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{E}[\hat{\theta}] = \theta$$

O EQM é comumente empregado na comparação de estimadores. Podemos dizer que $\hat{\theta}_1$ é **melhor** do que $\hat{\theta}_2$ se

$$\text{EQM}[\hat{\theta}_1] \leq \text{EQM}[\hat{\theta}_2]$$

para todo θ, com $\leq$ substituído por $<$ pelo menos para um valor de θ.

Se os estimadores são não viciados, então

$$\text{Var}[\hat{\theta}_1] \leq \text{Var}[\hat{\theta}_2]$$

Nesse caso, $\hat{\theta}_1$ é dito ser o **Estimador Não Viciado de Variância Uniformemente Mínima** (ENVVUM).

Considere o problema de se obter uma estimativa de centro de uma distribuição simétrica, sem considerar a média amostral. Podemos pensar em dois estimadores: a **média aparada** e a **mediana**. Qual dos dois estimadores é “melhor” para estimar a média populacional μ?

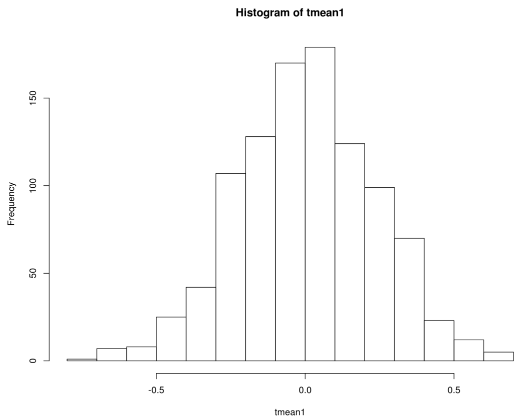
Suponha que $X_1, \dots, X_n$ é uma amsotra aleatória de X, e $X_{(1)}, \dots, X_{(n)}$ é a correspondente **amostra ordenada**. A média aparada de primeiro nível é calculada retirando-se o menor e o maior valor da amostra. De maneira mais geral, a média aparada de k-ésimo nível pode ser definida como

$$\overline{X}_{[-k]} = \frac{1}{n-2k} \sum_{i=k+1}^{n-k} X_{(i)}$$

Vamos obter o EQM da média aparada de primeiro nível ($\overline{X}_{[-1]}$) assumindo que $X \sim \text{N}(0,1)$. Nesse exemplo, a média da distribuição é zero, e o parâmetro de interesse é $\theta = \text{E}[\overline{X}] = \text{E}[\overline{X}_{[-1]}] = 0$. Considere que a média aparada de primeiro nível é T. Uma estimativa de $\text{EQM}[T]$ baseado em N replicações é obtida da seguinte forma:

1. Gera as repetições $T^{(j)}, j = 1, \dots, N$ repetindo:
   a. Gere $x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}$ iid da distribuição de X
   b. Ordene $x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}$ em ordem crescente, $x_{(1)}^{(j)} \leq \dots \leq x_{(n)}^{(j)}$
   c. Calcule $T^{(j)} = \frac{1}{n-2} \sum_{i=2}^{n-1} x_{(i)}^{(j)}$
2. Calcule $\widehat{\text{EQM}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} (T^{(j)} - \theta)^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} (T^{(j)})^2$

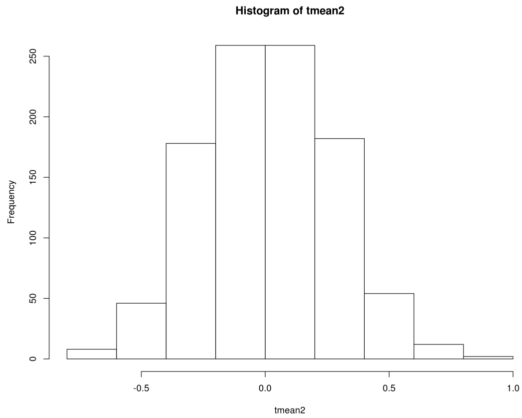
```
## Tamanho da amostra
n <- 20
## Número de repetições
N <- 1000
tmean1 <- numeric(N)
for (i in 1:N) {
    x <- sort(rnorm(n))
    tmean1[i] <- sum(x[2:(n - 1)])/(n
  - 2)
}
## Estimativa pontual
(m.tmean1 <- mean(tmean1))
# [1] 0.006333479
## Variância
sum((tmean1 - m.tmean1)^2)/(N - 1)
# [1] 0.05371879
## Erro padrão = desvio padrão da dist
  ribuição amostral
sqrt(sum((tmean1 - m.tmean1)^2))/(N -
  1)
# [1] 0.007332978
## EQM
(eqm1 <- mean(tmean1^2))
# [1] 0.05370518
hist(tmean1)
```



Note que a média aparada é um estimador não viesado para a média populacional, portanto $\mathrm{EQM}[\theta] = \mathrm{Var}[\theta] = \mathrm{Var}[X]/n$, que é igual a $1/20 = 0.05$, o que mostra que nossa estimativa está próxima.

Repare que a mediana também é uma média aparada: ela "apara" todos os valores das caudas menos um (quando n for ímpar), ou dois (quando n for par), e calcula a média. Portanto, podemos reptir o mesmo procedimento para a mediana.

```
n <- 20
N <- 1000
tmean2 <- numeric(N)
for (i in 1:N) {
    x <- sort(rnorm(n))
    tmean2[i] <- median(x)
}
## Estimativa pontual
(m.tmean2 <- mean(tmean2))
# [1] 0.006313864
## Variância
sum((tmean2 - m.tmean2)^2)/(N - 1)
# [1] 0.0701361
## Erro padrão = desvio padrão da distribuição amostral
sqrt(sum((tmean2 - m.tmean2)^2))/(N - 1)
# [1] 0.008378921
## EQM
(eqm2 <- mean(tmean2^2))
# [1] 0.07010583
hist(tmean2)
```



Agora podemos comparar qual dos dois estimadores é o melhor para a média populacional, através dos EQMs.

```
## Qual dos dois possui menor EQM
eqm1 <= eqm2
# [1] TRUE
## Eficiência relativa
eqm1/eqm2
# [1] 0.7660587
```

Na última linha calculamos também a **eficiência relativa** entre dois estimadores, ou seja, a eficiência relativa de $\hat{\theta}_1$ em relação a $\hat{\theta}_2$ é

$$\mathrm{ER}[\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2] = \frac{\mathrm{Var}[\hat{\theta}_1]}{\mathrm{Var}[\hat{\theta}_2]}$$

Por esses resultados concluimos que ambos estimadores, média aparada de primeiro nível e mediana, são não viesados para estimar a média populacional μ, mas a média aparada é um estimador melhor, ou mais eficiente do que a mediana.

2.3 Exemplo: Estimativa de nível de confiança

Seja $X_1, \ldots, X_n$ uma amostra aleatória de uma $\mathrm{N}(\mu, \sigma^2)$, onde s^2 é a variância amsotral. Considere o problema de estimar um **intervalo de confiança** para s^2.

Do Teorema Central do Limite (TCL) sabemos que $\bar{X} \sim \mathrm{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$. Como não conhecemos σ^2, usamos s^2 no lugar. Assim, temos que:

$$\widehat{Var}[\bar{X}] = \frac{s^2}{n} \quad \text{e} \quad \widehat{EP}[\bar{X}] = \frac{s}{\sqrt{n}}$$

Para obter a variância de s^2, precisamos lembrar que

$$\frac{(n-1)s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{(n-1)}$$

Lembrando também que para uma variável aleatória X com distribuição qui-quadrado com k graus de liberdade, $X \sim \chi^2_k$, temos $E[X] = k$, e $Var[X] = 2k$. Assim, calculamos a esperança como

$$E\left[\frac{(n-1)s^2}{\sigma^2}\right] = n-1$$
$$\frac{(n-1)}{\sigma^2}E[s^2] = n-1$$
$$E[s^2] = \frac{(n-1)\sigma^2}{(n-1)}$$
$$E[s^2] = \sigma^2$$

Portanto, confirmamos que essa é uma estimativa não viesada. Da mesma forma, calculamos a variância como:

$$Var\left[\frac{(n-1)s^2}{\sigma^2}\right] = 2(n-1)$$
$$\frac{(n-1)^2}{\sigma^4}Var[s^2] = 2(n-1)$$
$$Var[s^2] = \frac{2(n-1)\sigma^4}{(n-1)^2}$$
$$Var[s^2] = \frac{2\sigma^4}{n-1} = \frac{2(\sigma^2)^2}{n-1}$$

Como usamos s^2 no lugar de σ^2, temos então que

$$\widehat{Var[s^2]} = \frac{2(s^2)^2}{n-1}$$

O erro-padrão de s^2 é então a raíz quadrada desta variância, ou seja,

$$\widehat{EP[s^2]} = \sqrt{\widehat{Var[s^2]}} = \sqrt{\frac{2(s^2)^2}{n-1}} = s^2\sqrt{\frac{2}{n-1}}$$

Um intervalo de confiança **unilateral** de $100(1-\alpha)\%$ de confiança é dado por

$$\left(0, \frac{(n-1)s^2}{\chi^2_\alpha}\right)$$

onde χ^2_α é o α-quantil de uma distribuição $\chi^2(n-1)$. Se a população amostrada é normal com variância σ^2, então a probabilidade de que o intervalo contenha σ^2 é **exatamente** $1-\alpha$. Por exemplo, para $\alpha = 0.05$,

$$P\left(\frac{(n-1)s^2}{\sigma^2} > \chi^2_{.05}(n-1)\right) = 0.95$$
$$P\left(\frac{(n-1)s^2}{\chi^2_{.05}(n-1)} > \sigma^2\right) = 0.95$$

Por exemplo, o cáculo do limite superior do intervalo de 95% de confiança para uma amostra de tamanho $n = 20$ de uma $\mathrm{N}(0, 4)$ é

```
n <- 20
alpha <- .05
x <- rnorm(n, mean = 0, sd = 2)
(UCL <- (n - 1) * var(x) / qchisq(alph
  a, df = n - 1))
# [1] 4.388738
```

que contém o verdadeiro valor $\sigma^2 = 4$. Se repetirmos esse processo várias vezes, esperamos então que aproximadamente 95% das vezes, o intervalo contenha o verdadeiro valor de σ^2, **assumindo que a população amostrada é normal** com variância σ^2.

De maneira geral, um algoritmo para calcular o nível de confiança **empírico** para uma estimativa de algum parâmetro θ é:

1. Para cada repetição, indexada em $j = 1, \ldots, N$
   a. Gere a j-ésima amostra aleatória, $x_1^{(j)}, \ldots, x_n^{(j)}$
   b. Calcule o intervalo de confiança C_j para a j-ésima amostra
   c. Calcule $y_j = I(\theta \in C_j)$ para a j-ésima amostra
2. Calcule o nível de confiança empírico $\bar{y} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} y_j$

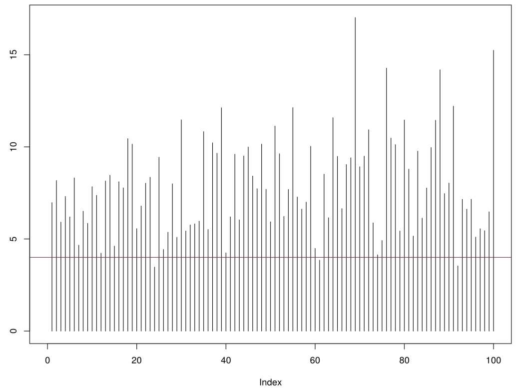
A proporção amostral de intervalos que contém θ é então uma estimativa de Monte Carlo do verdadeiro nível de confiança $(1 - \alpha)$.

(Note aqui o uso da função `replicate()` no lugar do `for()`).

```
n <- 20
m <- 1000
alpha <- .05
UCL <- replicate(m, expr = {
    x <- rnorm(n, mean = 0, sd = 2)
    (n - 1) * var(x) / qchisq(alpha, df = n - 1)
})
## Número de intervalos que contém sigma^2 = 4
sum(UCL > 4)
# [1] 943
## Nível de confiança empírico
sum(UCL > 4)/N
# [1] 0.943
mean(UCL > 4)
# [1] 0.943
```

Veja que o nível de confiança empírico é muito próximo do nível de confiança teórico, de 95%. Para 100 intervalos calculados, podemos visualizar o procedimento:

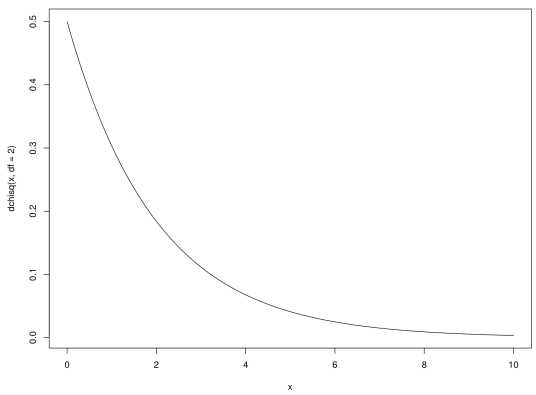
```
UCL.sim <- replicate(100, expr = {
    x <- rnorm(n, mean = 0, sd = 2)
    (n - 1) * var(x) / qchisq(alpha, df = n - 1)
})
plot(NULL, NULL, xlim = c(0, 100), ylim = c(0, max(UCL.sim)), ylab = "")
segments(1:100,
         0,
         1:100,
         UCL.sim)
abline(h = 4, col = 2)
```



Sabemos que o cálculo de intervalos de confiança para a variância é bastante sensível à fugas da normalidade. Ou seja, se a população amostrada não for normal, então o cálculo do intervalo de confiança possivelmente será afetado, refletindo no nível de confiança.

Por exemplo, suponha que ao invés de normal, os dados foram obtidos a partir de uma população que segue uma distribuição χ^2 com 2 graus de liberdade, que também possui variância 4, mas claramente não é normal.

```
curve(dchisq(x, df = 2), to = 10)
```



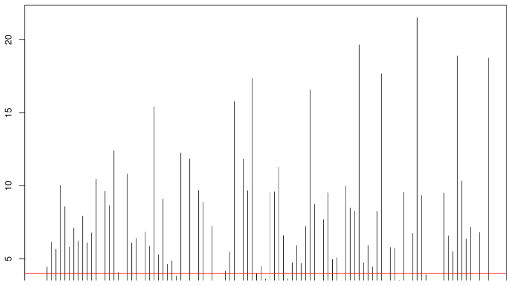
Podemos repetir o procedimento acima, substituindo as amostras de X da normal pela $\chi^2(2)$ e verificar qual seria então o nível de confiança empírico.

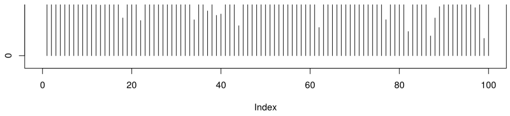
```
n <- 20
m <- 1000
alpha <- .05
UCL <- replicate(m, expr = {
    x <- rchisq(n, df = 2)
    (n - 1) * var(x) / qchisq(alpha, d
  f = n - 1)
})
## Número de intervalos que contém sig
  ma^2 = 4
sum(UCL > 4)
# [1] 788
## Nível de confiança empírico
sum(UCL > 4)/N
# [1] 0.788
mean(UCL > 4)
# [1] 0.788
```

Veja que, embora estamos calculando intervalos **teóricos** de 95%, o nível de confiança é na verdade bem mais baixo, o que pode levar à conclusões equivocadas nesse caso onde a população não é normal.

Visualmente temos:

```
UCL.sim <- replicate(100, expr = {
    x <- rchisq(n, df = 2)
    (n - 1) * var(x) / qchisq(alpha, d
  f = n - 1)
})
plot(NULL, NULL, xlim = c(0, 100), yli
  m = c(0, max(UCL.sim)), ylab = "")
segments(1:100,
         0,
         1:100,
         UCL.sim)
abline(h = 4, col = 2)
```




0
0
20
40
60
80
100
Index