Uma Introdução ao Bootstrap Usando o R

Lupércio França Bessegato
Dep. de Estatística/UFJF

Apresentação

- Lupércio F. Bessegato
  - √ Professor do Departamento de Estatística/UFJF
  - √ Membro permanente de corpo docente:
    - Mestrado Acadêmico de Administração/UFJF
    - Mestrado Profissional em Educação Matemática
  - √ Pesquisa e extensão:
    - Análise e modelagem de dados multivariados
  - √ Site: http://www.ufjf.br/lupercio_bessegato
  - √ E-mail: lupercio.bessegato@ufjf.edu.br

Roteiro Geral

1. Fundamentos de reamostragem
2. Estimação pontual por bootstrap
3. Estimação intervalar por bootstrap
4. Bootstrap paramétrico
5. Modelos de regressão por bootstrap
6. Referências

Introdução ao Bootstrap

Métodos de Reamostragem

- Métodos de permutação:
  - √ Fisher (1935); Pitman (1937, 1938)
- Jackknife
  - √ Quenouile (1949); Tukey (1958)
- Bootstrap:
  - √ Efrom (1979)

Testes de Permutação

- Conhecido desde os anos 1930s
- Quantidade de permutações possíveis da amostra: n!
- Impedimento a seu uso
  - √ Quantidade de permutações à medida que o tamanho amostral cresce

Bootstrap e Jackknife

- Jackknife
  - √ Em princípio útil para amostras pequenas
  - √ Pode tornar-se computacionalmente ineficiente para amostras maiores
    - (mais viável à medida que cresce a velocidade de processamento)
  - √ Efrom (1979)
    - Bootstrap construído como aproximação ao jackknife

Bootstrap

- Amostra bootstrap:
  - √ Elementos escolhido aleatoriamente com reposição a partir da amostra original
  - √ Tem mesmo tamanho da amostra original (n)
  - √ Quantidade de reamostras possíveis: n^n
- Amostra aleatória do conjunto das amostras bootstrap possíveis
  - √ Maneira viável para aproximar a distribuição das amostral bootstrap

- Efrom (1979)
  - √ Conectou bootstraping com jackknife, método delta, validação cruzada e testes de permutação
- Efrom (1983)
  - √ Uso de correção de viés bootstrap com desempenho melhor que validação cruzada na estimação de taxas de erros de classificação
  - √ Variantes do bootstrap com validação cruzada e métodos de ressubstituição

- Gong (1986)
  - √ Uso de bootstrap na construção de modelo de regressão logística

Bootstrap – Consistência

- Consistência de estimador
  - √ Aproximar-se do verdadeiro valor do parâmetro quando o tamanho amostral cresce
- Estimativa bootstrap não é consistente no sentido probabilístico
  - √ Exemplos
    - Estimação da média quando distribuição não tem variância finita
    - Estimação de máximo e mínimo

- Em geral, o bootstrap é consistente quando o Teorema Central do Limite é aplicável
- Bootstrap m-out-of-n (Bickel e Ren, 1996)
  - √ m elementos escolhidos aleatoriamente com reposição da amostra de tamanho n (m < n)
  - √ Extensão que supera a consistência do bootstrap

Métodos de Reamostragem

- Objetivo:
  - √ Estimação de parâmetro populacional baseando-se apenas nos dados
- Sem suposições sobre a forma da distribuição populacional, origem dos dados

- Caso simples:
  - √ Observações independentes e identicamente distribuídas com função de distribuição acumulada F
  - √ Função de distribuição empírica (F_n)
    - Dá mesmo peso para cada dado (1/n)
    - Elemento básico para o bootstraping
- Interesse:
  - √ Funcionais da distribuição populacional desconhecida F
    - Maioria dos parâmetros são funcionais de F

Exemplo

- μ e σ^2 representados como funcionais:

$$\mu = \int_{\mathrm{R}_X} x \, \mathrm{d}F(x) \qquad \sigma^2 = \int_{\mathrm{R}_X} (x-\mu)^2 \, \mathrm{d}F(x)$$

  - √ R_X: conjunto de valores possíveis do domínio de F
- Ideia:
  - √ Usar apenas o que é conhecido a partir dos dados
  - √ Não introduzir suposições sobre a distribuição da população

- Amostra:
  - √ F é a distribuição populacional e T(F) é o funcional que define o parâmetro
  - √ Estimação baseada em amostra iid de F, de tamanho n
    - F_n: função de distribuição empírica
    - $T(F_n)$: estimativa amostral do parâmetro
- Amostra bootstrap:
  - √ Amostra com reposição da amostra original
  - √ F_n desempenha o papel de F
  - √ F_n^*: função de distribuição bootstrap
    - Desempenha o papel de F_n

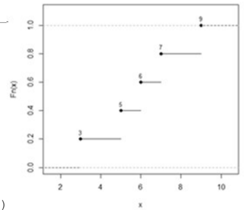
Exemplo

- Parâmetro populacional:
  - √ $\mathrm{T}(F) = \mu$:
- Amostra original:

$$x_1 = 7; x_2 = 5; x_3 = 3; x_4 = 9; x_5 = 6$$

  - √ Estimativa parâmetro amostral: $\mathrm{T}(F_n) = \bar{x} = 6,0$
  - √ Função distribuição empírica

```
>   # Função distribuição empírica de amostra original
> original <- c(7, 5, 3, 9, 6)
> Fn <- ecdf(original)
> summary(Fn)
Empirical CDF:    5 unique values with summary
   Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
      3       5       6       6       7       9
> knots(Fn)
[1] 3 5 6 7 9
> plot(Fn, ylim = c(0, 1.1) , main = "")
> text(knots(Fn), 1:5/5, knots(Fn), cex = 0.8, pos = 3)
```



$$x_1 = 7; x_2 = 5; x_3 = 3; x_4 = 9; x_5 = 6$$

- Amostra bootstrap:
  - √ Amostragem com reposição da amostra original

```
>   # geração de amostra bootstrap
> set.seed(666)
> amostra.boot <- sample(original, 5, replace = T)
[1] 9 7 6 5 5
> mean(amostra.boot)
[1] 6.4
```

  - √ Amostra bootstrap:

$$x_1^* = 9; x_2^* = 7; x_3^* = 6; x_4^* = 5; x_5^* = 5$$

  - √ Estimativa bootstrap:

$$\mathrm{T}(F_n^*) = \bar{x}^* = 6,4$$

$$x_1 = 7; x_2 = 5; x_3 = 3; x_4 = 9; x_5 = 6$$

- Outra amostra bootstrap:
  - √ Amostragem com reposição da amostra original

```
>   # geração de outra amostra bootstrap
> (amostra.boot <- sample(original, 5, replace = T))
[1] 9 6 3 7 5
> mean(amostra.boot)
[1] 6.0
```

  - √ Amostra bootstrap:

$$x_1^* = 9; x_2^* = 6; x_3^* = 3; x_4^* = 7; x_5^* = 5$$

  - √ Estimativa bootstrap:

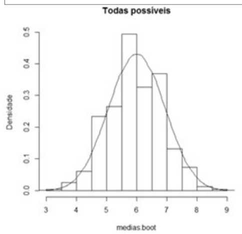
$$\mathrm{T}(F_n^*) = \bar{x}^* = 6,0$$

Distribuição Bootstrap

- Distribuição da estimativa do parâmetro de todas as amostras possíveis
  - √ Quantidade de amostras possíveis: n^n
  - √ No exemplo: $5^5 = 3.125$

√ Histograma todas as amostras com reposição

```
>  # geração de todas as amostras com reposição da original
> library(gtools)
> amostras.boot <- permutations(n = 5,  r = 5, v = original,
repeats.allowed = T)
> dim(amostras.boot)
[1] 3125    5
> medias.boot <- apply(amostras.boot, 1, mean)
> mean(medias.boot)
[1] 6
> hist(medias.boot, freq = F, ylab = "Densidade", main = "Todas possiveis")
> lines(density(medias.boot), col = "blue")
```



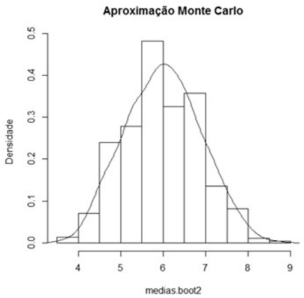
√ Média teórica da distribuição bootstrap é a média da amostra original.

Distribuição Bootstrap – Aproximação Monte Carlo

- Em geral, é inviável gerar todas as amostras com reposição possíveis
  - √ Se n = 10, $10^{10} = 10$ bilhões
- Solução:
  - √ Repetir muitas vezes o procedimento de sorteio aleatório com reposição
  - √ Construir histograma das estimativas bootstrap
  - √ Aproximação Monte Carlo da distribuição bootstrap

√ Histograma todas as amostras com reposição

```
>  # Aproximação Monte Carlo da distribuição bootstrap
> medias.boot2 <- replicate(1000, mean(sample(original, 5, replace = T)))
> mean(medias.boot2)
[1] 6.0026
> hist(medias.boot2, freq = F, ylab = "Densidade",main = "Aproximação Monte Carlo")
> lines(density(medias.boot2), col = "blue")
```



√ Média das amostras bootstrap está bem próxima de 6,0.

- Aproximação Monte Carlo da distribuição bootstrap
  - √ Permite observação da variabilidade das estimativas
  - √ Pode-se estimar
    - Assimetria, curtose, erro padrão, intervalos de confiança
  - √ Na prática usa-se aproximação Monte Carlo
  - √ Geração B = 10.000 (ou 100.000) reamostras
    - Distribuição se aproxima da distribuição bootstrap

Procedimento

1. Geração de amostras bootstrap (com reposição) a partir da distribuição empírica dos dados originais
2. Cálculo de $T(F_n^*)$
   - √ Estimativa bootstrap de $T(F)$
3. Repetem-se os passos anteriores B vezes
   - √ B grande

Fontes de Erro

- Aproximação Monte Carlo da distribuição bootstrap
  - √ Diminui à medida que B é grande
- Aproximação da distribuição bootstrap (F_n^*) à distribuição populacional F
  - √ O bootstrap funciona se $T(F_n^*) \to T(F)$, quando $n \to \infty$.
  - √ Ocorre com frequência mas não é garantido

- Em muitos casos, está demonstrada a consistência do bootstrap.
  - √ Há exemplos em que o bootstrap não é consistente
  - √ Há casos que nem a consistência nem a inconsistência estão provadas
- Usam-se simulações para confirmar ou negar a utilidade do bootstrap em casos especiais

Aplicações

- É tentador usar o bootstrap em uma grande variedade de aplicações
  - √ Às vezes ele não funciona bem
- Solução:
  - √ Provar a consistência de acordo a um conjunto de suposições
  - √ Verificar comportamento por meio de simulações

- Algumas aplicações mais usuais:
  - √ Construção de intervalos de confiança
  - √ Estimação de parâmetros
  - √ Estimação em modelos de regressão
    - Bootstrap dos resíduos
    - Bootstrap dos vetores (pares)
    - Seleção de variáveis
  - √ Estimação de taxas de erros com ajuste de viés em problemas de classificação

35

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

- Simplicidade:
  - √ Para quase todo problema há uma maneira de gerar amostras bootstrap
- Deve-se tomar cuidados
  - √ Nem sempre percebe-se quando o bootstrap irá falhar
- Há extensões do bootstrap com modificações para contornar problemas conhecidos na estimação

36

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

Bootstrap e a Linguagem R

```
>    # Bootsrap no R
> ??bootstrap
> help.search("bootstrap")
```

37

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

Estimação Pontual

Estimação Pontual

- Estimação de viés com bootstrap
  - √ Correção de viés para aprimorar estimativa
- Bootstrap foi proposto inicialmente para estimar erro padrão, sendo usado posteriormente na correção de viés
  - √ Jacknife é também usado para corrigir viés

Estimação de Viés

- Seja $\hat{\theta}$ um estimador do parâmetro θ.

$$\text{vicio}(\hat{\theta}) = \mathrm{E}(\hat{\theta} - \theta)$$

- Exemplo:
  - √ Estimador de máxima verossimilhança de σ^2 de uma variável aleatória normal univariada

$$\mathrm{S}_n^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2}{n} \qquad \text{vicio}(\mathrm{S}_n^2) = -\frac{\sigma^2}{n}$$

- Estimação bootstrap para o viés:
  - √ $\hat{\theta} = S_n^2$.

$$B^* = \mathrm{E}(\theta^* - \hat{\theta}) \qquad \theta^* = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i^* - \bar{X}^*)^2}{n} \qquad \bar{X}^* = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i^*}{n}$$

  - √ Aproximação Monte Carlo para B^*:

$$B_{\text{Monte}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} B_j^*}{N}$$

    - B_j^*: estimativa do viés para a j-ésima reamostra
    - N: quantidade de amostras bootstrap

$$B_j^* = \theta_j^* - \hat{\theta} \qquad \theta_j^* = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_{ij}^* - \bar{X}_j^*)^2}{n}$$

- Comentários:
  - √ Geralmente o objetivo de estimar o viés é corrigir uma estimativa
    - Subtração do valor estimado de seu viés
  - √ Correção funciona quando a redução do quadrado do vício é maior que o aumento da variância
    - De outra maneira a estimativa corrigida pode ser menos precisa que a original
  - √ Correção de viés tem de ser executada com cuidado

Exemplo

- Amostra oriunda de população normal

```
> #Correção de Viés
> set.seed(666)
>   # amostra pequena
> n <- 25
>   # amostra original
> x <- rnorm(n)
> head(x)
[1]  0.7533110  2.0143547 -0.3551345  2.0281678 -2.2168745  0.758396
>   # verdadeiro valor do parâmetro
> theta <- 1
>   # EMV da variância (variância amostral não corrigida)
> theta.hat <- function(x) var(x) * (n - 1)/n
>   # estimativa amostral do parâmetro
> (sigma2.hat <- theta.hat(x)
[1] 1.47103
>   # estimativa parâmetro, erro amostral, vies esperado
> c(sig2.amost = theta.hat(x), erro.amost = theta.hat(x) - theta, bias.esp = - 1/n)
sig2.amost erro.amost   bias.esp
 1.4710295  0.4710295 -0.0400000
```


- Aproximação Monte Carlo para o viés

```
>   # Aproximação Monte Carlo para o viés
>
>   # quantidade de reamostras bootstrap
> N <- 5000
>   # vetor com as estimativas bootstrap de EMV de sigma2
> vetor <- replicate(N, theta.hat(sample(x, n, replace = TRUE)))
>   # estimação de theta.estrela
> theta.star <- mean(vetor)
>   # estimativa bootstrap da variância e estimativa do viés
> c(theta.star, theta.star - theta.hat(x))
[1]  1.41455434 -0.05647518
```


Estimação de Locação

- Médias amostrais
  - √ Estáveis se o 4º momento existir
  - √ Distribuições simétricas unimodais
    - Ex.: normal, t com pelo menos 3 gl
    - Média amostral é boa medida de tendência central
  - √ Estimador de máxima verossimilhança da média de algumas populações
    - Estimador consistente e de mínima variância na classe dos não viciados
    - Caso da normal e exponencial (assimetria forte)

- O que o bootstrap pode oferecer?
  - √ Desnecessária a utilização de bootstrap (principalmente a aproximação Monte Carlo)
  - √ A média de todas as médias bootstrap é a média amostral

Mediana Amostral

- Populações fortemente assimétricas ou com média não definida
  - √ Mediana e moda (no caso de distribuição unimodal) representam melhor o centro da distribuição
- Cauchy:
  - √ Mediana populacional é bem definida e a mediana amostral é estimador consistente

- Mediana bootstrap é estimador consistente da mediana populacional
  - √ Mas não traz vantagem em relação à mediana amostral
- Bootstrap pode ser útil para estimar erro padrão da média e da mediana

Estimação de Dispersão

- Desvio padrão pode ser estimado se o 2º momento existe
- Distribuições normais (ou com formato de sino)
  - √ Regra empírica baseia-se na quantidade de desvios padrão de afastamento da média

- Classe das distribuições com 2º momento definido
  - √ Desigualdade de Chebyshev:

$$\mathrm{P}\{|X-\mu|\geq k\sigma\}\leq\frac{1}{k^2}$$

  - √ Para $k = \sqrt{2}$

$$\mathrm{P}\{\mu-\sqrt{2}\sigma<X<\mu+\sqrt{2}\sigma\}>\frac{1}{2}$$

  - √ Limite na probabilidade de a observação estar k desvios padrão afastada da média (k > 1)
  - √ Ajuda na compreensão da dispersão dos dados

- Cauchy
  - √ Caudas são tão pesadas que não existe média (nem variância)
  - √ Não se aplica a desigualdade de Chebyshev
  - √ Nesses casos, pode-se usar o intervalo interquartílico como medida de variabilidade

Estimação Bootstrap de Erro Padrão

- Seja $\hat{\theta}$ um estimador do parâmetro θ e $\hat{\theta}_i^*$ a estimativa bootstrap baseada na i-ésima amostra bootstrap
  - √ θ^*: média dos $\hat{\theta}_i^*$s
- Estimativa boostrap do erro padrão do estimador $\hat{\theta}$ é dada por:

$$\mathrm{SE}_b = \left\{ \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (\theta_i^* - \theta^*)^2 \right\}^2$$

Estimação do Intervalo Interquartílico

- Estimador natural:
  - √ Diferença entre:
    - 75º percentil da distribuição boostrap
    - 25º percentil da distribuição boostrap
- Usar aproximação bootstrap caso não seja possível cálculo exato.

Intervalos de Confiança

Intervalos de Confiança

- IC bootstrap não são exatos
  - √ Nível de confiança < nível de confiança nominal $(1-\alpha)$
- Se o estimador bootstrap for consistente o IC bootstrap também é consistente
  - √ Nível de confiança se aproxima de $1-\alpha$ quando *n* cresce

Método do Percentil de Efrom

- $\hat{\theta}_i^*$: i-ésima estimativa bootstrap baseada na i-ésima amostra bootstrap, de tamanho n
- Procedimento:
  - √ Ordenar os dados
  - √ Identificar o centro
  - √ Tomar o $\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\times 100\%$ menor valor e o $\frac{\alpha}{2}\times 100\%$ maior valor

- O método percentil não é bom para amostras pequenas e moderadas, para distribuições assimétricas ou de cauda pesada
  - √ Necessárias modificações (bootstrap de ordem superior)

Exemplo

- Surimi
  - √ Proteína de peixe purificada usada na indústria alimentícia
  - √ Resistência do gel de surimi é fator crítico na produção
  - √ Amostra com 40 porções de surimi

- Exploração dos dados

```
>   # amostra de 40 observações de resistência à deformação
> surimi <- c(41.28, 45.16, 34.75, 40.76, 43.61, 39.05, 41.20, 41.02, 41.33,
+   40.61, 40.49, 41.77, 42.07, 44.83, 29.12, 45.59, 41.95, 45.78,
+   42.89, 40.42, 49.31, 44.01, 34.87, 38.60, 39.63, 38.52, 38.52,
+   43.95, 49.08, 50.52, 43.85, 40.64, 45.86, 41.25, 50.35, 45.18,
+   39.67, 43.89, 43.89, 42.16)
> summary(surimi)
   Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
  29.12   40.47   41.86   42.19   44.22   50.52
> c(variancia = var(surimi), desvio = sd(surimi))
variancia    desvio
17.297605  4.159039
```

√ Distribuição dos dados aparenta ser normal

√ Leve assimetria à esquerda

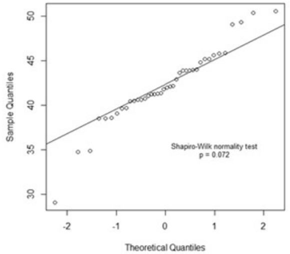
– Distâncias assimétricas da mediana para Q1 e Q3

62

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

√ Verificação normalidade dos dados:

```
>   # teste de normalidade dos dados
> (surimi.test <- shapiro.test(surimi))
        Shapiro-Wilk normality test
data:  surimi
W = 0.94942, p-value = 0.07241
>   # qq-plot
> qqnorm(surimi); qqline(surimi)
> text(1, 35, cex = 0.8,
+ paste0(surimi.test$method,"\np = ", round(surimi.test$p.value, 3)))
```



√ Aparentemente há ocorrência de valores atípicos nas extremidades.

63

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

- Intervalo de confiança t:

```
>   # IC t com 95% - assumindo normalidade (tamanho amostral)
> t.test(surimi)$conf.int[1:2]
[1] 40.85562 43.51588
```

√ Assumindo normalidade e tamanho amostral

√ Espera-se que seja uma boa aproximação

64

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

Método Percentil t de Efrom

- Suponha um parâmetro θ e uma estimativa θ_h para ele, obtida por amostra original de tamanho n
- Seja θ^* a estimativa bootstrap baseada na amostra original
- Suponha que haja um estimativa S_h do desvio padrão de θ_h e uma estimativa bootstrap S^* para S_h

√ S^* é específica à uma amostra bootstrap

65

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

- Seja a estatística bootstrap T^*:

$$\mathrm{T}^* = \frac{\theta^* - \theta_h}{S^*}$$

√ Versão bootstrap padronizada e centrada

√ Análoga a $\mathrm{T} = \frac{\theta_h - \theta}{S_h}$

√ Se θ é a média populacional e θ_h, a média amostral

– T é uma quantidade pivotal se a amostra é normalmente distribuída

$(T \sim t_{n-1})$

√ Quantidade pivotal: quantidade aleatória que não depende de parâmetro desconhecido

66

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

- Pivoteamento:

$$\mathrm{P}\{-c < T_{n-1} < c\} = \mathrm{P}\left\{-c < \frac{\theta_h - \theta}{S_h} < c\right\}$$
$$= \mathrm{P}\{-\theta_h - cS_h < -\theta < -\theta_h + cS_h\}$$
$$= \mathrm{P}\{\theta_h - cS_h < \theta < \theta_h + cS_h\}$$

- No caso da estatística bootstrap T^* para a média populacional:

√ T^* é assintoticamente pivotal

– A distribuição se torna independente dos parâmetros e seus percentis convergem para os percentis da distribuição t

√ Construção de intervalos bootstrap mais precisos que os obtidos pelo método percentil

67

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

- Caso mais geral:

√ Seja θ um parâmetro mais complicado que a média

√ θ^* : estimativa bootstrap que necessita aproximação Monte Carlo para gerar o intervalo de confiança

68

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

- Procedimento:

√ Para cada uma de B amostras bootstrap, há uma estimativa θ^* e pode-se calcular sua estatística T^*

√ Ordenam-se os B valores de T^*

√ Intervalo aproximado com $100(1-2\alpha)\%$ de confiança é obtido por

$$(\theta_h - \mathrm{T}^*_{(1-\alpha)}\, S_h; \theta_h + \mathrm{T}^*_\alpha\, S_h)$$

– t^*: $100(1-2\alpha)$ percentil de uma t_{n-1}

– S^*: estimativa bootstrap do desvio padrão de θ

69

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

Intervalo de Confiança Boostrap t

- Hesterberg et al. (2003)
  - √ Usa o bootstrap para estimar o erro padrão
  - √ Recomendado apenas se a distribuição bootstrap for aproximadamente normal
  - √ É menos geral que o procedimento percentil de Efrom

- Procedimento para intervalo com $100(1-2\alpha)\%$ de confiança:

$$(\theta_h - t^* S^*; \theta_h + t^* S^*)$$

  - – $t^*_{1-\alpha}$: percentil 100α dos T^*s
  - – S^*: estimador bootstrap do desvio padrão de θ
- Limitação:
  - √ São necessários S_h e a versão bootstrap S^*
- Solução:
  - √ Quando θ é um parâmetro complicado usar double bootstrap (ou nested ou iterated)

Exemplo

- Intervalo de confiança bootstrap para μ:
  - √ Conjunto de dados `surimi`:
  - √ Erro padrão de $\bar{x}$: $S_h = \dfrac{S}{\sqrt{n}}$
    - – Aceitável $S_h = \frac{S}{\sqrt{n}}$ para amostras moderadas ou grandes (n ≥ 30)

```
>   # intervalo de confiança bootstrap
> source("surimi.R")
> set.seed(666)
> n <- length(surimi)
> (u0 <- mean(surimi) )
[1] 42.18575
> (Sh <- sd(surimi)/sqrt(n))
[1] 0.6576018
```


- IC bootstrap – método percentil

```
>   # qute de amostras bootstrap
> B <- 1000
>   # cálculo média e estatística t por amostra bootstrap
> est.boot <- function(x) {list(med = mean(x), te = sqrt(n)*(mean(x)-u0)/sd(x))}
> matriz <- replicate(B, est.boot(sample(surimi, n, replace = T)))
> amostras.boot <- matrix(unlist(matriz),ncol = 2, byrow=T)
> colnames(amostras.boot) <- c("theta", "t")
> theta.star <- amostras.boot[, "theta"]
> t.star <- amostras.boot[, "t"]
>   # compara média amostral com as médias bootstrap
> c(u0, mean(theta.star))
[1] 42.18575 42.17262
>   # comapara erro padrão da amostra com erro padrão bootstrap
> c(Sh, sd(theta.star))
[1] 0.6576018 0.6455912
>   # aparenta simetria e normalidade?
> summary(t.star)
    Min.  1st Qu.   Median     Mean  3rd Qu.     Max.
-2.85347 -0.64650  0.02182  0.01559  0.64791  3.57593
```

$\theta_h = 42,186$

$\theta^* = 42,173$

$S_h = 0,658$

$S^* = 0,646$

  - √ θ_h é bastante próxima da média bootstrap
  - √ Erros padrão não tão próximos
  - √ t^* aparentemente simétrico

- IC bootstrap – método percentil

```
>   # quantis dos percentis t bootstrap 2.5% 97.5%
> quantile(t.star, probs = c(0.025,0.975))
     2.5%     97.5%
-1.954212  2.214949
>   # quantis de t com n-1 graus de liberdade
> qt(c(0.025,0.975), n - 1)
[1] -2.022691  2.022691
>   # intervalo de confiança bootstrap percentil t
> u0 + quantile(t.star, probs = c(0.025,0.975)) * Sh
    2.5%    97.5%
40.90066 43.64230
>   # intervalo de confiança t de student
> u0 + qt(c(0.025,0.975), n - 1) * Sh
[1] 40.85562 43.51588
```

$\text{quantis}_{t^*} = (-1,95; 2,21)$

$\text{quantis}_{t_{39}} = (-2,02; 2,02)$

$\text{IC}_b = (40,90; 43,64)$

$\text{IC}_t = (40,86; 43,52)$

√ Quantis da t^* são diferentes de quantis da t_{39}
  - Refletem assimetria da distribuição subjacente.

√ Proximidade dos dois intervalos sugere precisão de ambos

- IC bootstrap – pacote “bootstrap”

```
> # usando o pacote bootstrap
>
> set.seed(666)
> library("bootstrap")
>   # função para erro padrão da amostra bootstrap
> sdmean <- function(x, ...) {sqrt(var(x)/length(x))}
>   # função para cálculo IC bootstrap
> boott(surimi, theta = mean, sdfun = sdmean, nboott = 1000,
+ perc = c(0.025,0.975) #bootstrap percentile t
+ )
$`confpoints`
        0.025    0.975
[1,] 40.90306 43.48429
```

$\text{IC}_b = (40,90; 43,64)$

$\text{IC}_{bp} = (40,90; 43,48$

$\text{IC}_t = (40,86; 43,52)$

√ Resultado próximo dos resultados anteriores

Bootstrap Iterado

- Há numerosos procedimentos para iteração bootstrap
- Intervalos de confiança aproximados com precisão de 1ª ordem:
  √ Diferença entre verdadeira probabilidade de cobertura e probabilidade de cobertura limite tende a zero a uma taxa $n^{-1/2}$.
  √ Alguns procedimentos:
  - Padrão
  - Percentil bootstrap

- Intervalos de confiança aproximados com precisão de 2ª ordem:
  √ Diferença entre verdadeira probabilidade de cobertura e probabilidade de cobertura limite tende a zero a uma taxa n^{-1}.
  √ Alguns procedimentos:
  - Percentil t
  - BCa
  - Bootstrp duplo

  √ Dados 2 Ics de precisão de 2ª ordem. Qual a melhor escolha
  - Menor comprimento esperado

Exemplo

- Intervalo de confiança bootstrap duplo para μ:
  - √ Conjunto de dados `surimi`:

```
> # double bootstrap - "bootstrap" package
> set.seed(666)
>   # IC bootstrap 95% - percentile t c/ bootstrap aninhado
> boott(surimi, theta = mean, nbootsd = 100, nboott = 1000,
+ perc = c(0.025,0.975))
$`confpoints`
        0.025    0.975
[1,] 40.78245 43.52531
```

$$\mathrm{IC}_b = (40,90; 43,64)$$
$$\mathrm{IC}_{bp} = (40,90; 43,48$$
$$\mathrm{IC}_t = (40,86; 43,52)$$

  - √ Estimativa boostrap do erro padrão
    - Bootstrap interno de 100 reamostras
  - √ Estimativa bootstrap do IC
    - Bootstratp externo com om 1.000 reamostras

- Comentários:

$$\mathrm{IC}_b = (40,90; 43,64)$$
$$\mathrm{IC}_{bp} = (40,90; 43,48$$
$$\mathrm{IC}_{bd} = (40,78; 43,52$$
$$\mathrm{IC}_t = (40,86; 43,52)$$

  - √ Intervalo com 95% de confiança bastante próximo dos anteriores
  - √ Não exige fórmula para o erro padrão do estimador
  - √ Pode ser usado com qualquer estatística
    - Custo computacional pode ser alto

Intervalo de Confiança Bootstrap com Correção de Viés

- Incorporam procedimento para correção de vício do bootstrap
- Alguns procedimentos:
  - √ Bootstrap BC (*Bias correction*)
    - Trabalha bem com coeficiente de correlação bivariado
      - Nesse caso o método percentil não trabalha bem
    - Não tem precisão de 2ª ordem

- √ Bootstrap BCa:
  - Incorpora constante de aceleração na correção de viés
  - Baseado no 3º momento
    - Corrige assimetria
- √ Percentil ajustado (Davison e Hinkely, 1997)
  - Tem precisão de 2ª ordem
- √ ABC
  - Muito próxima da precisão do BCa
  - Embora tenha um parâmetro a mais, é mais simples e mais rápido que o método BCa.

Exemplo

- Intervalo de confiança bootstrap BCa:
  - √ Pacote `boot`:

```
 library("boot")
> # correção de viés - bootstrap BCa e ABC
>
>
> library("boot")
> set.seed(666)
> # IC bootstrap BCa
>   # estimação dados os dados x e o conjunto de índices i
> fboot <- function(x, i) mean(x[i])
>   # gera as estimativas bootstrap
> bs <- boot(surimi, fboot, R = 1000)
>   # IC 95% bootstrap BCa
> boot.ci(bs, type = "bca" , conf = 0.95)
Intervals :
Level       BCa
95%   (40.73, 43.33 )
```

$\mathrm{IC}_b = (40,90; 43,64)$

$\mathrm{IC}_{bp} = (40,90; 43,48$

$\mathrm{IC}_{bd} = (40,78; 43,52$

$\mathrm{IC}_t = (40,86; 43,52)$

  - √ Estimativa comparável com as anteriores

- Intervalo de confiança bootstrap ABC:
  - √ Pacote "`boot`"

```
> # IC bootstrap ABC
>
>   # usa média pondereada
> fabc <- function(x, w) w %*% x
>   # IC 95% bootstrap ABC
> abc.ci(surimi, fabc, conf = 0.95)
[1]  0.95000 40.84506 43.39569
```

$\mathrm{IC}_b = (40,90; 43,64)$

$\mathrm{IC}_{bp} = (40,90; 43,48$

$\mathrm{IC}_{bd} = (40,78; 43,52$

$\mathrm{IC}_{BCa} = (40,73; 43,33)$

$\mathrm{IC}_{ABC} = (40,85; 43,40)$

$\mathrm{IC}_t = (40,86; 43,52)$

  - √ Resultado próximo dos anteriores

Bootstrap Paramétrico

Bootstrap Paramétrico

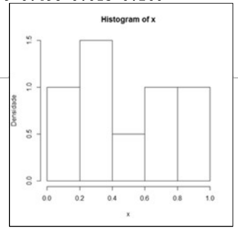
- Assume-se que F pertence a uma família paramétrica
- Amostragem com reposição a partir dessa distribuição
  - √ Se é usado o método de máxima verossimilhança para estimar os parâmetros de F, a abordagem é essencialmente a mesma que a de Máxima Verossimilhança

- Em geral, executar o bootstrap acrescenta pouco nos problemas paramétricos
- Em problemas complexos, pode ser útil pelo menos uma parametrização parcial
  - √ Modelo de riscos proporcionais de Cox
- Comparação entre bootstrap paramétrico e não paramétrico pode auxiliar na verificação das suposições paramétricas

√ Exemplo:

– Qual é o valor esperado da mediana de uma amostra aleatória de tamanho n = 51, de uma população Exponencial (1)? E sua variância?

```
> # geração de uma amostra uniforme
> set.seed(666)
> options(digits = 2)
> (x <- runif(10))
 [1] 0.774 0.197 0.978 0.201 0.361 0.743 0.979 0.498 0.013 0.260
> hist(x, freq = F, ylab = "Densidade")
> mean(x)
[1] 0.5
```

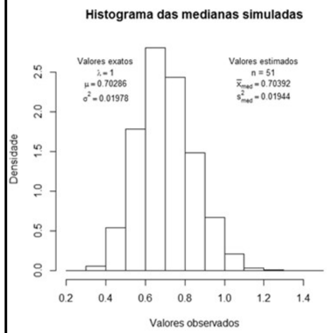


√ Mediana amostral

– Valor estimado da esperança e variância

```
> # valor estimado da esperança e da variância da mediana amostral
> set.seed(666)
> medianas <- replicate(10000, median(rexp(n = ene, rate = taxa)))
> (media <- mean(medianas))
 [1] 0.7039184
> (variancia <- var(medianas))
[1] 0.01943892
> # histograma das 10.000 réplicas
> hist(medianas, freq = F, xlab = "Valores observados", ylab =
"Densidade",
+ main = "Histograma das medianas simuladas")
> text(0.4, 2.65, "Valores exatos", cex = 0.8)
> text(0.4, 2.50, expression(lambda == 1), cex = 0.8)
> text(0.4, 2.35, expression(mu == 0.70286), cex = 0.8)
> text(0.4, 2.20, expression(sigma^2 == 0.01978), cex = 0.8)
> text(1.2, 2.65, "Valores estimados", cex = 0.8)
> text(1.2, 2.5, paste("n =", ene), cex = 0.8)
> text(1.2, 2.35, bquote(bar(x)[med] == .(round(media, 5))), cex = 0.8)
> text(1.2, 2.20, bquote(s[med]^2 == .(round(variancia, 5))), cex = 0.8)
```


√ Histograma dos valores observados



√ Construção de intervalo de confiança para a mediana.

√ Poderia ser aproximada pela normal?

Modelos de Regressão por Bootstrap

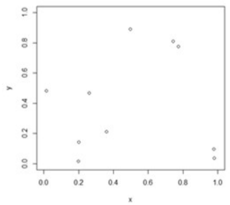
Estimação Bivariada

- Reamostragem de mais de uma variável:
  - √ Medidas de várias variáveis por indivíduo
    - Reamostrados os indivíduos (linhas)

Exemplo

- Estimação de correlação

```
> # reamostragem de mais de uma variável
> set.seed(666)
> (xy <- data.frame(x = runif(10), y = runif(10)))
       x     y
1  0.774 0.776
2  0.197 0.016
3  0.978 0.096
4  0.201 0.142
5  0.361 0.211
6  0.743 0.811
7  0.979 0.037
8  0.498 0.892
9  0.013 0.483
10 0.260 0.467
> plot(y ~x, data = xy, xlim = c(0, 1), ylim = c(0, 1))
> # correlação original
> cor(xy$x, xy$y)
[1] 0.043
>   # IC paramétrico para correlação
> cor.test(xy$x, xy$y)$conf.int[1:2]
[1] -0.6030740  0.6547849
```



√ Reamostragem de uma amostra:

```
> # uma amostra bootstrap
> (xy.boot <- xy[sample(1:nrow(xy), replace = TRUE),])
        x     y
10  0.260 0.467
7   0.979 0.037
1   0.774 0.776
2   0.197 0.016
9   0.013 0.483
3   0.978 0.096
1.1 0.774 0.776
7.1 0.979 0.037
6   0.743 0.811
9.1 0.013 0.483
> # estimativa bootstrap da correlação
> cor(xy.boot$x, xy.boot$y)
[1] -0.14
```

```
> xy
   x     y
1  0.774 0.776
2  0.197 0.016
3  0.978 0.096
4  0.201 0.142
5  0.361 0.211
6  0.743 0.811
7  0.979 0.037
8  0.498 0.892
9  0.013 0.483
10 0.260 0.467
```

√ Reamostragem de duas amostras:

```
> # duas amostras bootstrap
> (xy.boot2 <- replicate(2, xy[sample(1:nrow(xy),replace=T),], simplify = F))
  [[1]]
       x     y
5   0.361 0.211
4   0.201 0.142
9   0.013 0.483
6   0.743 0.811
7   0.979 0.037
5.1 0.361 0.211
3   0.978 0.096
10  0.260 0.467
8   0.498 0.892
6.1 0.743 0.811
```

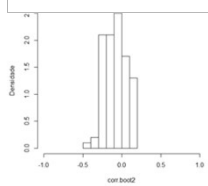
```
[[2]]
       x     y
3    0.978 0.096
6    0.743 0.811
2    0.197 0.016
10   0.260 0.467
9    0.013 0.483
8    0.498 0.892
4    0.201 0.142
7    0.979 0.037
6.1  0.743 0.811
10.1 0.260 0.467
```

```
> xy
   x     y
1  0.774 0.776
2  0.197 0.016
3  0.978 0.096
4  0.201 0.142
5  0.361 0.211
6  0.743 0.811
7  0.979 0.037
8  0.498 0.892
9  0.013 0.483
10 0.260 0.467
```

```
> is.list(xy.boot2)
[1] TRUE
> sapply(xy.boot2, function(mat) cor(mat$x, mat$y))
[1] -0.0515  0.0025
```


√ Reamostragem com 100 réplicas:

```
> # 100 amostras bootstrap, com cálculo da correlação de cada reamostra
> xy.boot <- replicate(100, xy[sample(1:nrow(xy),replace=T),], simplify
= F)
> corr.boot <- sapply(xy.boot, function(mat) cor(mat$x, mat$y))
> hist(corr.boot, freq = F, ylab = "Densidade")
```



√ A precisão da estimativa do coeficiente de correlação amostral melhorou?

– Estimação de intervalo com 95% de confiança:

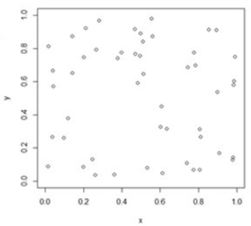
```
> # intervalo com 95% de confiança aproximado para a média
> quantile(corr.boot2, probs = c(0.025, 0.975))
 2.5%   98%
-0.31  0.17
```

$$\text{IC}_{\text{par.}} = (-0,60; 0,65)$$

√ Reamostragem de mais de uma variável:

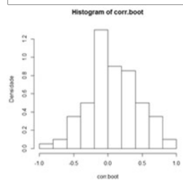
– Amostra bivariada original de tamanho 50

```
> # amostra bivariada de tamanho 50
> set.seed(666)
> options(digits = 2)
> xy2 <- data.frame(x = runif(50), y = runif(50))
> head(xy2)
    x     y
1 0.77 0.069
2 0.20 0.085
3 0.98 0.130
4 0.20 0.746
5 0.36 0.039
6 0.74 0.686
> plot(y ~ x, data = xy2, xlim = c(0, 1), ylim = c(0, 1))
> # correlação original
> cor(xy2$x, xy2$y)
[1] -0.077
```



– Reamostragem com 100 réplicas:

```
> # 100 amostras bootstrap, com cálculo da correlação de cada reamostra
> xy2.boot <- replicate(100, xy2[sample(1:nrow(xy2),replace = T),],
simplify = F)
> corr.boot2 <- sapply(xy2.boot, function(mat) cor(mat$x, mat$y))
> hist(corr.boot2, freq = F, ylab = "Densidade")
```



√ Como seria uma estimativa bootstrap da correlação se amostra fosse maior?

– Estimação de intervalo com 95% de confiança:

```
> # intervalo com 95% de confiança aproximado para a média
> quantile(corr.boot, probs = c(0.025, 0.975))
 2.5%   98%
-0.61  0.77
```

Bootsrapping em Regressão

- Estimação bootstrap de modelo de regressão:
  - √ Bootstrap de vetores (ou pares)
  - √ Bootstrap de resíduos
- Ambas abordagens podem ser usadas tanto em regressão linear quanto não linear

Regressão Linear

- Estimadores de mínimos quadrados:
  - √ Modelo é razoável se o termo de erro pode ser considerado iid, com média zero e variância constante σ^2
  - √ Estimação bootstrap não agregará nada
- Teorema de Gauss-Markov
  - √ EMQ dos parâmetros de regressão são não viciadas, com a menor variância na classe dos estimadores lineares não viciados

- Matriz de covariâncias de $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$:
  - √ $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$: EMQ de $\boldsymbol{\beta}$.

    $$\mathbf{\Sigma} = \sigma^2(\mathbf{XX})^{-1}, \text{ se } (\mathbf{XX})^{-1} \text{ existir.}$$
  - √ Se $\hat{\sigma}^2$ é o EMQ da variância residual, o estimador usual de $\mathbf{\Sigma}$ é: $\hat{\mathbf{\Sigma}} = \hat{\sigma}^2(\mathbf{XX})^{-1}$.
- Caso o erro possa ser considerado normal
  - √ EMQ tem a propriedade adicional de ser estimador de mínimos quadrados
  - √ Estimador mais eficiente

Violações do Modelo Normal

- As estimativas não são robustas se as hipóteses do modelo forem violadas
  - √ Erros com cauda pesada ou com outliers
    - EMQ darão muito peso aos outliers, tentando ajustá-los em detrimento do restantes dos dados
    - Outliers têm grande influência nos parâmetros da regressão quando sua remoção acarreta mudança importante dos parâmetros
  - √ Procedimentos robustos a outliers:
    - Desvios absolutos mínimos, Estimação-M, medianas repetidas

- Independente do procedimento de estimação dos parâmetros da regressão
  - √ Se interesse é construção de IC's para parâmetros e IP's para observações futuras
    - Necessário conhecimento sobre distribuição de ϵ
  - √ Caso distribuição do erros seja normal
    - IC's e IP's são calculados diretamente
- Bootstrap é útil na construção de IC's e IP's em modelos de regressão.

- Outras complicações que podem ser solucionadas pelo bootstrap
  - √ Heterocedasticidade
  - √ Não linearidade dos parâmetros do modelo
  - √ Viés devido a transformações

Bootstrap de Vetores (ou Pares)

- Amostra original:
  - √ n vetores com dimensão p+1:

$$(y_i, x_{1i}, x_{2i}, \ldots, x_{pi}),\ i = 1, 2, \ldots, n.$$

- Amostra bootstrap:
  - √ Reamostragem com reposição de n vetores de dimensão p+1
  - √ Ajuste de modelo em cada amostra bootstrap

- Considera que as observações são iid, possivelmente com estrutura de correlação
- Método é mais robusto a desvios de normalidade e/ou na presença de erro de especificação dos termos do modelo

Bootstrap dos Resíduos

- Amostra original:
  - √ Ajusta-se um modelo aos dados, calculando-se os resíduos do modelo
- Amostra bootstrap:
  - √ Reamostragem com reposição dos resíduos
  - √ Obtenção de pseudo amostra com estimação do resíduo bootstrap às estimativas
  - √ Ajuste de modelo à pseudo amostra

- Modelo:

$$y_i = g_i(\boldsymbol{\beta}) + \epsilon_i,\ i = 1, 2, \ldots, n.$$

  - √ g_i: função de forma conhecida para um conjunto de covariáveis (X_1, X_2, ..., X_p)
    - Para regressão linear, é a mesma função para cada i e é linear nos componentes de $\boldsymbol{\beta}$.
  - √ $\boldsymbol{\beta}$: vetor de dimensão p associados às covariáveis
  - √ ϵ_i : erro iid de uma distribuição F desconhecida
  - √ Assume-se que F está centrada em zero
    - Em geral, exige-se que a mediana seja zero

- Estimação de $\boldsymbol{\beta}$:
  - √ Determinar valores que minimizam uma distância de $\lambda(\boldsymbol{\beta})$ até os dados observados $(y_1, y_2, \ldots, y_n)$

$$\lambda(\boldsymbol{\beta}) = (g_1(\boldsymbol{\beta}), g_2(\boldsymbol{\beta}), \ldots, g_n(\boldsymbol{\beta}))$$

  - √ $D(y, \lambda(\boldsymbol{\beta}))$: medida de distância:
    - Critério dos mínimos quadrados:

$$\mathrm{D}(y, \lambda(\boldsymbol{\beta})) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - g_i(\boldsymbol{\beta}))^2.$$

    - Critério dos mínimos desvios absolutos

$$\mathrm{D}(y, \lambda(\boldsymbol{\beta})) = \sum_{i=1}^{n} |y_i - g_i(\boldsymbol{\beta}|.$$

- Estimativa $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ são os valores de $\boldsymbol{\beta}$ tais que:

$$\mathrm{D}(y, \lambda(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \min_{\boldsymbol{\beta}} \mathrm{D}(y, \lambda(\boldsymbol{\beta}).$$

- Resíduos são definidos como:

$$\hat{\epsilon}_i = y_i - g_i(\hat{\boldsymbol{\beta}}),\ \text{para } i = 1, 2, \ldots, n.$$

- Geração dos resíduos bootstrap:
  - √ Utiliza-se a função de distribuição empírica para os resíduos
    - Probabilidade de 1/n para cada resíduo ϵ_i
    - Escolha com reposição de amostra com n resíduos
      $$(\epsilon_1^*, \epsilon_2^*, \ldots, \epsilon_n^*).$$
    - Geração de amostra bootstrap de observações
      $$y_i^* = g_i(\hat{\beta}) + \epsilon_i^*,\ i = 1, 2, \ldots, n.$$
    - Para cada amostra bootstrap estima-se $\boldsymbol{\beta}^*$ tal que:
      $$\mathrm{D}(y^*, \lambda(\boldsymbol{\beta}^*)) = \min_{\boldsymbol{\beta}} \mathrm{D}(y^*, \lambda(\boldsymbol{\beta})).$$

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018 118

- Aproximação Monte Carlo:
  - √ Repetição do processo B vezes
- Estimativa bootstrap para a matriz de covariâncias de $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$:
  $$\boldsymbol{\Sigma}^* = \frac{1}{B-1}\sum_{j=1}^{B}(\boldsymbol{\beta}_j^* - \boldsymbol{\beta}^*)(\boldsymbol{\beta}_j^* - \boldsymbol{\beta}^*)'$$
  - √ onde:
    - $\boldsymbol{\beta}_j^*$: estimativa de $\boldsymbol{\beta}$ da j-ésima amostra bootstrap
      $$\boldsymbol{\beta}^* = \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B}\boldsymbol{\beta}_j^*.$$

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018 119

- Bootstrapping de resíduos:
  - √ Aplicável quando for assumido modelo paramétrico de regressão
  - √ Funciona bem quando os termos dos resíduos são normais
  - √ Na prática podemos não estar seguros de que a forma paramétrica está correta
    - Nesse caso, melhor usar bootstrap de vetores

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018 120

Bootstrap Vetores e Resíduos

- Comparação dos métodos:
  - √ São assintoticamente equivalentes se modelo está correto
  - √ Desempenho pode ser diferente em amostras pequenas
  - √ Bootstrap por vetores é menos sensível às hipóteses do modelo
    - Pode funcionar razoavelmente quando hipóteses são violadas
    - Método usa o modelo explicitamente o modelo

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018 121

Heterocedasticidade

- Métodos que funcionam bem quando a variância residual é heterocedástica
  - √ Bootstrap por vetores
    - Funciona melhor que o bootstrap de resíduos
  - √ Resíduos bootstrap modificados
    - *Wild bootstrap*

Regressão Não Linear

- Modelos não-lineares
  - √ Permitem aproximações locais lineares por meio de expansões por séries de Taylor
  - √ Classe de modelos altamente não lineares em que as aproximações lineares não funcionam
- Efrom (1982):
  - √ Bootstrap pode ser aplicado a quase todo problema não-linear
    - Não necessitam ter formas não-lineares diferenciáveis

- Exemplos:
  - √ Modelo linear: $f(x,\theta) = \theta_1 + \theta_2\,\mathrm{e}^{x} + \epsilon.$
  - √ Modelo não-linear: $g(x,\theta) = \theta_1 + \theta_2\,\mathrm{e}^{\theta_3 x} + \epsilon.$
    - $e^{\theta_3 x}$ não é função linear de θ_3.

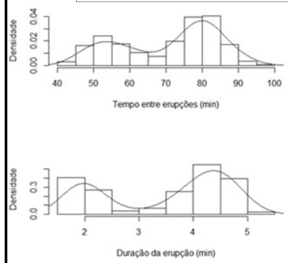
Exemplo

- Conjunto de dados `faithful`:
  - √ Tempo entre erupções e duração de erupções de gêiser denominado Old Faithful

```
>   # carregamento do conjunto de dados
> help(faithful)
> str(faithful)
'data.frame':   272 obs. of  2 variables:
 $ eruptions: num  3.6 1.8 3.33 2.28 4.53 ...
 $ waiting  : num  79 54 74 62 85 55 88 85 51 85 ...
> dim(faithful)
[1] 272   2
> head(faithful)
eruptions waiting
1     3.600      79
2     1.800      54
3     3.333      74
4     2.283      62
```

√ Histograma das variáveis:

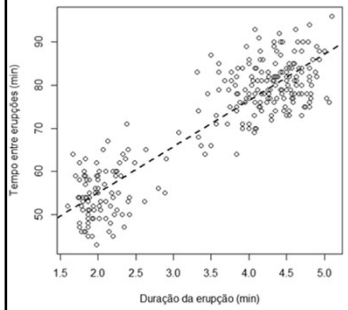
```
> par(mfrow = c(2, 1))
>   # eruptions
> hist(faithful$waiting, freq = F, ylab = "Densidade", main = "",
+ xlab = "Tempo entre erupções (min)")
> lines(density(faithful$waiting), col = "blue")
>   # durations
> hist(faithful$eruption, freq = F, ylab = "Densidade", main = "",
+ xlab = "Duração da erupção (min)")
> lines(density(faithful$eruption), col = "blue")
> par(mfrow = c(1, 1))
```



√ Variáveis com bimodalidade

√ Plot das variáveis:

```
>   # plot dos dados
> plot(waiting ~ eruptions, data = faithful, ylab = "Tempo entre erupções (min)",
+ xlab = "Duração da erupção (min)")
>   # modelo linear
> ml.1 <- lm(waiting ~ eruptions, data = faithful)
> abline(ml.1, col = "blue", lty = 2, lwd = 2)
```



√ Apresenta dois clusters

- Regiões de bimodalidade

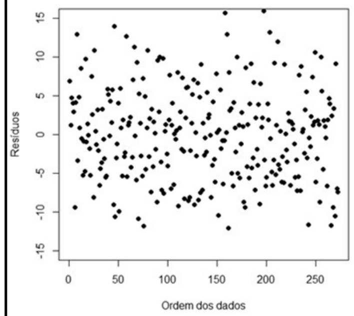
√ Ajuste do modelo linear

```
>   # modelo linear
> ml.1 <- lm(waiting ~ eruptions, data = faithful)
> summary(ml.1)
Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-12.0796  -4.4831   0.2122   3.9246  15.9719

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  33.4744     1.1549   28.98   <2e-16 ***
eruptions    10.7296     0.3148   34.09   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 5.914 on 270 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8115,    Adjusted R-squared:  0.8108
F-statistic:  1162 on 1 and 270 DF,  p-value: < 2.2e-16
>   # intervalos de confiança parâmetros
> confint(ml.1)
               2.5 %   97.5 %
(Intercept) 31.20069 35.74810
eruptions   10.10996 11.34932
```


√ Verificação do modelo:

- Independência dos resíduos

```
>   # Independência dos resíduos
> plot(ml.1$residuals, pch = 16, ylim = c(-15, 15), ylab = "Resíduos",
+ xlab = "Ordem dos dados")
```

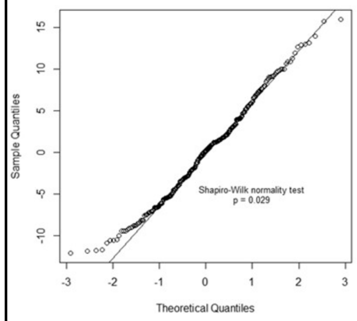


√ Desvio em relação aos valores positivos dos resíduos

√ Verificação do modelo:

– Normalidade

```
>   # normalidade dos resíduos
> qqnorm(ml.1$residuals); qqline(ml.1$residuals)
```



- √ Desvios acentuados na extremidade inferior
- √ Rejeita-se a hipótese de normalidade

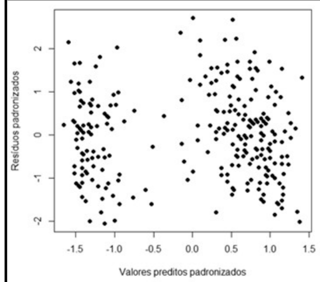
134

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

√ Verificação do modelo:

– Homogeneidade da variância

```
>   # Homogeneidade da variância
> preditos.1 <- fitted(ml.1)
> PadPred.1 <- scale(preditos.1)
> PadRes.1 <- scale(ml.1$res)
> plot(PadPred.1, PadRes.1, pch = 16, xlab = "Valores preditos padronizados",
+ ylab = "Resíduos padronizados")
```



√ Clusters no gráfico

135

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

• Intervalos de confiança bootstrap

√ Método dos vetores

```
> # bootstrap dos vetores
> B <- 10000
>   # geração das amostras bootstrap
> Tboot <- matrix(0, nrow = B,ncol = 2)
> for(i in 1:B){
+ s <- 1:272
+ u <- sample(s, 272, replace = T)
+ f <- faithful[u, ]
+ x <- f[, 1]
+ y <- f[, 2]
+ ajuste <- lm(y ~ x)
+ Tboot[i, ] <- summary(ajuste)$coefficients[, 1]
+ }
```

136

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

√ Estimação bootstrap dos parâmetros

```
>   # estimativas bootstrap pontuais
> beta0 <- mean(Tboot[, 1])
> beta1 <- mean(Tboot[,2])
> beta0
[1] 33.47715
> beta1
[1] 10.73111
>
>   # estimativas bootstrap intervalares
> beta0.IC <- quantile(Tboot[,1], prob = c(0.025, 0.975))
> beta1.IC <- quantile(Tboot[,2], prob = c(0.025, 0.975))
> beta0.IC
    2.5%    97.5%
31.31975 35.65300
> beta1.IC
    2.5%    97.5%
10.14290 11.31889
```

$\hat{\beta}_0 = 33{,}474$

$\hat{\beta}_1 = 10{,}730$

$\mathrm{IC}_{\beta_0} = (31{,}20; 35{,}75)$

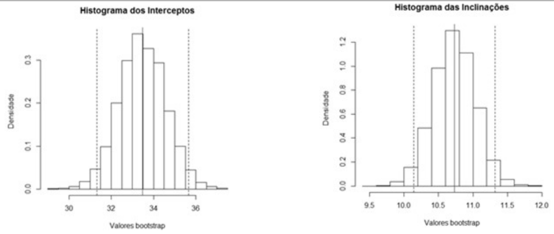
$\mathrm{IC}_{\beta_1} = (10{,}11; 11{,}35)$

137

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

√ Distribuição dos parâmetros bootstrap:

```
>   # histograma dos interceptos
> hist(Tboot[, 1], main = "Histograma dos Interceptos", freq = F,
+ xlab = "Valores bootstrap", ylab = "Densidade")
> abline(v = beta0, col = "red")
> abline(v = quantile(Tboot[, 1], prob = c(0.025)), col = "blue", lty = 2)
> abline(v = quantile(Tboot[, 1], prob = c(0.975)), col = "blue", lty = 2)
>   # histograma das inclinações
> hist(Tboot[, 2], main = "Histograma das Inclinações", freq = F,
+ xlab = "Valores bootstrap", ylab = "Densidade")
> abline(v = beta1, col = "red")
> abline(v = quantile(Tboot[, 2], prob = c(0.025)), col = "blue", lty = 2)
> abline(v = quantile(Tboot[, 2], prob = c(0.975)), col = "blue", lty = 2)
```



- Intervalos de confiança bootstrap

√ Método dos resíduos

```
> # bootstrap dos resíduos
>
> x <- faithful$eruptions
> f <- fitted(ml.1)
> e <- residuals(ml.1)
>   # quantidade de amostras bootstrap
> B <- 10000
>   # Geração das amostras bootstrap
> Tboot <- matrix(0, nrow = B, ncol = 2)
> for(i in 1:B){
+ e.star <- sample(e, 272, replace = T)
+ y.star <- f + e.star
+ Tboot[i, ] <- summary(lm(y.star ~ x))$coefficients[, 1]
+ }
```


√ Estimação bootstrap dos parâmetros

```
>   # estimativas bootstrap pontuais
>   # Estimação bootstrap pontual
> beta0 <- mean(Tboot[, 1])
> beta1 <- mean(Tboot[, 2])
> beta0
[1] 33.49229
> beta1
[1] 10.72536
>
>   # estimativas bootstrap intervalares
> beta0.IC <- quantile(Tboot[,1], prob = c(0.025, 0.975))
> beta1.IC <- quantile(Tboot[,2], prob = c(0.025, 0.975))
> beta0.IC
    2.5%    97.5%
31.24205 35.80458
> beta1.IC
    2.5%    97.5%
10.09827 11.32948
```

$\hat{\beta}_0 = 33,474$ $\qquad \hat{\beta}_0^* = 33,472$

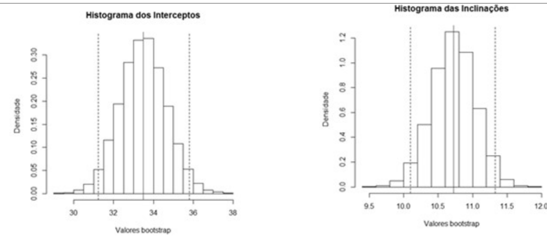
$\hat{\beta}_1 = 10,730$ $\qquad \hat{\beta}_1^* = 10,731$

$\text{IC}_{\beta_0} = (31,20; 35,75)$ $\qquad \text{IC}^*_{\beta_0} = (31,32; 35,65)$

$\text{IC}_{\beta_1} = (10,11; 11,35)$ $\qquad \text{IC}^*_{\beta_1} = (10,13; 11,32)$

√ Distribuição dos parâmetros bootstrap:

```
>   # histograma dos interceptos
> hist(Tboot[, 1], main = "Histograma dos Interceptos", freq = F,
+ xlab = "Valores bootstrap", ylab = "Densidade")
> abline(v = beta0, col = "red")
> abline(v = quantile(Tboot[, 1], prob = c(0.025)), col = "blue", lty = 2)
> abline(v = quantile(Tboot[, 1], prob = c(0.975)), col = "blue", lty = 2)
>   # histograma das inclinações
> hist(Tboot[, 2], main = "Histograma das Inclinações", freq = F,
+ xlab = "Valores bootstrap", ylab = "Densidade")
> abline(v = beta1, col = "red")
> abline(v = quantile(Tboot[, 2], prob = c(0.025)), col = "blue", lty = 2)
> abline(v = quantile(Tboot[, 2], prob = c(0.975)), col = "blue", lty = 2)
```



Seleção de Variáveis

- Há muitas maneiras de conduzir seleção de variáveis em problemas de regressão
  - √ Critérios de escolha:
    - R^2
    - AIC – *Akaike Information Criterion*
    - BIC – *Bayesian Information Criterion*
    - Teste F *stepwise*
    - Complexidade estocástica
  - √ Algumas dessas abordagens podem ser aplicadas em regressão não linear

Exemplo

- Considere o modelo:

$$y = 0,5 + 0,5x + 0,2x^2 + z + 0,1xz + \epsilon$$

√ com:

$$x = t$$
$$z = \sin(t)$$
$$t \in [-5, 5]$$
$$\epsilon \sim \mathrm{N}(\mu = 0, \sigma = 0.25)$$

√ Objetivo:
- Determinar modelo subjacente em contexto mais geral de especificação

$$y \sim x + z + x^2 + z^2 + x^3 + z^3 + xz + x^2z + xz^2$$

√ Usada regressão linear stepwise com AIC
- B = 1.000 reamostras de 51 dados

√ Construção de conjunto de dados

```
> #   Seleção de Variáveis
> set.seed(666)
> t <- seq(-5, 5, 0.2)
>   # qte de dados
> (n <- length(t) )
[1] 51
>   # construção do conjunto de dados
> x <- t
> z <- sin(t)
> y.verd <- 0.5 + 0.5*x + 0.2*x^2 + z + 0.1*x*z
> epsilon <- rnorm(n, 0, 0.5)
> dados <- data.frame(x = x, x2 = x^2, z = z, z2 = z^2, xz = x*z, x3 = x^3,
+ z3 = z^3, x2z = x^2*z, xz2 = x*z^2, y = y.verd + epsilon)
> head(dados)
     x    x2         z        z2        xz       x3        z3      x2z
1 -5.0 25.00 0.9589243 0.9195358 -4.794621 -125.000 0.8817652 23.97311
2 -4.8 23.04 0.9961646 0.9923439 -4.781590 -110.592 0.9885379 22.95163
3 -4.6 21.16 0.9936910 0.9874218 -4.570979  -97.336 0.9811922 21.02650
4 -4.4 19.36 0.9516021 0.9055465 -4.187049  -85.184 0.8617199 18.42302
        xz2        y
1 -4.597679 3.856118
2 -4.763251 4.233183
3 -4.542140 2.791026
4 -3.984405 3.718981
```


√ Ajuste do modelo

```
> library("MASS")
>   # ajuste do modelo
> library("MASS")
>   # inciando a modelagem
> mod.1 <- lm(y ~ x + z, data = dados)
> amod.1 <- stepAIC(mod.1, scope = list(upper = ~ x + z + x2 + z2 + xz + x3 +
+ z3 + x2z + xz2, lower = ~ 1), trace = FALSE)
> summary(amod.1)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.15488    0.17896   0.865 0.391389
x            0.57449    0.04582  12.539 2.76e-16 ***
z            0.72747    0.19557   3.720 0.000551 ***
x2           0.24315    0.02317  10.493 1.13e-13 ***
xz           0.20480    0.07966   2.571 0.013520 *
x2z          0.03416    0.01995   1.712 0.093742 .
---
Residual standard error: 0.5485 on 45 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9435,    Adjusted R-squared:  0.9373
F-statistic: 150.4 on 5 and 45 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

√ Ajuste do modelo simulado a partir da especificação mais geral

√ Bootstrap para encontrar modelos comuns:

```
>   # bootstrap para encontrar modelos comuns
> nReal = 1000
>   # proporção de ocorrência de cada variável
> p <- rep(0, 9)
> iReal <-1
> for (iReal in 1:nReal){
+   # bootstrap por indices
+ ind <- sample(1:n, n, replace = TRUE)
+   # seleção das linhas da reamostra
+ bdados <- dados[ind,]
+   # inicialização do modelo
+ mod.2 <- lm(y ~ x + z, data = bdados)
+ amod.2 <- stepAIC(mod.1, scope = list(upper = ~ x + z + x2 + z2 + xz +
+ x3 + z3 + x2z + xz2, lower = ~ 1), trace = FALSE)
+   # variáveis ajustadas
+ s <- names(coef(amod.2))
+ m <- length(s)

... # o código continua no próximo slide
```

√ Código continua no próximo slide!

146

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

√ Código para bootstraping (continuação):

```
>   # bootstrap para encontrar modelos comuns
+   # verifica os termos das variáveis
+ for (j in 2:m){
+ if (s[j] == "x"){
+ p[1] <- p[1] + 1
+ }else if (s[j] == "x2"){
+ p[2] <- p[2] + 1
+ }else if (s[j] == "z"){
+ p[3] <- p[3] + 1
+ }else if (s[j] == "z2"){
+ p[4] <- p[4] + 1
+ }else if (s[j] == "xz"){
+ p[5] <- p[5] + 1
+ }else if (s[j] == "x3"){
+ p[6] <- p[6] + 1
+ }else if (s[j] == "z3"){
+ p[7] <- p[7] + 1
+ }else if (s[j] == "x2z"){
+ p[8] <- p[8] + 1
+ }else if (s[j] == "xz2"){
+ p[9] <- p[9] + 1
+ }else{
+ cat("Erro!", sprintf("%5d", m), sprintf("%5d", j), "\n")
+ cat(s)
+ }
+ }
+ } # final do código
```

147

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

√ Análise do resultado do bootstrap:

```
>   # Análise dos resultados
> print("Variáveis: x, x^2, z, z^2, x*z, x^3, z^3, x^2*z, x*z^2")
[1] "Variáveis: x, x^2, z, z^2, x*z, x^3, z^3, x^2*z, x*z^2"
> print("Verdadeiro:: 1 1 1 0 1 0 0 0 0")
[1] "Verdadeiro:: 1 1 1 0 1 0 0 0 0”
>   # proporções associadas com os termos das variáveis
> (prop <- p/nReal)
[[1] 1 1 1 0 1 0 0 1 0
>   # tabela de resultados
> tabela <- rbind(c(1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0), p/nReal)
> rownames(tabela) <- c("Verdadeiro", "Bootstrap")
> colnames(tabela) <- c("x", "x^2", "z", "z^2", "x*z", "x^3", "z^3", "x^2*z",
+ "x*z^2")
> tabela
           x x^2 z z^2 x*z x^3 z^3 x^2*z x*z^2
Verdadeiro 1   1 1   0   1   0   0     0     0
Bootstrap  1   1 1   0   1   0   0     1     0
```

√ Encontrados todos os termos do modelo

– Junto com o termo x^2z espúrio ($p > 0.05$)

√ Refazer com `set.seed(1)`.

148

Uma Introdução ao Bootstrap com o R - 2018

Aplicação

Referências

Bibliografia Recomendada

- CHERNICK, M.; LABUDDE, R. *An introduction to bootstrap methods with applications to R*. Wiley, 2014.
- DAVISON, A.; HINKLEY, D. *Bootstrap methods and their application*. Cambridge University Press, 1997.
- EFRON, B.; TIBSHIRANI, R. J. *An introduction to the bootstrap*. Chapman & Hall, 1994