INSTITUTO SUPERIOR DE AGRONOMIA

Modelos Matemáticos e Aplicações– 2024-25
Algumas resoluções de Exercícios de Modelos Lineares Generalizados
Some solutions to Generalized Linear Model Exercises

1. Ver os *slides* das aulas.

2. (a) The three components of the model are:

   - The *random component* could be considered as a binary response variable (with a Bernoulli distribution) indicating whether or not each mouse developed a tumour (after being subjected to the corresponding treatment). However, many mice were subjected to similar treatments and since the data are presented in a contingency table (a table of counts, or absolute frequencies), it is also possible to consider that the response variable Y is indicating the *proportion of mice with tumours*, for each experimental situation. Assuming that the result for each mouse is independent from that of other mice, we have a random component with what we have called the 'Binomial/n' distribution. Note that in this example, the number of mice observed in each experimental situation is different. For example, for exposure time 16 months, and dose 0, we have $n_{11} = 205$ observations; for the same exposure time but dose 0.45 we have $n_{12} = 304$; and so on. Borrowing terminology from ANOVA contexts, we could say we have an unbalanced experimental design (although we are treating our predictors as numerical variables). The expected value of this response variable is $E[Y] = p$, which is also the probability of having a tumour. We assume that this probability differs according to the experimental conditions to which the mice were subjected.
   - The *systematic component* is $\beta_0 + \beta_1 \,\text{Dose} + \beta_2 \,\text{Exposicao}$, since we assume that p may vary depending on the values of the two numerical predictors, `Dose` and `Exposicao`.
   - Finally, the `link function` $g(\cdot)$ that relates the random and systematic components, via the general equation $g(p) = \beta_0 + \beta_1 \,\text{Dose} + \beta_2 \,\text{Exposicao}$ is, as requested, the probit link function, $g = \Phi^{-1}$, where Φ is the cumulative distribution function (cdf) of a standard Normal distribution. Thus, we have $\Phi^{-1}(p) = \beta_0 + \beta_1 \,\text{Dose} + \beta_2 \,\text{Exposicao}$ or, equivalently, $p = \Phi(\beta_0 + \beta_1 \,\text{Dose} + \beta_2 \,\text{Exposicao})$.

   From the output, we have the estimated values of the three parameters: $b_0 = -4.8474$; $b_1 = 1.4344$ and $b_2 = 0.1229$. Thus, the fitted model specifies that, for a given dose d and time of exposure t, the probability of the mice developing tumours is given by:

   $$p = \Phi(-4.8474 + 1.4344\, d + 0.1229\, t) \ . \tag{1}$$

   The fact that both b_1 and b_2 are positive indicates that as both dose and time of exposure grow, so too the fitted systematic component $-4.8474 + 1.4344\, d + 0.1229\, t$ grows, hence the probability of tumour, p, also grows. This was to be expected.

   (b) The fitted model's deviance is just 1.3381 which, when compared with the deviance of the Null Model, 198.5347, shows that the fitted model has almost totally accounted for variability. However, this encouraging observation should be tempered by the realization that the model, which has three parameters (the β_js) was fitted with only $n = 6$ observations (the counts in each of the six experimental situations). Furthermore, only two different exposure times and three different doses were used in the experiment, which makes it difficult

to assume that the shape of the fitted surface for other, non-observed, values of the predictors follows a similar trend. But it is possible to compare the fitted model and the Null Model using the Likelihood Ratio (Wilks) test. As in the Linear Model context, the Null Hypothesis H_0 is that both models are the same ($\beta_1 = \beta_2 = 0$), and the Alternative Hypothesis H_1 is that they are not the same. The test statistic is just the difference in the deviances: $\Lambda_{calc} = D_N - D_M = 198.5347 - 1.3381 = 197.1966$. This calculated value of Wilks' Lambda is clearly significant on a χ^2_2 distribution (the degrees of freedom are given by the difference in the number of parameters in both models, since the Null Model has a single parameter, β_0): the `R` command `1-pchisq(197.1966,2)` gives zero, to the precision displayed. As would be expected, there is a very clear rejection of H_0 and the models differ significantly.

(c) The near-zero p-values associated with the asymptotic Maximum-Likelihood tests for $\beta_1 = 0$ ($p < 2 \times 10^{-16}$) and for $\beta_2 = 0$ ($p = 4.78 \times 10^{-14}$) indicate that neither numerical predictor can be dropped without significantly affecting the goodness-of-fit.

(d) There are two questions:

i. The estimated probability associated with having dose $d = 0.75$ and exposure time $t = 36$. The corresponding systematic component with the estimated parameters is $-4.8474 + 1.4344 \times 0.75 + 0.1229 \times 36 = 0.6528$ and from equation 1, the corresponding probability of developing a tumour is given by $\Phi(0.6528) = 0.7430574$. These values were calculated with the estimated model coefficients rounded off to four decimal places, as shown in the question sheet. By re-fitting the model using the data frame `ratos`, we can obtain values with greater precision:

```
> ratos.glm1 <- glm(formula =cbind(com, sem) ~ Dose + Exposicao,
+                               family = binomial(probit), data=ratos)
> predict(ratos.glm1, new=data.frame(Dose=0.75, Exposicao=36))
        1
0.6517764
> predict(ratos.glm1, new=data.frame(Dose=0.75, Exposicao=36), type="response")
        1
0.7427273
```

(recall that the command `predict`, by default, gives the systematic component, but with argument `type=''response''` gives the estimated probability).

ii. The dose d for which $p = 0.5$, if exposure time is $t = 24$. Since p is given by the cdf of a Normal distribution, we know that $p = 0.5$ when the value of the systematic component is zero: $\Phi(0) = 0.5$. Hence, we must have $-4.8474 + 1.4344 \times d + 0.1229 \times t = 0$. Since $t = 24$, this means we must have the dose $d = \frac{4.8474 - 0.1229 \times 24}{1.4344} = 1.3231$. This dose is higher than any of the doses that were used in the experiment, but the 50% rate of tumours is also higher than for any of the observed doses, which is coherent.

(e) We are now fitting a model where both dose and exposure times are considered factors with, respectively, $a = 3$ and $b = 2$ levels (as in the output, we consider `Dose` as Factor A and `Exposicao` as Factor B). This means we have a two-way factorial design (all observed doses were associated with both observed exposure times) which, as we saw above, is unbalanced. No interaction effects are envisaged (nor could they be since there is one observation - one proportion of 'successes' - for each experimental situation). Therefore, the equation for the systematic component will now have additive effects only for the levels (except the first) of each individual factor. Using notation similar to that introduced in the study of ANOVA models, we can assume that for the reference experimental situation $(1, 1)$ (dose zero and exposure time 16 months), the systematic component is of the form μ. Staying

with exposure time 16 months, but for dose (Factor A) level 2 (0.45 parts per 10 000), we would have systematic component $\mu + \alpha_2$. Again for exposure time 16 months, but for dose (Factor A) level 3 (0.75 parts per 10 000), we would have systematic component $\mu + \alpha_3$. For the first dosage (0) but exposure time (Factor B) level 2 (24 months), we have systematic component $\mu + \beta_2$. For the second dose and second exposure time we have systematic component $\mu + \alpha_2 + \beta_2$. Finally, for the third dosage and second exposure time the systematic component is $\mu + \alpha_3 + \beta_2$. All these expressions can be written in a single equation, using the indicator (dummy) variables introduced in the study of ANOVAs:

$$\mu \ + \ \alpha_2 \boldsymbol{\mathcal{I}}_{A_2} \ + \ \alpha_3 \boldsymbol{\mathcal{I}}_{A_3} \ + \ \beta_2 \boldsymbol{\mathcal{I}}_{B_2} \tag{2}$$

But we must not forget that we are in the context of a probit GLM. Therefore, this systematic component must be fed to Standard Normal cumulative distribution function Φ in order to have the fitted probabilities of developing a tumour. The model equation is therefore:

$$p \quad = \quad \Phi(\mu \ + \ \alpha_2 \boldsymbol{\mathcal{I}}_{A_2} \ + \ \alpha_3 \boldsymbol{\mathcal{I}}_{A_3} \ + \ \beta_2 \boldsymbol{\mathcal{I}}_{B_2}) \tag{3}$$

The notable differences in relation to the probit model which considered the predictors as numerical variables is that here the doses and exposure times do not have numerical values: different doses and/or exposure times are just different categories, without relations of scale.

(f) The estimated parameter values are given in the output: $\hat{\mu} = -2.9038$, $\hat{\alpha}_2 = 0.6880$; $\hat{\alpha}_3 = 1.0859$; and $\hat{\beta}_{B_2} = 0.9826$. Thus, the fitted probabilities are given by:

$$p \quad = \quad \Phi(-2.9038 \ + \ 0.6880 \cdot \boldsymbol{\mathcal{I}}_{A_2} \ + \ 1.085 \cdot \boldsymbol{\mathcal{I}}_{A_3} \ + \ 0.9826 \cdot \boldsymbol{\mathcal{I}}_{B_2}) \tag{4}$$

The estimated probability that a mouse not exposed to the toxic (dose zero) will have a tumour after 16 months is the value of p for the first experimental situation, that is, $\hat{p} = \Phi(\hat{\mu}) = \Phi(-2.9038) = 0.001843318$ (as given by the `R` command `pnorm(-2.9038)`). This fitted probability compares with a relative frequency of tumours in the same experimental situation of $\frac{1}{205} = 0.004878049$. While different, it is of a similar order of magnitude. The estimated probability for the same experimental situation, using the previous model (where predictors were considered numerical variables) is given by: $\Phi(-4.8474 + 1.4344 \times 0 + 0.1229 \times 16) = \Phi(-2.881) = 0.001982078$. Once again, the estimate is different from, but coherent with, the observed relative frequency.

(g) It is *not* possible, in the ANOVA-type GLM, to estimate probabilities for exposure times (and/or doses) that were not used as experimental factor levels. Factor levels are just different categories, with no scale. In this sense, this model is less flexible than the initial model. But it must also be taken into account that the very few different exposure times and dosages that were used in the experiment are also not sufficient to ensure that the systematic component of that model (which defines a plane in 3-dimensional space, in our case), is an adequate trend for other, untested, doses and/or exposure times.

(h) The deviance for the fitted model is now $D = 1.0902$. This is slightly smaller than the deviance of the initial model (which, it will be recalled, was $D = 1.3381$). Note that in both cases, the Null Model is the same: its equation is just $p = \Phi(\beta_0)$ (or $\Phi(\mu)$ using the ANOVA notation), that is, a constant probability p for all experimental situations. Hence, the Null deviance is the same: $D_N = 198.5347$. Both models are clearly better than the Null Model. A Likelihood Ratio test here would also given a significant value of the test statistic, since $\Lambda_{calc} = 198.5347 - 1.0902 = 197.4445$, but note that the χ^2 distribution for this statistic will now have 3 degrees of freedom, since the model which was now fitted has four parameters

(μ, α_2, α_3 and β_2), whereas the Null Model has the single parameter μ. This Wilks' test can be carried out in `R` by fitting both models and then using the `anova` command with the `test="Chisq"` argument:

```
> ratos.glm2 <- glm(formula = cbind(com, sem) ~ as.factor(Dose) + as.factor(Exposicao),
+                                                 family = binomial(probit), data=ratos)
> ratos.Nulo <- glm(formula = cbind(com, sem) ~ 1, family = binomial(probit), data=ratos)
> anova(ratos.Nulo, ratos.glm2, test="Chisq")
Analysis of Deviance Table

Model 1: cbind(com, sem) ~ 1
Model 2: cbind(com, sem) ~ as.factor(Dose) + as.factor(Exposicao)
  Resid. Df Resid. Dev Df Deviance  Pr(>Chi)
1         5     198.53
2         2       1.09  3   197.44 < 2.2e-16 ***
```

It should also be noted that, as can be seen applying the `summary` function to the fitted models, the value of the AIC for this ANOVA-type model is slightly higher than for the model which assumed numerical predictors: `AIC: 35.347`, when compared with `AIC: 33.594`. This means that the numerical predictor model performs slightly better under this criterion, essentially because it obtains a similar deviance with one less parameter. In any case, both models have a very similar quality from the point of view of both deviance and AIC. The choice between them will not depend on this aspect, but more so on the previously discussed characteristics: if other values of doses/exposure times are of interest, it would preferable to use the model with numerical predictors; but this entails the risk of assuming that the underlying trend for probabilities of tumours is given by the equation (1), when not enough different values of dosages and exposure times were used to properly assess the adequacy of this assumption.

(i) The model that is being requested will be a *saturated* model: there would have to be six different parameters (the four in the above ANOVA-type model, plus the two interaction effects for experimental situations with neither factor set to its first level: $(\alpha\beta)_{22}$ and $(\alpha\beta)_{23}$). But there are only six experimental situations, and a single observation in each one. That this is the case can be confirmed by actually fitting the model with `R`:

```
> ratos.glm3 <- glm(formula = cbind(com, sem) ~ as.factor(Dose) * as.factor(Exposicao),
+                                        family = binomial(probit), data=ratos)
> summary(ratos.glm3)

Call:
glm(formula = cbind(com, sem) ~ as.factor(Dose) * as.factor(Exposicao),
    family = binomial(probit), data = ratos)

Deviance Residuals:
[1]  0  0  0  0  0  0
[...]
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance:  1.9853e+02  on 5  degrees of freedom
Residual deviance: -3.1086e-14  on 0  degrees of freedom
AIC: 38.256

Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

Note the zero deviance and how all deviance residuals are zero. This is not the result of having a very good model, but of having a saturated model, with as many parameters as there are observations.

3. (a) Basta o comando `plot(Elisa1, pch=16)`.

   (b) Dada a natureza da variável resposta `emergencias`, que é uma variável de contagem do número de adultos que emergem na geração seguinte (não fazendo sentido impôr à partida um limite superior), pode admitir-se que essa variável resposta tenha distribuição de Poisson. O parâmetro λ duma Poisson é o seu valor esperado: $E[Y] = \lambda$, pelo que modelar λ significa modelar a tendência de fundo (valores médios) da variável resposta Y.

   (c) Essa função de ligação canónica da distribuição Poisson é o logaritmo: $g(\lambda) = \ln(\lambda)$. Assim, utilizar essa função de ligação corresponde a modelar a relação entre o preditor `x` (número de larvas de mosquito presentes no substrato, `esciarídeos`) e o logaritmo do número esperado de adultos na geração seguinte através da equação:

$$\ln(\lambda(x)) \;=\; \beta_0 + \beta_1\, x \qquad \Leftrightarrow \qquad \lambda(x) \;=\; \mathrm{e}^{\beta_0+\beta 1\, x}\ .$$

   O gráfico indica como admissível a relação de tipo exponencial indicada, uma vez que uma curva exponencial (crescente) acompanha o padrão da nuvem de pontos.

   (d) O ajustamento do modelo obtém-se da seguinte forma e com os resultados indicados:

```
> Elisa1.glm <- glm(emergencias ~ esciarideos , family=poisson, data=Elisa1)
> summary(Elisa1.glm)
[...]
Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) 2.632e+00  5.076e-02   51.85   <2e-16 ***
esciarideos 5.248e-04  3.209e-05   16.36   <2e-16 ***
---
(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)
Null deviance: 513.00  on 56  degrees of freedom
Residual deviance: 244.22  on 55  degrees of freedom
AIC: 526.32
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

   A curva ajustada tem assim equação $y = \mathrm{e}^{2.632+0.0005248\, x}$. A interpretação do parâmetro β_1 neste tipo de modelos pode fazer-se reparando que, para qualquer valor do preditor x, o valor esperado de Y é dado por $\lambda(x) = \mathrm{e}^{\beta_0}\mathrm{e}^{\beta 1 x}$. Aumentando o preditor numa unidade, o valor esperado de Y vem: $\lambda(x+1) = \mathrm{e}^{\beta_0}\mathrm{e}^{\beta 1(x+1)} = \mathrm{e}^{\beta_0}\mathrm{e}^{\beta 1 x}\mathrm{e}^{\beta_1}$. Assim, tem-se

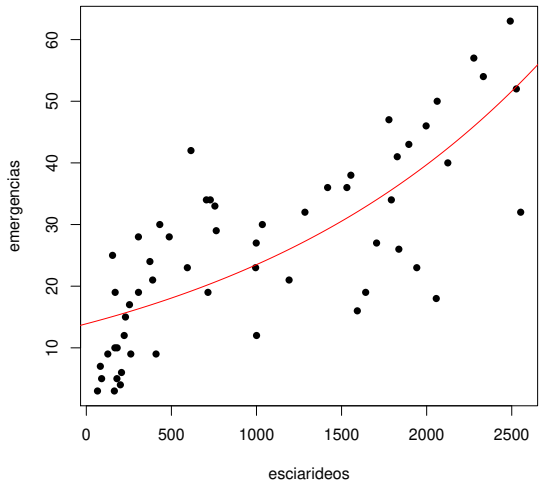
$$\mathrm{e}^{\beta_1} = \frac{\lambda(x+1)}{\lambda(x)} \qquad \Leftrightarrow \qquad \beta_1 = \ln(\lambda(x+1)) - \ln(\lambda(x))\ .$$

   Assim, cada aumento numa unidade no preditor x corresponde, em média, a multiplicar o valor esperado da variável resposta por e^{β_1}. No nosso exemplo, o valor estimado de β_1 é $b_1 = 0.0005248$, pelo que aumentar numa unidade o número de larvas de mosquito presentes no substrato corresponde, em média, a multiplicar o número de adultos na geração seguinte por $\mathrm{e}^{0.0005248} = 1.000525$. Este valor muito pequeno é também reflexo da escala de valores do preditor x (`esciarideos`), que varia entre valores próximos de zero e valores maiores do que 2500. Uma interpretação mais adequada a esta gama de valores observados poderia dizer respeito a um múltiplo de β_1. Por exemplo, através dum raciocínio análogo ao ndicado

na alínea 3d, pode concluir-se que a cada aumento de 100 unidades no valor do preditor, corresponde um factor multiplicativo de $e^{0.0005248\times 100} = 1.053881$ na razão $\frac{\lambda(x+100)}{\lambda(x)}$, pelo que o número médio de adultos emergentes aumentará, em média, cerca de 5% por cada 100 larvas de mosquito adicionais no substrato.

(e) A curva ajustada acima pode ser traçada sobre a nuvem de pontos com o comando:

```
> curve(exp(2.632 + 0.0005248*x), from=-50, to=2700, col="red" , add=TRUE)
```



(f) Os ICs (assintóticos) a 95% de confiança pedidos para cada β_j $(j=1,2)$ são da forma:

$$\left]\ b_j - z_{0.025}\cdot\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j}\ ,\ b_j + z_{0.025}\cdot\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j}\ \right[,$$

onde b_j indica a estimativa do respectivo parâmetro β_j, $z_{0.025}$ é o quantil de ordem 1–0.025 = 0.975 numa distribuição $\mathcal{N}(0,1)$, e $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_j}$ é o desvio padrão (assintótico) associado ao estimador $\hat{\beta}_j$, e dado pelo correspondente elemento diagonal da inversa da matriz de informação de Fisher, $\boldsymbol{\mathcal{I}}^{-1}$. Ora, $z_{0.025} = 1.959964$. Os restantes valores são disponibilizados na listagem produzida pelo comando `summary(Elisa1.glm)`. Assim, e para o IC correspondente a β_1, tem-se $b_1 = 0.0005248$ e $\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_1} = 0.00003209$. O correspondente IC assintótico a 95% é $]0.0004619, 0.0005877[$. Este IC contém apenas valores positivos, pelo que o facto multiplicativo e^{β_1} que transforma $\lambda(x)$ em $\lambda(x+1)$ é, a 95% de confiança, maior do que um. Assim, é legítimo afirmar que a aumentos no número de mosquitos no subtrato correspondem aumentos (em média) no número de adultos emergentes. (e é também legítimo afirmar, com 95% de confiança, que esse factor está entre $e^{0.0004619} = 1.000462$ e $e^{0.0005877} = 1.000588$). Um IC para β_0 obtém-se de forma análoga. No `R`, estes ICs são obtidos com o comando `confint.default`:

```
> confint.default(Elisa1.glm)
2.5 %       97.5 %
(Intercept) 2.5322823635 2.7312645384
esciarideos 0.0004619407 0.0005877286
```

4. O conjunto de dados referido no enunciado é o seguinte. As linhas correspondem a locais e as colunas a espécies.

```
> waders
    S1   S2   S3  S4   S5   S6   S7  S8  S9 S10 S11  S12  S13   S14  S15   S16  S17  S18  S19
A   12 2027    0   0 2070   39  219 153   0  15  51 8336 2031 14941   19  3566    0    5    0
B   99 2112    9  87 3481  470 2063  28  17 145  31 1515 1917 17321 3378 20164  177 1759   53
C  197  160    0   4  126   17    1  32   0   2   9  477    1   548   13   273    0    0    0
D    0   17    0   3   50    6    4   7   0   1   2   16    0     0    3    69    1    0    0
E   77 1948    0  19  310    1    1  64   0  22  81 2792  221  7422   10  4519   12    0    0
F   19  203   48  45   20  433    0   0  11 167  12    1    0    26 1790  2916  473  658   55
G 1023 2655    0  18  320   49    8 121   9  82  48 3411   14  9101   43  3230  587   10    5
H   87  745 1447 125 4330  789  228 529 289 904  34 1710 7869  2247 4558 40880 7166 1632  498
I  788 2174    0  19  224  178    1 423   0 195 162 2161   25  1784    3  1254    0    0    0
J   82  350  760 197  858  962   10 511 251 987 191   34   87   417 4496 15835 5327 1312 1020
K  474  930    0  10  316  161    0  90   0  39  48 1183  166  4626   65   127    4    0    0
L   77  249  160 136  999  645   15 851 101 723 266  495   83  1253 1864  4107 1939  623  527
M   22  144    0   4    1    1    0  10   0   2   9  125    5   411    0     3    0    0    0
N    0  791    0   0    4   38    1  56   1  30  54   95    0  1726    0     0    0    0    0
O    0  360  128  43  364 1628   63 287 328 641 850   83   67    48 6499  9094 5647 1333  582
```

(a) O teste χ^2 pedido (estudado no módulo I desta UC) tem por hipótese nula a independência dos dois factores de classificação (local e espécie). Ou seja, tem por hipótese nula que, para qualquer célula (combinação local/espécie) (i, j), se verifica que a probabilidade conjunta de estar nessa célula é o produto das probabilidades marginais de estar nesse local e nessa espécie: $\pi_{ij} = \pi_{i.} \times \pi_{.j}, \forall\, i, j$. Sabe-se que a estatística desse teste (estatística de Pearson), é $X^2 = \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=i}^{b} \frac{(O_{ij} - \hat{E}_{ij})^2}{\hat{E}_{ij}}$, onde O_{ij} indica o número de indivíduos observados no local $i = 1, ..., a$, da espécie $j = 1, ..., b$, e $\hat{E}_{ij}$ indica o correspondente valor esperado, estimado ao abrigo da hipótese nula de independência. Essa estimativa é dada por $\hat{E}_{ij} = N \times \frac{N_{i.}}{N} \frac{N_{.j}}{N} = \frac{N_{i.} \times N_{.j}}{N}$, sendo N o número total de observações, $N_{i.}$ o número total de observações no local i e $N_{.j}$ o número total de observações da espécie j. Caso seja verdade a hipótese nula de independência, esta estatística tem, assintoticamente, distribuição $\chi^2_{(a-1)(b-1)}$. Neste caso, o resultado do teste obtém-se pelo comando do `R` indicado no enunciado:

```
> chisq.test(waders)
Pearson's Chi-squared test
data:  waders
X-squared = 248356, df = 252, p-value < 2.2e-16
Warning message:
In chisq.test(waders) : Chi-squared approximation may be incorrect
```

O *p-value* próximo de zero associado ao valor calculado da estatística indica uma claríssima rejeição da hipótese nula de independência (ao abrigo da qual haviam sido obtidos os valores esperados estimados $\hat{E}_{ij}$). Este resultado era de esperar, dada a natureza dos dados. De facto, é de esperar que haja relações de preferência ou aversão de determinadas espécies por determinados locais, ao contrário do que seria o caso sob a hipótese de independência. **Nota:** A advertência final resulta do facto de a distribuição ser apenas assintótica, sendo habitual considerar que a aproximação é válida caso não existam células com um número muito reduzido de observações esperadas (os critérios exactos diferem). Neste caso, existem várias células com valores pequenos de $\hat{E}_{ij}$, o que motiva a advertência do `R`.

(b) Eis a cabeça da *data frame* criada com o comando do enunciado:

```
> head(limicolas)
obs local especie
1  12     A      S1
```

```
2  99     B      S1
3 197     C      S1
4   0     D      S1
5  77     E      S1
6  19     F      S1
```

(c) Neste contexto, a componente aleatória do MLG pedido é a variável Y que conta o número de observações em cada célula. Embora existam dois factores (`local`, com $a = 15$ níveis e `especie`, com $b = 19$ níveis), existe uma única contagem por célula, pelo que apenas são necessários dois índices para identificar cada observação. Dada a natureza da variável resposta, é natural admitir que cada uma das $n = ab = 15 \times 19 = 285$ observações Y_{ij} corresponda a uma concretização duma distribuição de Poisson, sendo o parâmetro da distribuição específico para cada célula, ou seja, o parâmetro da Poisson pode variar consoante o local e a espécie: λ_{ij}. Desta forma, o número esperado de observações em cada célula é dado por $\lambda_{ij} = E[Y_{ij}]$. Uma vez que não existem repetições nas ab células deste delineamento factorial a dois factores, não é possível prever efeitos de interacção (fazê-lo corresponderia a trabalhar com um modelo saturado, com tantas observações quantos os parâmetros do modelo: ab). Assim, a parte sistemática corresponderá à de um modelo a dois factores sem efeitos de interacção: $\mu + \alpha_i + \beta_j$, sendo α_i o efeito do local i ($\alpha_1 = 0$) e β_j o efeito da espécie j ($\beta_1 = 0$). Finalmente, a função de ligação deste MLG é o logaritmo. Assim, a equação de base deste modelo log-linear é da forma:

$$g(E[Y_{ij}]) \quad = \quad \ln(\lambda_{ij}) \quad = \quad \mu + \alpha_i + \beta_j \ .$$

O valor esperado na célula (i, j) é dado por

$$\lambda_{ij} \quad = \quad \mathrm{e}^{\mu+\alpha_i+\beta_j} \ ,$$

(com $\alpha_1 = \beta_1 = 0$). No caso concreto da espécie $S14$ ($j = 14$) e local C ($i = 3$), esse valor esperado é dado por

$$\lambda_{3,14} \quad = \quad \mathrm{e}^{\mu+\alpha_3+\beta_{14}} \ .$$

(d) O modelo pedido no enunciado é o seguinte:

```
> summary(limic.glm)
Call: glm(formula = obs ~ local + especie, family = poisson, data = limicolas)
[...]
Coefficients:
Estimate Std. Error  z value Pr(>|z|)
(Intercept)  5.767930   0.019100  301.991  < 2e-16 ***
localB       0.493097   0.006936   71.095  < 2e-16 ***
localC      -2.890491   0.023822 -121.336  < 2e-16 ***
localD      -5.231437   0.074943  -69.806  < 2e-16 ***
localE      -0.648924   0.009328  -69.568  < 2e-16 ***
localF      -1.582885   0.013239 -119.560  < 2e-16 ***
localG      -0.479293   0.008837  -54.236  < 2e-16 ***
localH       0.820547   0.006558  125.116  < 2e-16 ***
localI      -1.271316   0.011677 -108.874  < 2e-16 ***
localJ       0.006044   0.007717    0.783  0.43348
localK      -1.402189   0.012298 -114.018  < 2e-16 ***
localL      -0.795512   0.009800  -81.178  < 2e-16 ***
localM      -3.816235   0.037239 -102.481  < 2e-16 ***
```

```
localN      -2.482878   0.019685 -126.128  < 2e-16 ***
localO      -0.177257   0.008095  -21.898  < 2e-16 ***
especieS10   0.290805   0.024311   11.962  < 2e-16 ***
especieS11  -0.470071   0.029653  -15.853  < 2e-16 ***
especieS12   2.026402   0.019564  103.580  < 2e-16 ***
especieS13   1.440433   0.020451   70.433  < 2e-16 ***
especieS14   3.040876   0.018824  161.547  < 2e-16 ***
especieS15   2.039994   0.019548  104.357  < 2e-16 ***
especieS16   3.579613   0.018644  192.000  < 2e-16 ***
especieS17   1.976080   0.019622  100.705  < 2e-16 ***
especieS18   0.908073   0.021784   41.685  < 2e-16 ***
especieS19  -0.076217   0.026517   -2.874  0.00405 **
especieS2    1.614834   0.020135   80.199  < 2e-16 ***
especieS3   -0.147298   0.027019   -5.452 4.99e-08 ***
especieS4   -1.426666   0.041793  -34.137  < 2e-16 ***
especieS5    1.516512   0.020307   74.678  < 2e-16 ***
especieS6    0.605367   0.022864   26.477  < 2e-16 ***
especieS7   -0.123294   0.026846   -4.593 4.38e-06 ***
especieS8    0.067029   0.025582    2.620  0.00879 **
especieS9   -1.077200   0.036486  -29.524  < 2e-16 ***
---
(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)
Null deviance: 1039396  on 284  degrees of freedom
Residual deviance:  251164  on 252  degrees of freedom
AIC: 252821
Number of Fisher Scoring iterations: 6
```

Uma primeira análise do desvio residual diz-nos que é apenas cerca de 1/4 do desvio do modelo nulo, pelo que a utilização de local e espécie como factores preditores explica parte importante das contagens observadas.

A contagem esperada ao abrigo do modelo na célula do local C, espécie S14, é

$$\hat{\lambda}_{3,14} \;=\; \mathrm{e}^{\hat{\mu}+\hat{\alpha}_3+\hat{\beta}_{14}} \;=\; \mathrm{e}^{5.767930-2.890491+3.040876} \;=\; 371.7847\ .$$

A contagem efectiva nessa célula foi $O_{3,14} = 548$. A discrepância é substancial, embora a ordem de grandeza da contagem esteja certa.

(e) A soma de quadrados dos resíduos de Pearson é, neste contexto, igual ao valor da estatística do teste χ^2 de Pearson. Este facto torna-se evidente, tendo em conta as definições dos resíduos de Pearson (ver acetatos MLGs) e da estatística do teste χ^2 (ver acima).

```
> sum(residuals(limic.glm, type="pearson")^2)
[1] 248356
```

Assim, pode pensar-se no valor da estatística de Pearson no teste χ^2 à independência, como uma medida do afastamento dos valores esperados estimados pelo modelo log-linear considerado (sem efeitos de interacção), em relação aos valores efectivamente observados, ou seja, como uma medida do mau ajustamento deste modelo.

(f) Para uma mesma espécie, o quociente dos valores esperados de Y nos locais 4 e 3 é:

$$\frac{\lambda_{4j}}{\lambda_{3j}} \;=\; \frac{\mathrm{e}^{\mu+\alpha_4+\beta_j}}{\mathrm{e}^{\mu+\alpha_3+\beta_j}} \;=\; \mathrm{e}^{\alpha_4-\alpha_3}\ .$$

Logo, $\alpha_4 - \alpha_3 = \ln\left(\frac{\lambda_{4j}}{\lambda_{3j}}\right) = \ln(\lambda_{4j}) - \ln(\lambda_{3j})$, pelo que se trata da diferença entre os logaritmos dos valores esperados das contagens, duma mesma espécie, nos locais C e D.

(g) Conhecemos os intervalos de confiança assintóticos duma qualquer combinação linear dos parâmetros. Para esta combinação linear simples, temos a seguinte expressão dum IC a 95% de confiança (ver acetatos de MLGs):

$$\left]\quad (\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3) - z_{0.025} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3} \quad , \quad (\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3) + z_{0.025} \cdot \hat{\sigma}_{\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3} \quad \right[\ .$$

Os valores estimados de α_4 e α_3 são dados na listagem: $\hat{\alpha}_4 = -5.231437$ e $\hat{\alpha}_3 = -2.890491$, pelo que $\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3 = -2.340946$. Para calcular o erro padrão estimado associado à diferença $\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3$, necessitamos da matriz de variâncias-covariâncias estimadas dos parâmetros, ou seja da inversa da matriz de informação de Fisher (ver acetato dos MLGs). Dada a sua dimensão neste exemplo, optamos por apenas apresentar as linhas e colunas desta matriz correspondentes aos parâmetros α_4 e α_3:

```
> vcov(limic.glm)[c("localC","localD"),c("localC","localD")]
localC       localD
localC 5.674991e-04 2.986499e-05
localD 2.986499e-05 5.616452e-03
```

Assim, tem-se:

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_{\hat{\alpha}_4 - \hat{\alpha}_3} &= \sqrt{\hat{V}[\hat{\alpha}_4] + \hat{V}[\hat{\alpha}_3] - 2 \cdot Cov[\hat{\alpha}_4, \hat{\alpha}_3]} \\
&= \sqrt{0.005616452 + 0.0005674991 - 2(0.00002986499)} \\
&= \sqrt{0.006124221} = 0.0782574 \ .
\end{aligned}$$

Como $z_{0.025} = 1.959964$, o IC pedido é:

$$\left]\quad -3.043873 \quad , \quad -2.737109 \quad \right[\ .$$

A diferença entre os logaritmos dos valores esperados das contagens, duma mesma espécie, nos locais C e D, está contida neste IC, com 95% de confiança. Ou seja, a razão desses valores esperados está, a 95% de confiança, entre $e^{-3.043873} = 0.04765$ e $e^{-2.737109} = 0.06475729$. Estes valores são compatíveis com o número de observações de cada espécie, tendo sido avistados (para todas as espécies) 179 indivíduos no local D, menos de 10% dos 1860 indivíduos avistados no local C.

(h) O modelo log-linear ajustado está associado à hipótese de independência, hipótese essa rejeitada pelo habitual teste χ^2 de independência (como seria de esperar, dado o problema em causa). Esta interpretação é corroborada pela proximidade do valor da soma de quadrados dos resíduos de Pearson, calculada na alínea (e), com a soma de quadrados dos resíduos do desvio, que gera o desvio residual indicado nas listagens (sendo de esperar um valor próximo das duas somas de quadrados destas variantes de resíduos). No nosso caso, e como se pode verificar em cima, o desvio residual é $D^* = 251\,164$. Tendo em conta que o desvio residual se define à custa da diferença das log-verosimilhanças entre o modelo ajustado e o modelo saturado, e que o modelo saturado neste contexto corresponde a um modelo com efeitos de interacção (e sem independência), pode calcular-se o *p-value* do desvio calculado $D^* = 251\,164$ a partir duma distribuição χ^2_{252} (uma vez que é essa a diferença entre o número de observações, $n = 285$, e o número de parâmetros do modelo, $m = a + b - 1 = 33$). Uma

vez que $p \approx 0$, rejeita-se a igualdade do modelo ajustado (associado à hipótese de independência) e do modelo saturado (sem qualquer restrição aos valores de λ_{ij}). Ao optar pelo modelo completo, podemos afirmar que a hipótese de independência entre os factores locais e espécies, hipótese associada ao submodelo, deve ser rejeitada.

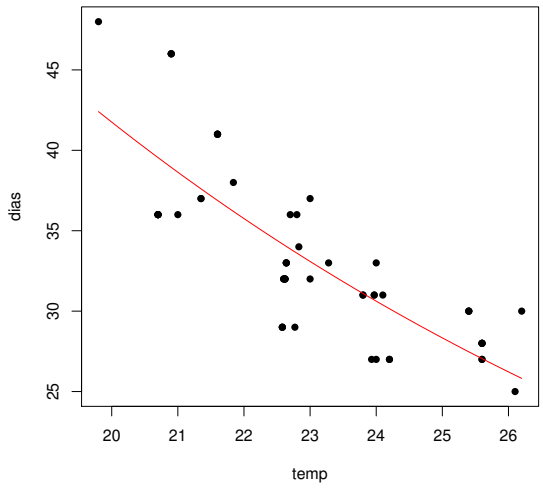
5. Pretende-se neste exercício modelar o número de dias entre a postura de ovos e a emergência de novos adultos (variável `dias`) com o preditor temperatura do meio ambiente (variável `temp`). Os dados estão na *data frame* `Elisa2`.

   (a) Vamos admitir que a componente aleatória Y (variável `dias`) é uma variável aleatória de contagem, com distribuição Poisson de parâmetro $\lambda = E[Y]$ que depende do preditor x (variável `temp`) através da ligação canónica $g(\lambda) = \ln(\lambda)$. Assim, a equação de base do modelo é $\ln(\lambda(x)) = \beta_0 + \beta_1\, x$, ou seja, $\lambda(x) = \mathrm{e}^{\beta_0 + \beta_1\, x}$. Esta relação de fundo exponencial é compatível com a nuvem de pontos dada no enunciado, que poderá ter a forma duma exponencial descrescente (a adequação, ou não, desta relação terá de ser confirmada com o ajustamento, e pode ainda ser melhor avaliada costruindo uma nuvem de pontos entre `log(dias)` e `temp`, cuja tendência de fundo linear confirmará a adequação da relação antes descrita). Uma exponencial descrescente corresponde, na equação do modelo, a um valor negativo do parâmetro β_1. Eis o ajustamento no `R` deste modelo log-linear:

```
> Elisa2.glm1 <- glm(dias ~ temp, family=poisson, data=Elisa2)
> summary(Elisa2.glm1)
[...]
Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  5.28241    0.32058  16.478  < 2e-16 ***
temp        -0.07753    0.01402  -5.528 3.23e-08 ***
---
(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)
Null deviance: 47.194  on 56  degrees of freedom
Residual deviance: 16.203  on 55  degrees of freedom
AIC: 324.44
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

   A diminuição considerável do desvio residual em relação ao desvio do modelo nulo indica que o preditor `temp` desempenha um papel importante na explicação da variabilidade no número de dias até à emergência, o que corresponde à indicação da nuvem de pontos. O valor estimado $b_1 = -0.07753$ é negativo, indicando como foi acima referido, existir uma relação de tipo decrescente entre número de dias até à emergência e temperatura. O valor de prova (*p-value*) no teste (assintótico) a $\beta_1 = 0$ é muito baixo ($p = 3.23 \times 10^{-8}$), pelo que se rejeita a hipótese de $\beta_1 = 0$, havendo evidência estatisticamente significativa duma relação decrescente. A curva ajustada tem equação $y = \mathrm{e}^{5.28241 - 0.07753x}$, e está indicada na nuvem de pontos em baixo, obtida com os seguintes comandos do `R`.

```
> plot(Elisa2, pch=16)
> curve(exp(5.28241-0.07753*x)  , add=TRUE, col="red")
```

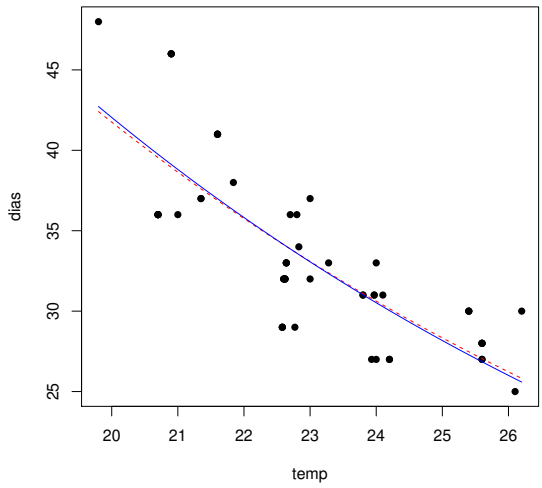


(b) Nesta alínea pede-se para fazer uma única modificação ao modelo ajustado na alínea anterior: considerar que a componente aleatória Y (variável `dias`) tem distribuição Normal. Não se pede para alterar a função de ligação, que deve continuar a ser a ligação *log.* assim, a equação do modelo mantém-se igual à da alínea anterior (podendo apenas trocar-se a letra λ, que corresponde à média numa distrinbuição $Po(\lambda)$ por μ, que a forma mais usual de indicar a média duma Normal). Por outras palavras, a equação do modelo é $\mu(x) = e^{\beta_0 + \beta_1 x}$. Não se trata dum modelo linear entre x e y, dada a transformação exponencial na relação entre $E[Y]$ e x. Para ajustar este modelo no `R`, será necessário efectuar duas alterações no comando da alínea anterior: (i) especificar a família `gaussian` (palavra reservada no argumento `family` do comando `glm` para indicar uma componente aleatória Normal); e (ii) especificar explicitamente a função de ligação, uma vez que para a distribuição Normal a função de ligação canónica é a identidade, e não a função logaritmo. Felizmente que existe código escrito no `R` permitindo o ajustamento dum modelo com componente aleatória Normal e função de ligação logarítmica. Eis o ajustamento e os respectivos resultados:

```
> Elisa2.glm2 <- glm(dias ~ temp, family=gaussian(link=log), data=Elisa2)
> summary(Elisa2.glm2)
[...]
Coefficients:
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  5.340326   0.181465  29.429  < 2e-16 ***
temp        -0.080079   0.008015  -9.992 5.75e-14 ***
---
(Dispersion parameter for gaussian family taken to be 10.4694)
Null deviance: 1634.67  on 56  degrees of freedom
Residual deviance:  575.82  on 55  degrees of freedom
AIC: 299.58
Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

A curva ajustada tem agora a equação $y = e^{5.340326 - 0.080079x}$ e pode ser traçada sobre a nuvem de pontos com os seguintes comandos (tendo sido deixada, a tracejado, a curva obtida a partir do modelo log-linear ajustado na alínea anterior).

```
> plot(Elisa2, pch=16)
> curve(exp(5.28241-0.07753*x)  , add=TRUE, col="red", lty="dashed")
> curve(exp(5.340326-0.080079*x)  , add=TRUE, col="blue")
```



Como se pode comprovar, as curvas ajustadas nos dois modelos são diferentes, uma vez que as estimativas b_0 e b_1 são diferentes (pois as verosimilhanças que foram maximizadas são diferentes para componentes aleatórias Normal ou Poisson). No entanto, as curvas ajustadas são semelhantes, o que é também natural e dá alguma tranquilidade relativamente à robustez do ajustamento.

Finalmente, considere-se o valor do desvio, em relação ao qual a afirmação feita no enunciado não é defensável. Não é um valor directamente comparável com o valor do desvio residual obtido no modelo Poisson, uma vez que (i) as funções de verosimilhança que estão na base da definição do desvio são diferentes; e (ii) em modelos com componente aleatória Normal o Desvio e o Desvio reduzido não coincidem, uma vez que existe parâmetro de dispersão $\phi = \sigma^2$ desconhecido. Neste exemplo, o parâmetro de dispersão estimado, se fôr admitido comum a todas as observações, é dado na listagem: $\hat{\phi} = 10.4694$. Recorde-se que esta estimativa é a soma dos quadrados dos resíduos de Pearson, a dividir pelo número de observações ($n = 57$), menos o número de parâmetros do modelo ($m = p + 1 = 2$), isto é

```
> sum(residuals(Elisa2.glm2, type="pearson")^2)/55
[1] 10.46937
```

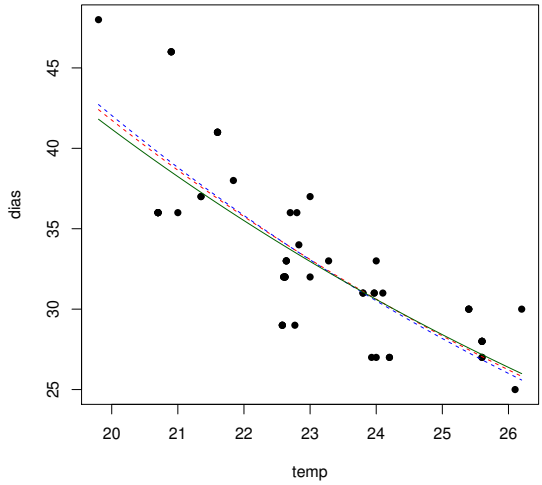
(c) Nesta alínea pede-se para ajustar um modelo linear que corresponda, o melhor possível, aos modelos acima ajustados. Embora a relação entre `dias` e `temp` evidenciada na nuvem de pontos do enunciado pareça razoavelmente linear, o modelo linear que melhor corresponde aos anteriores será o modelo resultante da linearização da relação exponencial que, como foi visto na primeira parte da matéria deste módulo, é a relação linear entre o *logaritmo* de y e x, ou seja, $\ln(y) = \beta_0 + \beta_1 x$, a que corresponde a equação $y = e^{\beta_0 + \beta_1 x}$. Eis o ajustamento obtido no `R`:

```
> Elisa2.lm <- lm(log(dias) ~ temp, data=Elisa2)
> summary(Elisa2.lm)
[...]
Coefficients:
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  5.203766   0.167995   30.98  < 2e-16 ***
temp        -0.074275   0.007281  -10.20 2.72e-14 ***
---
Residual standard error: 0.09165 on 55 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared:  0.6542,Adjusted R-squared:  0.6479
F-statistic: 104.1 on 1 and 55 DF,  p-value: 2.72e-14
```

A curva ajustada tem agora equação $y = \mathrm{e}^{5.203766 - 0.074275\,x}$. Eis o seu ajustamento, obtido com os comandos:

```
> plot(Elisa2, pch=16)
> curve(exp(5.28241-0.07753*x)  , add=TRUE, col="red", lty="dashed")
> curve(exp(5.340326-0.080079*x)  , add=TRUE, col="blue", lty="dashed")
> curve(exp(5.203766-0.074275*x)  , add=TRUE, col="darkgreen")
```



Como se pode verificar, os três modelos ajustados neste caso produzem curvas semelhantes. Em termos de modelo linear, este último modelo explica cerca de $65,4\%$ da variabilidade observada *nos log-dias*. Mas, tratando-se dum modelo linear, é um caso particular dum modelo linear generalizado, e é legítima a pergunta sobre qual o seu desvio residual. Para obter essa informação, podemos re-ajustar o mesmo modelo, usando agora o comando `glm`. Agora, será necessário substituir a funçaõ de ligação logarítmica pela transformação logarítmica da variável resposta `dias`, e especificar a função de ligação *identidade*. Sendo esta a função de ligação canónica para componentes aleatórias Normais, não será necessário especificá-la. Eis o ajustamento:

```
> Elisa2.glm3 <- glm(log(dias) ~ temp, family=gaussian, data=Elisa2)
> summary(Elisa2.glm3)
[...]
Coefficients:
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  5.203766   0.167995   30.98  < 2e-16 ***
temp        -0.074275   0.007281  -10.20 2.72e-14 ***
---
(Dispersion parameter for gaussian family taken to be 0.008400088)
Null deviance: 1.3362  on 56  degrees of freedom
Residual deviance: 0.4620  on 55  degrees of freedom
AIC: -106.71
Number of Fisher Scoring iterations: 2
```

Como se pode confirmar, a curva ajustada é exactamente a mesma que a obtida com o modelo linear após a linearização da relação. O valor de desvio residual ($D = 0.4620$) não é

igual ao obtido no modelo da alínea anterior, uma vez que a distribuição Normal diz agora respeito à transformação logarítimca de Y, e não à própria variável Y. O valor estimado do parâmetro de dispersão ϕ é agora $\hat{\phi} = 0.008400088$ e corresponde ao Quadrado Médio Residual do modelo linearizado (como se viu nas aulas). De facto, e recordando que *QMRE* é o quadrado do valor indicado por `Residual standard error` na listagem de resultados dum modelo linear, temos: $0.09165^2 = 0.008399722$ que, a menos de erros de arredondamento, corresponde ao valor indicado de $\hat{\phi}$.

6. (a) Substituindo, na expressão original da função densidade Gama, ν por α e $\frac{\mu}{\nu}$ por β, tem-se:

$$\frac{\nu^\nu}{\mu^\nu \Gamma(\nu)}\, y^{\nu-1}\, \mathrm{e}^{-\frac{\nu y}{\mu}} \;=\; \frac{1}{\left(\frac{\mu}{\nu}\right)^\nu \Gamma(\nu)}\, y^{\nu-1}\, \mathrm{e}^{-\frac{y}{\left(\frac{\mu}{\nu}\right)}} \;=\; \frac{1}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)}\, y^{\alpha-1}\, \mathrm{e}^{-\frac{y}{\beta}} \;,$$

como se queria mostrar. Nesta nova parametrização (que foi usada pela Prof. Manuela Neves nas aulas iniciais desta disciplina) tem-se $E[Y] = \alpha\beta$ e $V[Y] = \alpha\beta^2$.

(b) É imediato a partir da expressão anterior, tomando $n = \alpha$ e $\gamma = \frac{1}{\beta}$. Tem-se $E[Y] = \frac{n}{\gamma}$ e $V[Y] = \frac{n}{\gamma^2}$.

7. (a) Num Modelo Linear Generalizado, designa-se função de ligação a uma função invertível g, com boas propriedades de regularidade, que relaciona o valor esperado da variável resposta Y com a combinação linear dos preditores, através da seguinte equação:

$$g(E[Y]) \;=\; \beta_0 + \beta_1\, x_1 + \beta_2\, x_2 + ... + \beta_p\, x_p \;.$$

(b) Num MLG, designa-se resíduo do desvio da observação i com que se ajustou o modelo, à raíz quadrada da contribuição dessa i-ésima observação para o valor do desvio. O sinal da raíz quadrada é atribuído tendo em conta a relação entre o valor da variável resposta nessa observação i (i.e., y_i) e o valor médio estimado para uma observação com os mesmos valores dos preditores que a observação i (isto é, $\hat{\mu}_i$). Se $y_i \geq \hat{\mu}_i$ associa-se o sinal positivo ao resíduo, caso contrário o sinal negativo. Assim, sendo o desvio $D = \sum_{i=1}^{n} d_i$, tem-se como resíduo do desvio da observação i, $r_i^D = sinal(y_i - \hat{\mu}_i)\sqrt{d_i}$.

8. (a) i. Foi ajustado um modelo linear generalizado em que a componente aleatória (variável resposta) é uma variável dicotómica com distribuição de Bernoulli, sendo o valor "1" associado à espécie `carduorum` dos escaravelhos, e o valor "0" à espécie `oleracea`; a componente sistemática é definida pela combinação linear de quatro preditores (todos numéricos), designados `TG`, `Elytra`, `Second.Antenna` e `Third.Antenna` (descritos no enunciado); e finalmente a função ligação é (como é característico duma regressão logística) a função de ligação canónica para variáveis com distribuição Bernoulli, ou seja a função *logit*: $g(p) = \ln\left(\frac{p}{1-p}\right)$, sendo p quer o valor esperado de Y, $E[Y]$, quer a probabilidade de um êxito (para os valores observados dos preditores). Assim, a probabilidade dum escaravelho observado ser da espécie `Haltica carduorum`, dados os valores dos preditores é dado por

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{p}{1-p}\right) &= \beta_0 + \beta_1\, TG + \beta_2\, Elytra + \beta_3\, Second.Antenna + \beta_4\, Third.Antenna \\ \Leftrightarrow \quad p &= \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{-(\beta_0 + \beta_1\, TG + \beta_2\, Elytra + \beta_3\, Second.Antenna + \beta_4\, Third.Antenna)}} \end{aligned}$$

ii. O desvio é praticamente nulo ($D = 4.7616 \times 10^{-10}$), sendo o desvio do modelo nulo $D = 54.04$. Recorde-se que o conceito de desvio envolve a diferença da log-verosimilhança do modelo ajustado com a log-verosimilhança dum modelo saturado. Neste caso, o modelo ajustado tem uma log-verosimilhança essencialmente idêntica à de um modelo saturado, mas não por ser efectivamente um modelo saturado. Não se trata dum problema de sobreparametrização, uma vez que existem $n = 39$ observações, e apenas $p + 1 = 5$ parâmetros no modelo. Trata-se apenas dum muito bom modelo discriminante, que permite uma discriminação quase perfeita para as $n = 39$ observações efectuadas. Em certo sentido, é como se se tratasse duma regressão linear com $R^2 = 1$, mas não porque haja um número de observações igual ao número de parâmetros do modelo.

iii. O valor estimado para β_3 é $b_3 = 7.634$. Como se viu (acetato 48), tal significa que para cada micrómetro adicional no comprimento do segundo segmento antenal, a razão de probabilidades $\frac{p}{1-p}$ aumenta num factor de $e^{7.634} = 2067.303$ vezes.

iv. Com base na listagem de resultados dada no enunciado, qualquer dos quatro preditores pode ser excluído, sem perda de qualidade relevante. Os valores de prova (*p-values*) correspondentes aos testes a $\beta_j = 0$ são todos indistinguíveis da unidade! Mesmo assim, e com base nos valores das estatísticas z, a excluir uma variável seria aquela com o valor de z_{calc} mais próximo de zero, ou seja, o preditor `Third.Antenna`.

(b) O modelo final obtido excluiu o preditor comprimento do terceiro segmento de antena. O desvio ficou praticamente igual ($D = 3.846 \times 10^{-10}$), o que é coerente com a resposta dada na alínea anterior. Note-se que a equação para p resultante deste modelo ajustado alterou substancialmente as estimativas dos coeficientes dos preditores restantes. Note-se ainda que a exclusão de um segundo preditor (que seria o comprimento do segundo segmento de antena) já gera um desvio diferente de zero (mais concretamente $D = 9.8414$), o que significaria que o ajustamento deste modelo já não seria igual ao de um modelo saturado.

(c) Considera-se agora o submodelo cujos preditores são apenas `TG` e `Elytra`.

i. Pretende-se inicialmente testar se este submodelo difere do modelo inicial, com os quatro preditores.

Hipóteses: $H_0 : \beta_3 = \beta_4 = 0$ vs. $H_1 : \beta_3 \neq 0 \ \vee \ \beta_4 \neq 0$.

Estatística do teste: $\Lambda = D_s^* - D_c^* \sim \chi^2_2$, onde D^* indica o desvio, e s e c indicam submodelo e modelo completo, respectivamente. No caso duma componente aleatória com distribuição de Bernoulli, desvio e desvio reduzido são a mesma coisa, como se viu nas aulas. Os graus de liberdade (2) resultam do facto de ser essa a diferença entre o número de parâmetros do modelo completo (5) e do submodelo (3).

Nível de significância: $\alpha = 0.05$.

Região Crítica (Unilateral direita): Rejeitar H_0 se $\Lambda_{calc} > \chi^2_{\alpha\,(2)} \approx 5.991465$.

Conclusões: O valor calculado da estatística do teste é $\Lambda_{calc} = 9.8414 - 0 = 9.8414 > 5.991465$, pelo que se rejeita a hipótese nula, ou seja, admite-se que o modelo e o submodelo diferem significativamente, ao nível $\alpha = 0.05$. O valor de prova (*p-value*) associado ao valor calculado da estatística é $p = 0.0073$, como se pode verificar:

```
> 1-pchisq(9.8414,2)
[1] 0.007294023
```

No entanto, convém ter presente que a distribuição da estatística do teste de Wilks é apenas assintótica e a dimensão da amostra ($n = 39$) não é muito grande, pelo que haverá que ser cauteloso na consideração deste teste.

ii. A probabilidade de pertença à espécie *carduorum* é dada, no modelo ajustado, por:

$$\hat{p} \;=\; \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-(b_0+b_1\,TG+b_2\,Elytra)}} \;=\; \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-(10.1559-0.4271\,TG+0.2505\,Elytra)}}\;.$$

Assim, para um escaravelho com $TG = 200$ e $Elytra = 250$, a probabilidade de ser da espécie *carduorum* é estimada por:

$$\hat{p} \;=\; \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-(10.1559-0.4271\,\times 200+0.2505\,\times 250)}} \;=\; 3.242703\times 10^{-6}\;.$$

A probabilidade de ser da espécie *oleracea* será a diferença para a unidade:

$$1-\hat{p} \;=\; 1-0.000003243 \;=\; 0.999996757\;.$$

Assim, é quase seguro que um escaravelho com as referidas características seja da espécie *oleracea*. Esta conclusão é sustentada por uma análise dos dados, já que os escaravelhos da espécie *carduorum* têm, em geral, valores de `TG` menores que 200 e valores de `Elytra` maiores que 250.

(d) O modelo considerado nesta alínea utiliza a função de ligação log-log do complementar:

$$\hat{p} \;=\; 1-\mathrm{e}^{-\mathrm{e}^{b_0+b_1\,TG+b_2\,Elytra}} \;=\; 1-\mathrm{e}^{-\mathrm{e}^{7.78272-0.33889\,TG+0.19769\,Elytra}}\;.$$

i. O facto de os pontos estarem muito próximos da bissectriz de equação $y = x$ indica que as probabilidades estimadas de pertença à espécie *carduorum*, obtidas nos dois modelos, são muito semelhantes. Isso é igualmente verdade para a "observação solitária" 19. Embora as probabilidades de pertença à referida espécie sejam próximas de 0.5 (ou seja, trata-se dum escaravelho difícil de classificar através destes modelos), essa probabilidade estimada é muito semelhante nos dois modelos, como se depreende da proximidade do ponto à recta bissectriz.

ii. Com base na informação disponível, o modelo desta alínea será preferível, uma vez que tem um desvio (logo também um AIC) mais baixo. Assinale-se que os valores dos desvios são comparáveis, uma vez que se trata de modelos com a mesma componente aleatória e ajustados com base nos mesmos dados. A função de ligação log-log do complementar parece ser mais adequada à natureza da relação entre a probabilidade de pertença à espécie *carduorum* e a componente sistemática do modelo.

iii. A probabilidade de pertença à espécie *carduorum* é agora dada por

$$\hat{p} \;=\; 1-\mathrm{e}^{-\mathrm{e}^{7.78272-0.33889\,\times 200+0.19769\,\times 250}} \;=\; 2.560321\times 10^{-5}.$$

Tal como para o modelo de regressão logística considerado na alínea anterior, trata-se duma probabilidade muito próxima de zero. Também com este modelo, um escaravelho com os valores referidos de `TG` e `Elytra` seria classificado como sendo da espécie *oleracea*.

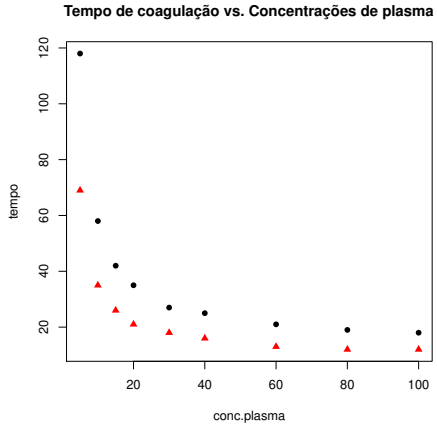
9. Ver acetatos das aulas.

10. Os dados encontram-se na *data frame* `sangue`.

(a) O comando `R` para construir o gráfico pedido pode ser o seguinte:

```
> plot(tempo ~ conc.plasma, col=as.numeric(lote), pch=as.numeric(lote)+15,
              data=sangue, main="Tempo de coagulação vs. Concentrações de plasma")
```

A utilização do comando `as.numeric` no argumento `pch` visa converter os níveis do factor `lote` para números naturais (neste caso, 1 e 2). A parte "`+15`" do argumento `pch` visa garantir a utilização dos símbolos 16 e 17, que correspondem respectivamente aos círculos e triângulos preenchidos. Eis o resultado:

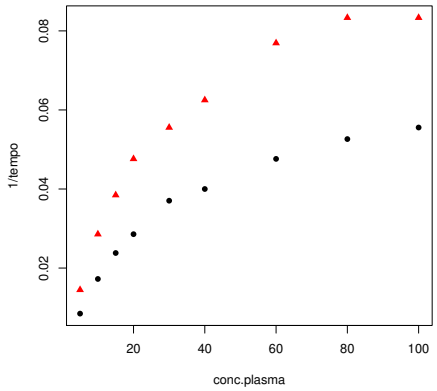


A forma da relação sugere uma curva de tipo hiperbólico, ou eventualmente uma exponencial decrescente.

(b) Uma relação do tipo $y = \frac{1}{\beta_0+\beta_1\, x}$ corresponde a uma relação linear entre $y^* = \frac{1}{y}$ e x. Assim, para validar se a relação de tipo hiperbólico proposta é adequada, pode construir-se uma nuvem de pontos relacionando os recíprocos de y com x:

```
> plot(1/tempo ~ conc.plasma, col=as.numeric(lote), pch=as.numeric(lote)+15,
                                                              data=sangue)
```

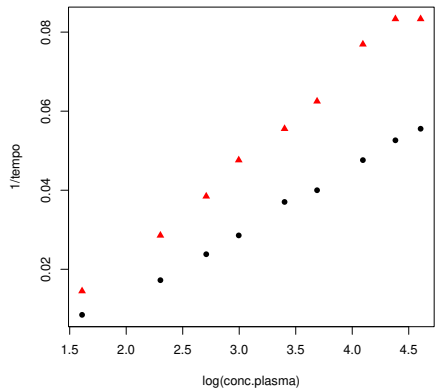
O gráfico resultante é:



Uma vez que a relação obtida não é linear, deve concluir-se que a relação de tipo $tempo = \frac{1}{\beta_0+\beta_1\, conc}$ que foi proposta não é a mais adequada.

(c) Efectuando uma transformação logarítmica da variável preditora, a relação entre $y^* = \frac{1}{y}$ e $x^* = \ln(x)$ já é bem aproximada por uma relação linear:

```
> plot(1/tempo ~ log(conc.plasma), col=as.numeric(lote), pch=as.numeric(lote)+15,
                                                              data=sangue)
```



Assim, a equação $y = \frac{1}{\beta_0+\beta_1 \ln(x)}$ parece ser uma descrição adequada para relacionar tempo de coagulação (y) e concentração de plasma (x).

(d) São pedidos dois modelos lineares generalizados, ambos com o preditor $X = \ln(conc)$ e variável resposta $Y = tempo$, e ambos com função de ligação recíproco: $g(\mu) = \frac{1}{\mu}$.

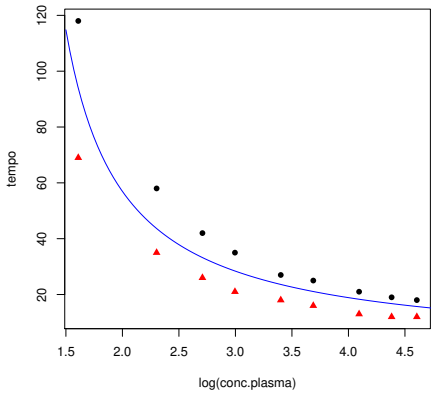
i. No primeiro caso, sugere-se admitir que Y tem distribuição Normal. O comando `R` para ajustar este modelo é:

```
> sangue.glmN <- glm(tempo~log(conc.plasma),family=gaussian(link="inverse"),
+                                                                  data=sangue)
> sangue.glmN

Call:
glm(formula=tempo~log(conc.plasma), family=gaussian(link="inverse"), data=sangue)

Coefficients:
     (Intercept)  log(conc.plasma)
        -0.01784           0.01770

Degrees of Freedom: 17 Total (i.e. Null);  16 Residual
Null Deviance:     11880
Residual Deviance: 1875  AIC: 140.7
```

Assim, a curva ajustada é $y = \frac{1}{-0.01784+0.01770\,x}$, curva essa que é sobreposta à nuvem de pontos de $Y = tempo$ *vs.* $X = \ln(conc)$, através dos comandos

```
> plot(tempo~log(conc.plasma), col=as.numeric(lote), pch=as.numeric(lote)+15,
                                                                  data=sangue)
> curve(1/(-0.01784+0.01770*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="blue")
```

produzindo o seguinte gráfico:

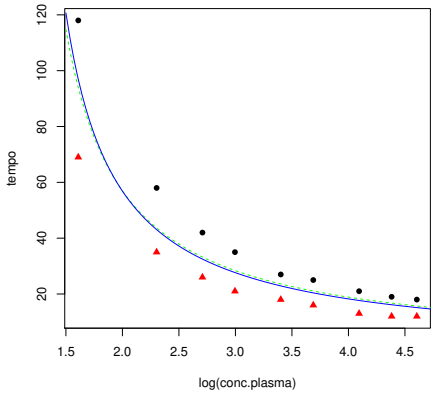


ii. O ajustamento dum modelo com variável resposta gama obtém-se de forma análoga, embora neste caso (como é dito no enunciado) não seja necessário especificar a função de ligação usada, uma vez que a ligação canónica para distribuição gama é precisamente a função recíproco. Assim, o comando necessário e o respectivo resultado são:

```
> sangue.glmG <- glm(tempo ~ log(conc.plasma),  family=Gamma, data=sangue)
> sangue.glmG
Call: glm(formula=tempo ~ log(conc.plasma), family=Gamma, data=sangue)
Coefficients:
     (Intercept)  log(conc.plasma)
        -0.01963           0.01861
Degrees of Freedom: 17 Total (i.e. Null);  16 Residual
Null Deviance:     7.709
Residual Deviance: 1.018  AIC: 123.2
```

A curva ajustada é indicada em baixo (a azul), comparada com a curva (a verde a tracejado) obtida com o modelo Normal da alínea anterior. As duas curvas são quase indistinguíveis. O gráfico foi obtido com os seguintes comandos:

```
> plot(tempo~log(conc.plasma),col=as.numeric(lote),pch=as.numeric(lote)+15,data=sangue)
> curve(1/(-0.01784+0.01770*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="green", lty="dashed")
> curve(1/(-0.01963+0.01861*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="blue")
```



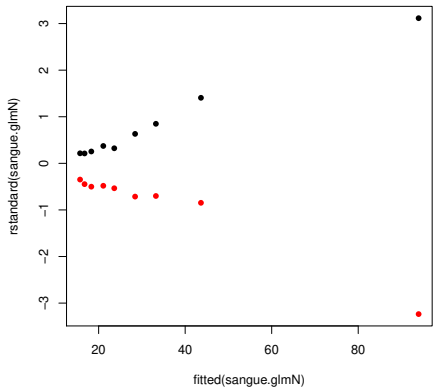
(e) Não é possível uma comparação com base nos desvios de cada modelo, uma vez que as distribuições associadas à componente aleatória são diferentes em cada caso (pelo que os valores das log-verosimilhanças não são comparáveis). É possível efectuar testes comparando cada modelo com o respectivo modelo nulo, mas os resultados são practicamente idênticos

(como seria de esperar, dada a grande proximidade nas curvas ajustadas):

```
> anova(sangue.glmN, test="LRT")

Analysis of Deviance Table
Model: gaussian, link: inverse
Response: tempo
Terms added sequentially (first to last)
                 Df Deviance Resid. Df Resid. Dev  Pr(>Chi)
NULL                                17    11884.5
log(conc.plasma)  1    10009        16     1875.4 < 2.2e-16 ***
---

> anova(sangue.glmG, test="LRT")

Analysis of Deviance Table
Model: Gamma, link: inverse
Response: tempo
Terms added sequentially (first to last)
                 Df Deviance Resid. Df Resid. Dev  Pr(>Chi)
NULL                                17     7.7087
log(conc.plasma)  1   6.6904        16     1.0183 < 2.2e-16 ***
```

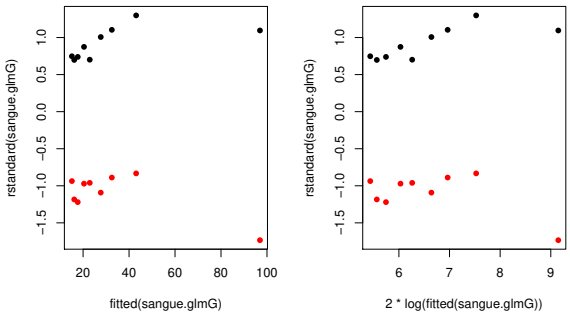
Em ambos os casos a conclusão é que os modelos ajustados são claramente melhores do que os respectivos modelos nulos, e em ambos os casos com *p-values* indistinguíveis de zero.
Consideremos o gráfico dos resíduos (estandardizados) *vs.* os valores médios ajustados pelo modelo, reproduzidos na seguinte nuvem de pontos, onde se utilizaram cores diferentes para distinguir o lote de proveniência das observações. O gráfico foi produzido com o comando:

```
> plot(fitted(sangue.glmN),rstandard(sangue.glmN),col=as.numeric(sangue$lote),pch=16)
```



Como se pode constatar, existe um padrão nos gráficos que distingue as observações de cada lote, sendo as observações do lote 1 indicadas a preto. Esse padrão reflecte o facto de não ter sido utilizada a informação relativa ao lote de proveniência no modelo ajustado. Pelo que se pode ver no gráfico, esse factor tem alguma importância, uma vez que as observações do Lote 1 são em geral maiores (têm os resíduos positivos), facto que se pode também observar na tabela dos dados ou na nuvem de pontos com a curva ajustada sobreposta (ver acima). Assim, este padrão sugere que o modelo deve prever *efeitos de lote.* algo que será estudado

nas alíneas seguintes. Por outro lado, existe um segundo padrão visível neste gráfico: a forma em funil dos resíduos, que sugere que os resíduos (estandardizados) crescem em valor absoluto com o aumento do valor de $\hat{\mu}$. Assim, a dispersão dos valores da área foliar não parece ser constante. Haveria duas formas de tornear este problema: manter as características do modelo ajustado (distribuição Normal, função de ligação logarítmica), mas prever parâmetros de dispersão diferenciados para as diferentes observações (matéria que não foi dada nesta disciplina), ou alternativamente, passar para a distribuição Gama da variável resposta, uma vez que nessa distribuição (e mesmo admitindo parâmetro de dispersão ϕ constante para todas as observações), a variância das observações será proporcional ao quadrado da média (acetato 141). Eis (à esquerda), o gráfico de resíduos estandardizados *vs.* valor esperado ajustado, correspondente a admitir uma variável resposta com distribuição Gama e (à direita), um gráfico análogo com a transformação logarítmica no eixo horizontal (como sugerido no acetato 161), novamente distinguindo os lotes de proveniência das observações através da côr.



É visível que o "efeito funil" fica bastante mitigado, ou desaparece mesmo. Quanto à presença dum efeito de lote, será estudado nas alíneas seguintes.

(f) Os modelos pedidos ajustam-se no R através dos seguintes comandos. Para o modelo Normal:

```
> sangue.glmNlote <- glm(formula = tempo ~ log(conc.plasma)*lote,
+                                family=gaussian(link = "inverse"), data=sangue)
> sangue.glmGlote <- glm(formula=tempo ~ log(conc.plasma)*lote,
+                                    family=Gamma(link = "inverse"), data=sangue)
```

Eis os resultados obtidos no ajustamento do modelo Normal:

```
> sangue.glmNlote
Call:
glm(formula=tempo~log(conc.plasma)*lote,family=gaussian(link="inverse"),data=sangue)
Coefficients:
        (Intercept)   log(conc.plasma)       lote2   log(conc.plasma):lote2
          -0.014903           0.014498   -0.007170                 0.008181
Degrees of Freedom: 17 Total (i.e. Null);  14 Residual
Null Deviance:     11880
Residual Deviance: 34.49  AIC: 72.79
```

Numa primeira observação, boa parte do desvio associado ao modelo nulo desapareceu com este modelo. O desvio agora obtido é também bastante inferior ao obtido no modelo Normal, mas sem a consideração dos lotes (sendo esse desvio 1875.4, e agora apenas 34.49). Para o modelo Gama obtiveram-se os resultados:

```
> sangue.glmGlote
Call: glm(formula=tempo~log(conc.plasma)*lote,family=Gamma(link="inverse"),data=sangue)
Coefficients:
        (Intercept)   log(conc.plasma)        lote2   log(conc.plasma):lote2
          -0.016554           0.015343    -0.007354                 0.008256
Degrees of Freedom: 17 Total (i.e. Null);  14 Residual
Null Deviance:     7.709
Residual Deviance: 0.0294  AIC: 63.2
```

Tal como no modelo Normal, a introdução de efeitos de lote permitiu reduzir o desvio de 1.0183 (em comparação com 7.709 do modelo Normal nulo) para apenas 0.0294, uma redução considerável que é provavelmente significativa, o que adiante se estudará.

(g) No modelo Normal, a curva ajustada para as observações do lote 1 é

$$y = \frac{1}{-0.01490 + 0.014498\,x},$$

onde y indica tempo e x log-concentração de plasma. Para as observações do lote 2 tem-se:

$$y = \frac{1}{(-0.01490 - 0.007170) + (0.014498 + 0.008181)\,x} = \frac{1}{-0.02207 + 0.022679\,x}.$$

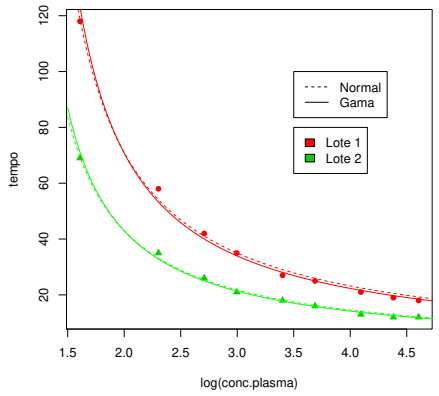
No modelo Gama, a curva ajustada para as observações do lote 1 é

$$y = \frac{1}{-0.016554 + 0.015343\,x},$$

onde y indica tempo e x log-concentração de plasma. A curva ajustada para as observações do lote 2 é

$$y = \frac{1}{(-0.016554 - 0.007354) + (0.015343 + 0.008256)\,x} = \frac{1}{-0.023908 + 0.023599\,x}\ .$$

Admitiu-se que existe uma relação linear entre $tempo^{-1}$ e log-concentração, sendo que nessa relação linear o declive é maior no lote 2, e a ordenada na origem é menor (sendo ambas as ordenadas na origem negativas). Tendo em conta que, nesta relação linear, y é $\frac{1}{tempo}$, podemos afirmar que esta recíproco cresce mais depressa com a log-concentração no Lote 2, ou seja que *o tempo de coagulação* decresce mais depressa com a log-concentração no Lote 2, embora partindo dum tempo de coagulação mais baixo. Eis as curvas ajustadas pelos modelos Normal e Gama, mas prevendo efeitos de lote.



O gráfico e as legendas acima indicadas foram produzidos com os seguintes comandos do R.

```
> plot(tempo~log(conc.plasma),col=as.numeric(lote)+1,pch=as.numeric(lote)+15,data=sangue)
> legend(3.5,80, legend=paste("Lote",c(1,2)), fill=c(1,2)+1)
> legend(3.5,100, legend=c("Normal","Gama"), lty=c("dashed","solid"))
> curve(1/(-0.01490+0.014498*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="red", lty="dashed")
> curve(1/(-0.016554+ 0.015343*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="red")
> curve(1/(-0.023908+0.023599*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="green")
> curve(1/(-0.02207+0.022679*x), from=1.5, to=5, add=TRUE, col="green", lty="dashed")
```

(h) Existem duas questões que vale a pena abordar. A primeira é a de saber se a incorporação do factor `lote` no modelo melhorou significativamente o ajustamento. A resposta é (previsivelmente, após verificar o ajustamento das curvas obtidas à nuvem de pontos) positiva. Tal facto pode ser confirmado efectuando os testes de Wilks para comparar o modelo completo, cuja equação é

$$y \;=\; \frac{1}{(\beta_0 + \alpha_{0:j}) + (\beta_1 + \alpha_{1:j})\, x}$$

sendo $\alpha_{i:j}$ o acréscimo ao parâmetro β_i, associado ao lote j (com $\alpha_{0:1} = \alpha_{1:1} = 0$). com o submodelo, que prevê uma única relação para ambos os lotes:

$$y \;=\; \frac{1}{\beta_0 + \beta_1\, x}\ .$$

Formalizando este teste, quer para os modelos baseados na Normal, quer para os modelos baseados na Gama:

Hipóteses: $H_0 : \alpha_{0:2} = \alpha_{1:2} = 0$ vs. $H_1 : \alpha_{0:2} \neq 0 \ \vee \ \alpha_{1:2} \neq 0$.

Estatística do teste: $\Lambda \;=\; D^*_s - D^*_c \;\sim\; \chi^2_2$, sob H_0, onde D^* indica o desvio *reduzido*, e s e c indicam submodelo e modelo completo, respectivamente. Os graus de liberdade (2) resultam do facto de ser essa a diferença entre o número de parâmetros do modelo completo (4) e do submodelo (2).

Nível de significância: $\alpha = 0.05$. Note-se que a distribuição desta estatística de teste é apenas assintótica e o número de observações neste caso não é muito grande, pelo que haverá sempre alguma dúvida sobre a validade da conclusão.

Região Crítica (Unilateral direita): Rejeitar H_0 se $\Lambda_{calc} > \chi^2_{\alpha\,(2)} \approx 5.991465$.

Conclusões: O valor calculado da estatística do teste tem de ter em conta o facto de os desvios apresentados nas listagens produzidas pelo R serem os desvios *não* reduzidos, enquanto que a estatística baseia-se nos desvios reduzidos. Recorde-se (acetato 115) que a relação entre os desvios D e os desvios reduzidos D^* é: $D^* = \frac{D}{\phi}$. Assim, para calcular a estatística do teste será necessário ter uma estimativa do parâmetro de dispersão ϕ (que se admite comum para todas as observações) e depois usar essa estimativa, $\hat{\phi}$, no cálculo da estatística do teste: $\Lambda_{calc} = D^*_s - D^*_c = \frac{D_s - D_c}{\hat{\phi}}$. Para obter as estimativas do parâmetro de dispersão ϕ precisamos do componente `dispersion` do comando `summary`. É conveniente utilizar as estimativas obtidas com os modelos completos, cujos ajustamento são necessariamente melhores. Para cada modelo, temos:

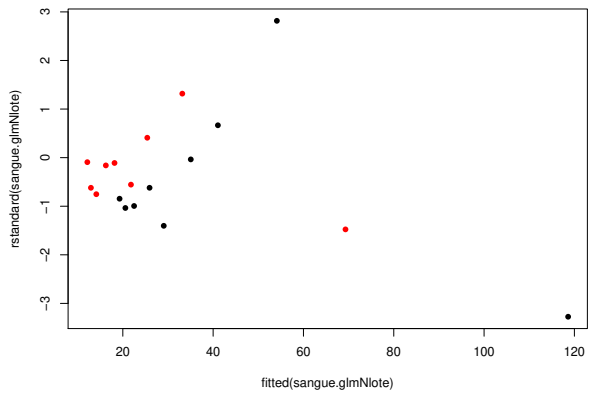
```
> summary(sangue.glmNlote)$disp
[1] 2.463579
> summary(sangue.glmGlote)$disp
[1] 0.002129707
```

Assim, e tendo em conta os valores dos desvios indicados nas alíneas anteriores, a estatística calculada para o teste de Wilks é, no caso dos modelos Normais, $\Lambda_{calc} = \frac{1875.4-34.49}{2.463579} = 747.2502 \gg 5.991465$. Para os modelos Gama, tem-se $\Lambda_{calc} = \frac{1.0183-0.0294}{0.002129707} = 464.3362 \gg 5.991465$. Os valores tão elevados de Λ_{calc} são, em ambos os casos, seguramente significativos mesmo para níveis de significância muito inferiores a $\alpha = 0.05$. Esta constatação é reconfortante, dadas as dúvidas (já referidas) associadas à natureza assintótica da distribuição da estatística do teste.

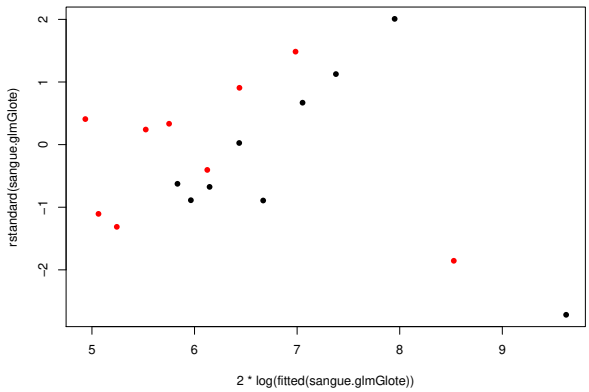
Os resultados dos testes são confirmados pela utilização do comando `anova` do `R`.

```
> anova(sangue.glmN, sangue.glmNlote, test="LRT")
Analysis of Deviance Table

Model 1: tempo ~ log(conc.plasma)
Model 2: tempo ~ log(conc.plasma) * lote
  Resid. Df Resid. Dev Df Deviance  Pr(>Chi)
1        16    1875.38
2        14      34.49  2   1840.9 < 2.2e-16 ***
---
> anova(sangue.glmG, sangue.glmGlote, test="LRT")
Analysis of Deviance Table

Model 1: tempo ~ log(conc.plasma)
Model 2: tempo ~ log(conc.plasma) * lote
  Resid. Df Resid. Dev Df Deviance  Pr(>Chi)
1        16     1.0183
2        14     0.0294  2  0.98886 < 2.2e-16 ***
```

O segundo aspecto para analisar diz respeito à adequação dos modelos com efeitos de lotes aos dados. Consideremos de novo os gráficos de resíduos estandardizados contra os valores esperados ajustados (ou suas transformações) já considerados acima. O gráfico para o modelo Normal é:



Para o modelo Gama tem-se (com a transformação logarítmica no eixo horizontal):



Em ambos os casos, quaisquer padrões são pelo menos muito menos intensos do que no caso dos modelos sem efeitos do factor `lote`: a separação clara entre os resíduos associados a cada lote desapareceu. No gráfico associado ao modelo Gama a ausência de padrões na dispersão dos dados parece ser mais satisfatória.