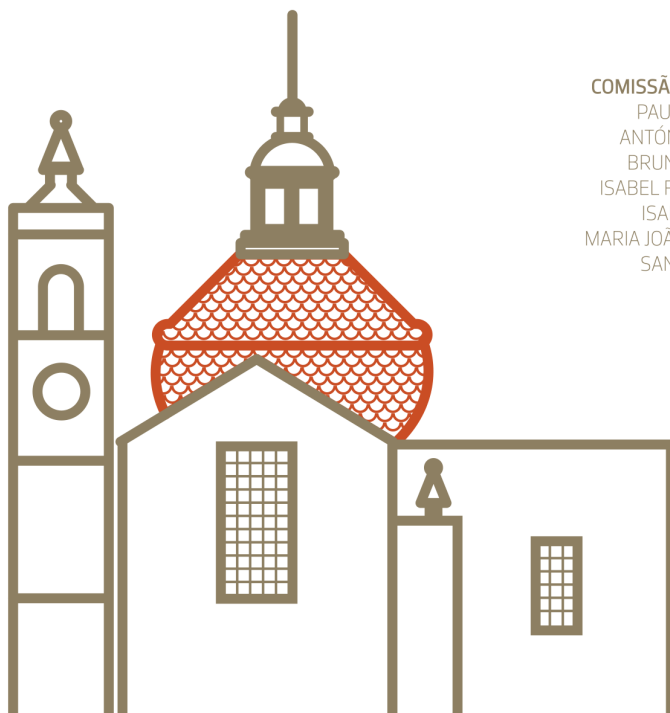


XXIV CONGRESSO  
**SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE ESTATÍSTICA**

**ATAS**

# **Estatística: Desafios Transversais às Ciências com Dados**



**COMISSÃO EDITORIAL**

PAULA MILHEIRO  
ANTÓNIO PACHECO  
BRUNO DE SOUSA  
ISABEL FRAGA ALVES  
ISABEL PEREIRA  
MARIA JOÃO POLIDORO  
SANDRA RAMOS



# **Estatística: Desafios Transversais às Ciências com Dados**

Atas do XXIV Congresso da  
Sociedade Portuguesa de Estatística

Amarante, 06 a 09 de novembro de 2019

## **Editores**

*Paula Milheiro*  
*António Pacheco*  
*Bruno de Sousa*  
*Isabel Fraga Alves*  
*Isabel Pereira*  
*Maria João Polidoro*  
*Sandra Ramos*

Fevereiro, 2021

**Edições SPE**

© 2021, Sociedade Portuguesa de Estatística

**Editores:** Paula Milheiro, António Pacheco, Bruno de Sousa, Isabel Fraga Alves, Isabel Pereira, Maria João Polidoro e Sandra Ramos

**Título:** Estatística: Desafios Transversais às Ciências com Dados  
Atas do XXIV Congresso da Sociedade Portuguesa de Estatística

**Editores:** Sociedade Portuguesa de Estatística

**Conceção gráfica da capa:** Ana Ferrás (ESTG - IPP)

**ISBN:** 978-972-8890-47-6

## Prefácio

Esta obra coletiva tem como objetivo partilhar com o leitor desenvolvimentos recentes da Estatística, das Probabilidades e dos Processos Estocásticos e suas Aplicações no contexto nacional. É constituída por 17 artigos independentes, dos quais 6 estão redigidos em Língua Inglesa e os 11 restantes em Português, seguindo a opção dos seus autores. Os artigos contidos nesta obra foram selecionados de entre o conjunto de artigos submetidos para apreciação à Comissão Científica e resultaram do habitual processo de revisão pelos pares, tendo todos eles sido previamente apresentados na forma de comunicação oral, no âmbito do XXIV Congresso da Sociedade Portuguesa de Estatística (SPE), que decorreu em Amarante, de 06 a 09 de novembro de 2019. A diversidade dos temas abordados pelos diferentes autores e a qualidade das contribuições é demonstrativa da pujança da atividade que se desenvolve em Portugal, nesta área do saber. Não temos dúvidas sobre a relevância desta obra e de que o leitor nela encontrará razões para refletir sobre os tópicos que aqui são abordados, no decurso das suas atividades científicas, académicas ou profissionais, tomando *quicá* como ponto de partida estes mesmos textos.

Fevereiro de 2021

*Os Editores*



## Agradecimentos

Para os membros da SPE que tão generosamente colaboraram nesta publicação, com os seus trabalhos de revisão, vão os nossos sinceros agradecimentos e o nosso reconhecimento de que o seu contributo permitiu valorizar os conteúdos aqui apresentados.

**Adelaide Figueiredo**, Faculdade de Economia, Universidade do Porto

**Aldina Correia**, Escola Superior de Tecnologia e Gestão, Instituto Politécnico do Porto

**Ana Ferreira**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Ana Pires**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Arminda Manuela Gonçalves**, Universidade do Minho

**Conceição Amado**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Carlos Braumann**, Universidade de Évora

**Cristina Martins**, Universidade de Coimbra

**Elisete Correia Mourão**, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

**Esmeralda Gonçalves**, Universidade de Coimbra

**Frederico Caeiro**, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa

**Inês Sousa**, Universidade do Minho

**Isabel M. Rodrigues**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Isabel Natário**, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa

**Isabel Silva**, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto

**Ivette Gomes**, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa

**Joana Leite**, Instituto Superior de Contabilidade e Administração de Coimbra, Instituto Politécnico de Coimbra

**João Branco**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Manuela Neves**, Instituto Superior de Agronomia, Universidade de Lisboa

**Manuel Scotto**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Maria Conceição Serra**, Universidade do Minho

**Maria Rosário Oliveira**, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

**Marta Ferreira**, Universidade do Minho

**Miguel Felgueiras**, Escola Superior de Tecnologia e Gestão, Instituto Politécnico de Leiria

**Nelson Antunes**, Universidade do Algarve

**Nuno Sepúlveda**, London School of Hygiene and Tropical Medicine

**Paula Brito**, Faculdade de Economia, Universidade do Porto

**Regina Bispo**, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa

**Rui Martins**, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa

**Russell Alpizar-Jara**, Universidade de Évora

**Sandra Dias**, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

**Sílvio Velosa**, Universidade da Madeira

**Sónia Gouveia**, Universidade de Aveiro



Um agradecimento especial é devido à Direção da Sociedade Portuguesa de Estatística que colaborou diretamente na realização deste congresso e à Comissão Organizadora do Congresso.

## **Direção da SPE**

**Maria Eduarda Silva (Presidente)**, Universidade do Porto

**Cláudia Nunes Philippart**, Universidade de Lisboa

**Conceição Amado**, Universidade de Lisboa

**Isabel Pereira**, Universidade de Aveiro

**Maria Esmeralda Gonçalves**, Universidade de Coimbra

## **Comissão Organizadora do Congresso**

**Maria João Polidoro (Presidente)**, Instituto Politécnico do Porto

**Sandra Ramos (Presidente)**, Instituto Politécnico do Porto

**Ana Borges**, Instituto Politécnico do Porto

**Luísa Hoffbauer**, Instituto Politécnico do Porto

## **Comissão Científica do Congresso**

**Paula Milheiro (Presidente)**, Universidade do Porto

**António Pacheco**, Universidade de Lisboa

**Bruno de Sousa**, Universidade de Coimbra

**Isabel Fraga Alves**, Universidade de Lisboa

**Isabel Pereira**, Universidade de Aveiro

**Maria João Polidoro**, Instituto Politécnico do Porto

**Sandra Ramos**, Instituto Politécnico do Porto



# Índice

<b>CDPCA: 10 years after</b>	<b>1</b>
<i>Adelaide Freitas</i>	
<b>Taxas de erros de tipos I e II de alternativas não paramétricas à ANOVA com dois fatores: comparação entre delineamentos equilibrados e desequilibrados com dados discretos</b>	<b>13</b>
<i>Anabela Afonso e Dulce G. Pereira</i>	
<b>Sobre a escolha estatística de modelos extremais na metodologia POT</b>	<b>29</b>
<i>António Gomes, Délia Gouveia-Reis e Sandra Mendonça</i>	
<b>Delineamento amostral para estimar concentração média de organismos em água de lastro por abordagem bayesiana semiparamétrica</b>	<b>45</b>
<i>Eliardo G. Costa, Carlos Daniel Paulino e Julio M. Singer</i>	
<b>Propriedade de Taylor e curtose em modelos CP-INARCH(1)</b>	<b>59</b>
<i>Esmeralda Gonçalves, Cristina Martins e Nazaré Mendes-Lopes</i>	
<b>Análise de filas <math>M^X/M/1/n</math> com bloqueio</b>	<b>73</b>
<i>Fátima Ferreira, António Pacheco e Helena Ribeiro</i>	
<b>On point processes and preferential sampling</b>	<b>89</b>
<i>Isabel Natário e M. Lucília Carvalho</i>	
<b>Comparação assintótica de duas classes de estimadores de um parâmetro de forma de segunda-ordem</b>	<b>107</b>
<i>Ivanilda Cabral, Frederico Caeiro e M. Ivette Gomes</i>	
<b>Modelos paramétricos flexíveis para acontecimentos recorrentes</b>	<b>121</b>
<i>Ivo Sousa-Ferreira, Cristina Rocha e Ana Maria Abreu</i>	

<b>Threshold selection for wave heights: asymptotic methods based on L-moments</b>	<b>137</b>
<i>Jessica Silva Lomba e Maria Isabel Fraga Alves</i>	
<b>Statistical challenges of investigating a disease with a complex diagnosis</b>	<b>153</b>
<i>João Malato, Luís Graça e Nuno Sepúlveda</i>	
<b>Ensino da Estatística e <i>software</i>: experiências, interrogações e preocupações</b>	<b>169</b>
<i>Jorge Cadima</i>	
<b>An identity between Welch's approximate and Scheffé's exact <i>t</i> solutions to the Behrens-Fisher problem</b>	<b>183</b>
<i>Luís Oliveira e Sílvia Velosa</i>	
<b>Combining various dissimilarity measures for clustering electricity market prices</b>	<b>197</b>
<i>Margarida Cardoso, Ana Martins e João Lagarto</i>	
<b>Estimação de um índice de valores extremos positivo através de médias generalizadas e em ambiente de não-regularidade</b>	<b>213</b>
<i>M. Ivette Gomes, Lígia Henriques-Rodrigues e Dinis Pestana</i>	
<b>Análise de regressão linear com autocorrelação nos erros para dados censurados</b>	<b>227</b>
<i>Rodney Sousa, Isabel Pereira e Maria Eduarda Silva</i>	
<b>Semiestabilidade e max-semiestabilidade</b>	<b>243</b>
<i>Sandra Dias e Maria da Graça Temido</i>	
<b>Índice de autores</b>	<b>257</b>

# CDPCA: 10 years after

Adelaide Freitas

Departamento de Matemática, Universidade de Aveiro, Portugal, e  
Centro de Investigação e Desenvolvimento em Matemática e Aplica-  
ções (CIDMA), Aveiro, Portugal, *adelaide@ua.pt*

**Keywords:** Clustering; Sparse principal components analysis

**Abstract:** Clustering and Disjoint Principal Component Analysis (CDPCA) is a constrained principal component analysis for multivariate numerical data. The main goal is to detect clusters of objects and, simultaneously, to find a partitioning of variables such that the between cluster deviance in the reduced space of such partition is maximized. The partition formed by a disjoint set of the original variables identifies the groups of variables belonging to the CDPCA components. Recently, this methodology has been implemented in a R-function called `CDpca`. In this work, we review some theoretical issues of the CDPCA model and present two applications on real data sets using the R-function `CDpca`.

## 1 Introduction

In order to extract information of multivariate data, some authors apply a sequential procedure as follow: first apply Principal Component Analysis (PCA), in order to reduce the dimensionality of the data by taking the resultant score matrix associated to the first few principal components, and then proceed to the reduction of the objects in order to get homogeneous groups by applying a clustering method on that reduced score matrix. However, this reduced score matrix may mask the clustering structure of the original data [1]. To overcome this drawback, a constrained principal component analysis for multivariate numerical data, called Clustering and Disjoint Principal Component Analysis (CDPCA), was proposed ten years ago, in 2009, by Vichi and Saporta [2]. CDPCA is aimed to detect

Table 1: Distribution of citations of [2] found in SCOPUS.

year	CDPCA cited in papers as			Papers with pdf not available
	Method	Application	only mention	
2009-2011	-	-	1	2
2012	-	1	1	-
2013-2014	-	-	6	4
2015	2	-	-	2
2016	2	-	3	1
2017	2	-	1	1
2018	1	-	1	3
2019	1	-	2	-

clusters of objects and, simultaneously, to find a partitioning of variables such that the between cluster deviance in the reduced space of such partition is maximized. Concretely, the main goal of CDPCA is to providing a nonoverlapping clustering of homogeneous objects on a reduced set of sparse CDPCA components such that the set of the object centroids presents maximum variance in the reduced space defined by the components. From the point of view of practical applications, how useful has this methodology been? A quick search by Scopus (December/2019), we found 37 citations of [2]. Nevertheless, among the 24 publications made available, eight mention CDPCA in Method sections and a single paper present applications of the CDPCA methodology (Table 1) but without indication of any software used.

Recently, we have computationally developed a function in the open-source software R [3] to apply CDPCA on standardized data, namely the function `CDpca` available in the package `biplotbootGUI` [4].

The paper is organized as follows. In Section 2 a brief overview of the CDPCA model is presented. In Section 3, a description of the implemented R-function `CDpca` is provided. In the last section, two applications on real data sets are illustrated.

## 2 The CDPCA model

The CDPCA methodology is aimed at providing a description of any numerical (previously standardized) data matrix  $\mathbf{X}$ , with  $I$  objects and  $J$  variables, in terms of a set of  $P$  ( $P < I$ ) object centroids, which are obtained from applying a clustering method (k-means) on the objects of the matrix  $\mathbf{X}$ , and a set of  $Q$  ( $Q < J$ ) principal components resultant from PCA applied on a centroid matrix which is obtained from  $\mathbf{X}$  when each original object is replaced by its cluster centroid. Concretely, given a  $(I \times J)$  multivariate data matrix  $\mathbf{X}$ , the CDPCA model describes  $\mathbf{X}$  in the following manner:

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \mathbf{U}\bar{\mathbf{X}} + \mathbf{E}_1 && \text{(k-means on } \mathbf{X}) \\ &= \mathbf{U}\bar{\mathbf{Y}}\mathbf{A}^T + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 && \text{(PCA on } \mathbf{U}\bar{\mathbf{X}}) \\ &= \mathbf{U}\bar{\mathbf{Y}}\mathbf{A}^T + \mathbf{E} && (1) \end{aligned}$$

where  $\mathbf{U}$  is a  $(I \times P)$  binary and row stochastic matrix storing the assignment of the  $I$  objects into the  $P$  clusters,  $\mathbf{A}$  is a  $(J \times Q)$  columnwise orthonormal matrix (*i.e.*,  $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}$ ) that represents the component (unit-)loading (*i.e.*, the coefficients of the linear combinations of the original variables) matrix having only one nonzero element by row which assigns the component (column) for each variable identified by row,  $\bar{\mathbf{X}}$  is the  $(P \times J)$  object centroid matrix in the original space,  $\bar{\mathbf{Y}} := \bar{\mathbf{X}}\mathbf{A}$  is the  $(P \times Q)$  object centroid matrix in the reduced space of the components and  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$  with  $\mathbf{E}_1$ ,  $\mathbf{E}_2$  the  $(I \times J)$  error matrices arising from k-means and PCA, respectively. In this sense, the structure of the matrix  $\mathbf{X}$  defined by model (1) is visually described by “blocks” as illustrated in a toy example depicted in Figure 1.

The parameters  $\mathbf{U}$ ,  $\bar{\mathbf{Y}}$  and  $\mathbf{A}$  of the CDPCA model can be estimated by minimizing the error associated to the model. Nevertheless, such optimization problem is quite difficult to solve [2]. Hence, an alternating least-squares (ALS) algorithm have been proposed in [2] for the parameter estimation. Later, the ALS algorithm was described in [5] in terms of two basic steps: the assignment of objects via

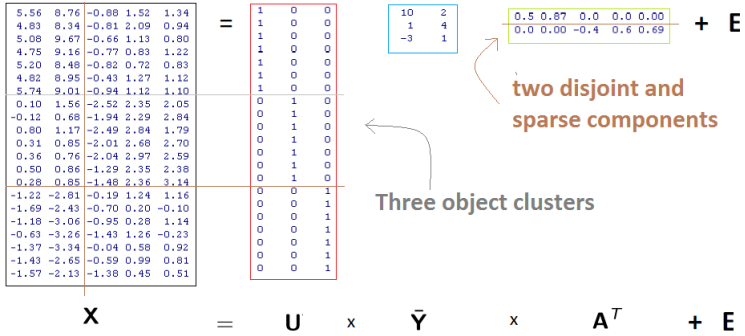


Figure 1: An illustration of the CDPCA model.

k-means, and the reduction of the attribute space via application of PCA to the resulting centroids. This is the algorithm implemented in the R-function `CDpca`. This algorithm is a heuristic procedure which starts from an initialization step (random generation of the matrices  $\mathbf{U}$  and  $\mathbf{V}$ ) and uses iterative schemes in the estimation of the matrices  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{V}$  and  $\mathbf{A}$ . In order to increase the chance of finding the global optimal solution, and reducing the sensitivity of the ALS algorithm on the initial matrices  $\mathbf{U}$  and  $\mathbf{V}$ , CDPCA's authors have been recommending to run the algorithm at least 30 times, for different initial assignment matrices  $\mathbf{U}$  and  $\mathbf{V}$  randomly chosen at the beginning of each run. Each run executes the two steps iteratively until a tolerance condition has been achieved [5].

### 3 CDPCA in R

CDPCA, with the ALS algorithm, is available in a R-package called `biplotbootGUI` [4] given by the `CDpca` function. Recently, the R-function `CDpca` was evaluated on high-dimensional data [6]. To execute `CDpca`, some parameters must be introduced as input. For



instance, for lymphoma data set (library “spls”) with  $P = 3$  clusters of objects and  $Q = 2$  clusters of variables, the following instruction can be considered:

```
> data(lymphoma)
> data <- lymphoma$x
> class <- lymphoma$y
> Q = 2 # desired number of subsets of variables
> P = 3 # desired number of clusters of objects
> tol = 10-(5) # accuracy; tolerance criterium
> maxit = 1000 # maximum of iterations of each run
> r = 20 # number of runs of the ALS algorithm
```

and, finally,

```
> CDpca (data, class, P, Q, tol= 10-(5), maxit,
+ r, cdpcaplot=TRUE)
```

The input `cdpcaplot=TRUE` is useful where the true object clusters are known and the purpose is to compare them with the object clustering provided by the CDPCA methodology. It is worth to mention that the `CDpca` function starts by standardizing the input data.

## 4 Applications

Basically, CDPCA is aimed at reducing both objects and variables, which is very important to make easier the interpretation of data. For illustration of applications of the CDPCA methodology, two real multivariate data sets, where the object clustering is known, are analyzed: *MoraviaWine* (where  $I > J$ ; the data is available in [7]) and *Lymphoma* (where  $I \ll J$ ; the data is available in the R-package `spls` [8]).

### MoraviaWine data set (30 objects $\times$ 8 variables)

For this data set, the purpose is to explore the presence of grouping structures in 30 commercially available wines from South Moravia taking into account eight phenolic acids (vanillic, gentisic, protocatechuic, syringic, gallic, coumaric, ferulic and caffeic) measured by gas chromatography mass spectrometry. In these 30 wines we have: 9 white wine, 1 rosé and 20 red wine. In order to visualize the data in a 2-dimensional graph, we propose the partitioning of the variables in 2 groups (i.e., we define 2 disjoint components). Thus, we applied CDPCA with  $P = 3$  and  $Q = 2$ , taking 500 runs of the ALS algorithm, each run with a maximum of 1000 iterations, and such that the difference of the objective function yielded between two consecutive iterations is less than  $10^5$ , as follows:

```
> res=CDpca(data=wine, class=c(rep(1,9),2,rep(3,20)),
+ P=3,Q=2,tol= 10^(-5),maxit=1000,r=500,cdpcaplot=T)
```

The R-object `res$A` provides the component loading matrix reported in Table 2. The first (second) component explains 32.7% (29.5%, resp.) of the total variance and it is more characterized by the variables: vanillic, syringic and gallic acids (coumaric and ferulic acids, resp.). Applying PCA, the two first (no correlated) components are almost the same of the disjoint components obtained from CDPCA methodology both in terms of variance explained and of variables most contributing to specify the components; however, the reduced space defined by the two first disjoint components which are correlated (Pearson's coefficient = 0.153, observed from the correlation matrix obtained from the R-object `var(res$Y)`) exhibits more homogeneous clusters since the correspondent between cluster deviance (bcd) is 73.5% of total deviance (obtained from R-object `res$bcdev`), while the bcd obtained when the k-means is applied on the reduced space of the first two principal components of PCA is less than 50% of the total deviance. This result on the bcd shows the benefits of applying CDPCA instead of applying k-means on the score matrix resultant of PCA. The plot of the 30 wines in the first

Table 2: Component loadings for PCA and CDPCA

	PCA		CDPCA	
	PC1	PC2	PC1	PC2
Phenolic acid				
vanillic	0.55	-0.04	0.53	0
gentisic	-0.14	0.52	0	0.35
protocatechuic	0.30	0.06	0.33	0
syringic	0.51	0.10	0.52	0
gallic	0.47	-0.07	0.57	0
coumaric	0.20	0.43	0	0.56
ferulic	-0.04	0.60	0	0.59
caffeic	0.29	0.41	0	0.47
% Var	35.3	29.3	32.7	29.5

two disjoint components plan is shown in Figure 2 (on the right). Based on the interpretations of that components, we can conclude that vanillic, syringic and gallic acids can be identified as presumed better markers in red wines since they occur in relatively higher concentrations. While coumaric and ferulic acids do not exhibit distinguishable features among white, rosé and red wines, they suggest that these features can reflect presumable particular wines (containing higher concentrations of coumaric and ferulic acids).

### Lymphoma data set (62 objects $\times$ 4026 variables)

For this gene expression data set which contains  $J = 4026$  genes and  $I = 62$  samples extracted from  $P = 3$  types of cancer (dimension of each type-group: 42/9/11), the purpose is to fit the standardized data to a CDPCA model. We considered 2 disjoint components. The model parameters are then estimated using the following instruction:

```
> CDpca(data=lymphoma\$x, class=lymphoma\$y,
+ P=3,Q=2,tol= 10^(-5),maxit=1000,r=20,cdpcaplot=F)
```

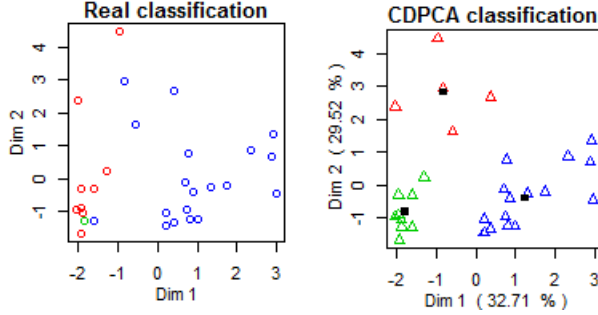


Figure 2: On the left, CDPCA with three color showing the real classification (red: red wine; green: rosé; blue: "red wine"), and on the right CDPCA with the object clustering described by three different colors (centroids represented in black) on the MoraviaWine data set.

Due to high computational effort involved in the execution of the ALS algorithm using the `CDpca` function when the data is described by a high number of variables, only 20 runs of that algorithm were considered in the heuristic procedure. The bdc related to the final estimated CDPCA model was about 88%. The first two disjoint components explain almost the same (about 12%-13% each one).

Since this data set contains a high number of variables, we empirically examined the variability of the results related to the variables when the `CDpca` function is executed several times on *Lymphoma* data. We observed small variability in terms of the proportion of the variance explained by the components and their correlation. However, the position of nonzero elements into the component loading matrix was exhibiting many changes among executions.

A study to analyze how much the variables that belong to each disjoint component can be differently assigned, we applied CDPCA on *Lymphoma* data by executing  $R = 30$  times the instruction above for

$Q = 2, 3, 4$ . The summarized results are reported in Figure 3. The proportions of variance explained by the two first disjoint components and the correlation values between them show low variability.

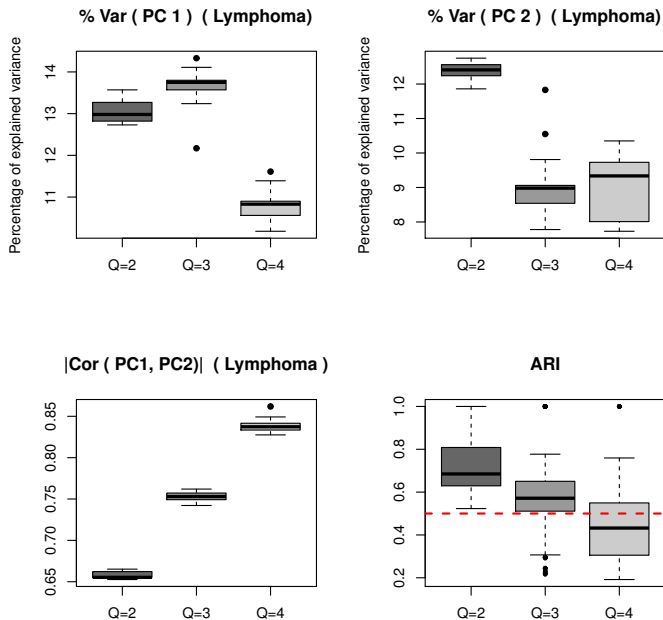


Figure 3: Boxplots of several features of CDPCA results.

Using the Adjusted Rand Index (ARI), we analyze the similarity between any two estimated partitions of variables among all the combination pairs of two applications that we can get from the  $R = 30$  executions of CDPCA. The values of ARI are displayed in Figure 3. In many cases, the ARI index exhibited better results for  $Q = 2$ .

This behaviour of the ARI for comparing variable clusterings among multiple executions of CDPCA, may be consider as a criterium to select the number of clusters of variables for *Lymphoma* data, and it suggests to group the  $J = 4026$  genes in two big clusters. This is an idea to explore in future work.

## Acknowledgements

This work was partially supported by The Center for Research and Development in Mathematics and Applications (CIDMA, University of Aveiro) through the Portuguese Foundation for Science and Technology (FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia), reference UIDB/04106/2020.

## References

- [1] DeSarbo, W.S., Jedidi, K., Cool, K., Schendel, D. (1990). Simultaneous multidimensional unfolding and cluster analysis: An investigation of strategic groups. *Marketing Letters* 2, 129–146.
- [2] Vichi, M., Saporta, G. (2009). Clustering and Disjoint Principal Component Analysis. *Computational Statistics & Data Analysis*, 53, 3194–3208.
- [3] R Development Core Team. (2019). R: A Language and Environment for Statistical Computing (<http://www.R-project.org/>).
- [4] Nieto-Librero, A.B., Galindo-Villardón, M.P., Freitas, A. (2019). biplotbootGUI: Bootstrap on Classical Biplots and Clustering Disjoint Biplot. R package version 1.2. <https://CRAN.R-project.org/package=biplotbootGUI>.
- [5] Macedo, E., Freitas, A. (2015). The Alternating Least-Squares Algorithm for CDPCA. In Plakhov, A. et al (eds.): *Optimiza-*

tion in the Natural Sciences, *Communications in Computer and Information Science*, Springer Verlag, 499, 173–191.

- [6] Freitas, A., Macedo, E., Vichi, M. An empirical comparison of two approaches for CDPCA in high-dimensional data. *Statistical Methods & Applications* (24 pages, to be published).
- [7] Hron, K., Jelínková, M., Filzmoser, P., Kreuzigerd, R., Bednář, R., Barták, P. (2012). Statistical Analysis of Wines Using a Robust Compositional Biplot. *Talanta*, 90, 46–50.
- [8] Chung, D., Chun, H., Keles, S. (2019). spls: Sparse Partial Least Squares (SPLS) Regression and Classification. R package version 2.2-3. <https://CRAN.R-project.org/package=spls>.





# Taxas de erros de tipos I e II de alternativas não paramétricas à ANOVA com dois fatores: comparação entre delineamentos equilibrados e desequilibrados com dados discretos

Anabela Afonso

CIMA/IIFA e DMat/ECT, Universidade de Évora, Évora, Portugal,  
*aafonso@uevora.pt*

Dulce G. Pereira

CIMA/IIFA e DMat/ECT, Universidade de Évora, Évora, Portugal,  
*dgsp@uevora.pt*

**Palavras-chave:** Empates; Estatística de Wald; Testes de permutação; Transformação em ordens

**Resumo:** A existência de observações empatadas pode influenciar o desempenho dos procedimentos não paramétricos alternativos à ANOVA com dois fatores. Para compararmos o desempenho destas alternativas consideramos delineamentos equilibrados e desequilibrados, e que os dados são provenientes de distribuições discretas. Os nossos resultados mostram que o desempenho dos testes é afetado pelo tipo de delineamento (equilibrado ou desequilibrado), pelos efeitos presentes no modelo, pelo tamanho dos efeitos, e pela dimensão da amostra.

## 1 Introdução

Na análise de conjuntos de dados reais são várias as situações em que não se pode recorrer à ANOVA paramétrica devido a sérias violações dos seus pressupostos ou porque os dados são de tipo ordinal [3, 4].

Por isso, desde a segunda metade do século passado, foram propostos vários procedimentos não paramétricos alternativos à ANOVA com dois fatores.

Na literatura é possível encontrar vários trabalhos que estudam o desempenho destes métodos, onde são consideradas distribuições contínuas, com diferentes graus de assimetria e a presença de valores atípicos, e/ou com variâncias heterogêneas, tanto para delineamentos equilibrados como desequilibrados (e.g. [5, 6, 7]). Afonso e Pereira [3, 4] efetuaram estudos de simulação para analisar a probabilidade de erro de tipo I e a potência de alguns desses procedimentos alternativos considerando dados provenientes de distribuições discretas, o que propicia a existência de empates nas ordens das observações. Nestas análises foram considerados diferentes graus de dispersão e assimetria das distribuições, e apenas delineamentos equilibrados. De acordo com os vários estudos, nenhum dos procedimentos se destacou dos restantes por ter tido o melhor desempenho em todos os contextos.

Neste trabalho, estendemos a análise realizada nos trabalhos [3, 4] aos delineamentos desequilibrados para os procedimentos: transformação em ordens (*RT*), transformação normal inversa (*INT*), transformação em ordens alinhadas (*ART*), transformação *ART* combinada com *INT* (*ART+INT*), estatística *L* de Puri & Sen (*L* de *PS*), teste de van der Waerden, estatística de tipo Wald (*WTS*), estatística de tipo ANOVA (*ATS*) e teste de permutação de tipo Wald (*WTPS*). As distribuições discretas consideradas são as que mais se aplicam nas áreas de biologia e ecologia.

A estrutura do artigo inicia-se com uma descrição sucinta dos procedimentos considerados (secção 2). De seguida, especificam-se as distribuições de probabilidade adotadas para os erros e os modelos considerados no trabalho de simulação (secção 3), e apresentam-se os principais resultados organizados por efeitos de interesse (secção 4). Por fim, na secção 5 retiram-se as principais conclusões obtidas e as linhas de investigação futura.

## 2 Procedimentos considerados

Nas alternativas não paramétricas *RT* e *INT* as observações originais são substituídas pelas suas ordens, ou pelos *scores* normais das ordens, respetivamente, e posteriormente é aplicada a ANOVA paramétrica às novas variáveis. A observar que existem várias versões para calcular os *scores* normais [1].

No procedimento *ART* todos os efeitos que não sejam de primeiro interesse são subtraídos antes de se realizar a ANOVA paramétrica, ou seja, aos resíduos adiciona-se o efeito de interesse (linha, coluna ou interação) e substituem-se os valores pelas ordens aos quais se aplica a ANOVA. O procedimento *ART+INT* consiste na combinação das transformações *ART* e *INT*.

A estatística *L de PS* consiste numa adaptação da estatística *L* do teste das ordens com distribuição qui-quadrado, sendo uma generalização do teste *H* de Kruskal-Wallis. O teste de van der Waerden combina a transformação *INT* com a estatística *L de PS*.

O teste *WTS* tem uma estatística de ordens baseada na estatística de tipo Wald. O teste *ATS* consiste em calcular uma estatística de teste de tipo ANOVA às ordens das observações originais e os graus de liberdade da estatística *F* são corrigidos usando a aproximação de Box.

O teste *WTPS* baseia-se na permutação aleatória das observações entre si, sem restrições, e aplica a estatística *WTS* às observações permutadas.

A descrição mais detalhada destes procedimentos pode ser consultada, por ex., em Hahn *et al.* [5] e Luepsen [6].

## 3 Simulação

Para se comparar os diferentes procedimentos não paramétricos com a ANOVA paramétrica apresentamos um estudo de simulação. Neste estudo adota-se um modelo de efeitos fixos com interação:

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \epsilon_{ijk},$$

onde  $\mu$  é a média global,  $\alpha_i$  mede o efeito do nível  $i$  do fator  $A$ ,  $i = 1, \dots, L$ ,  $\beta_j$  mede o efeito do nível  $j$  do fator  $B$ ,  $j = 1, \dots, C$ ,  $\gamma_{ij}$  é o efeito da interação do nível  $i$  do fator  $A$  com o nível  $j$  do fator  $B$  e  $\epsilon_{ijk}$  é o erro aleatório,  $k = 1, \dots, n_{ij}$ .

Os efeitos principais dos fatores  $A$ ,  $B$  e da interação  $A \times B$  foram modelados considerando:

$$\alpha_i = \begin{cases} c, & i = 1 \\ -c, & i = 2; \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad \beta_j = \begin{cases} c, & j = 1 \\ -c, & j = 2; \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases} \quad \gamma_{ij} = \begin{cases} c, & i = j; i, j = 1, 2 \\ -c, & i \neq j; i, j = 1, 2, \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

com  $c = 0, 0,25\sigma, 0,5\sigma$  e  $1\sigma$ , onde  $\sigma$  representa o desvio-padrão da população amostrada. Os efeitos considerados satisfazem as restrições  $\sum_{i=1}^L \alpha_i = \sum_{j=1}^C \beta_j = \sum_{i=1}^L \gamma_{ij} = \sum_{j=1}^C \gamma_{ij} = 0$ .

Foram considerados delineamentos  $3 \times 3$ , equilibrados e desequilibrados, com amostras de dimensão global  $N = \sum_i \sum_j n_{ij} = 27, 45, 90$ ,

Tabela 1: Dimensão global da amostra ( $N$ ) e dimensões consideradas para as amostras ( $n_{ij}$ ), por tipo de delineamento e grau de desequilíbrio

		Equilibrado	Desequilibrado	
			<deseq.	>deseq.
$N = 27$	$n_{11} = n_{12} = n_{13}$	3	2	a
	$n_{21} = n_{22} = n_{23}$	3	3	a
	$n_{31} = n_{32} = n_{33}$	3	4	a
$N = 45$	$n_{11} = n_{12} = n_{13}$	5	5	2
	$n_{21} = n_{22} = n_{23}$	5	6	5
	$n_{31} = n_{32} = n_{33}$	5	4	8
$N = 90$	$n_{11} = n_{12} = n_{13}$	10	4	2
	$n_{21} = n_{22} = n_{23}$	10	10	9
	$n_{31} = n_{32} = n_{33}$	10	16	19

a O desequilíbrio seria obtido com  $n_{1j} = 1, n_{2j} = 3$  e  $n_{3j} = 5$ , mas tal impossibilitaria testar a interação.

sendo as dimensões por célula apresentadas na Tabela 1.

Foram consideradas distribuições discretas com diferentes graus de dispersão e assimetria (Tabela 2): (i) Binomial assimétrica positiva:  $B(K; 0,2)$  com  $K = 25, 50, 100$ ; (ii) Binomial simétrica:  $B(K; 0,5)$  com  $K = 10, 20, 40$ ; (iii) Binomial Negativa:  $BN(K; 0,4)$  com  $K = 2, 4, 8$ ; (iv) Poisson:  $P(\lambda)$  com  $\lambda = 5, 10, 20$ ; e (v) Uniforme:  $\{0, \dots, K\}$  com  $K = 10, 20, 40$ .

As taxas de erro de tipo I e II dos vários testes foram avaliadas considerando seis modelos distintos:

1. inexistência de efeitos principais e inexistência de interação (modelo nulo), i.e.,  $c = 0$ ;
2. um efeito principal e inexistência de interação, i.e.,  $\beta_j = 0$  e  $\gamma_{ij} = 0, \forall i, j$ ;
3. dois efeitos principais e inexistência de interação (modelo de efeitos principais), i.e.,  $\gamma_{ij} = 0, \forall i, j$ ;
4. sem efeitos principais e existência de interação (modelo de interação), i.e.,  $\alpha_i = 0$  e  $\beta_j = 0, \forall i, j$ ;
5. um efeito principal e existência de interação, i.e.,  $\beta_j = 0, \forall j$ ;

Tabela 2: Coeficiente de variação (CV%) e coeficiente de assimetria de Fisher ( $\gamma = \mu_3/\sigma^3$ , sendo  $\mu_3$  o 3º momento central e  $\sigma$  o desvio-padrão) das distribuições consideradas.

E(X)	5	10	20	5	10	20
Distribuição	CV%			$\gamma$		
$P(\lambda)$	44,7	31,6	22,4	0,45	0,32	0,22
$BN(K; 0,4)$	54,8	38,7	27,4	1,46	1,03	0,73
$B(K; 0,2)$	40,0	28,3	20,0	0,30	0,21	0,15
$B(K; 0,5)$	31,6	22,4	15,8	0	0	0
$U\{0, \dots, K\}$	63,2	60,6	59,2	0	0	0

6. dois efeitos principais e existência de interação (modelo completo).

Em cada cenário distribucional foram consideradas 1000 réplicas de Monte Carlo e, para cada um dos procedimentos, registou-se a *taxa de erro de tipo I empírica* (i.e., proporção de réplicas que rejeitaram  $H_0$  quando  $H_0$  verdadeiro) e a *taxa de erro de tipo II empírica* (i.e., proporção de réplicas que não rejeitaram  $H_0$  quando  $H_1$  verdadeiro), para  $\alpha = 1\%, 5\%$  e  $10\%$ .

Na análise do desempenho dos testes no controlo da probabilidade do erro de tipo I, foi usado o critério liberal de Bradley [2]. Segundo este critério, um teste de hipóteses é dito liberal se, tomadas  $k$  amostras de tamanho igual da mesma população, a taxa de rejeição da hipótese nula pelo teste, realizado em cada uma das  $k$  amostras, é maior do que  $1,5\alpha$ . Um teste é conservador quando a taxa de rejeição da hipótese nula pelo teste é menor do que  $0,5\alpha$ .

Os testes *ART*, *ATS* e *WTS* foram aplicados quer as observações originais ( $y$ ) quer às respetivas ordens ( $ry$ ). Para distinguir entre estas duas situações, na apresentação dos resultados utilizaram-se os posfixos  $y$  e  $ry$ , respetivamente. Na aplicação do teste *INT* o *score* normal foi definido como  $\Phi^{-1}\left(\frac{r_i}{N+1}\right)$ , que denota o quantil da distribuição  $N(0,1)$  com probabilidade  $\frac{r_i}{N+1}$ ,  $r_i$  as ordens das observações  $y$  e  $N$  o número total de observações.

Para a aplicação dos procedimentos foram usados os pacotes *ARTool*, *rankFD* e *GFD* do programa R Project [8], e funções disponíveis em <http://www.uni-koeln.de/~luepsen/R/>.

## 4 Resultados

Na impossibilidade de apresentar os resultados para todos os níveis de significância considerados, nesta secção apresentam-se apenas os resultados quando  $\alpha = 0,05$ . A eficácia dos testes foi avaliada com base na taxa de erro de tipo I empírica e na potência empírica.

## 4.1 Delineamentos equilibrados *vs.* desequilibrados

Nos resultados apresentados nas Tabelas 3 e 4 distingue-se o desempenho dos testes pelo tipo de desequilíbrio do delineamento.

A maioria dos testes que não verificam o critério de Bradley são classificados como liberais (valores a cinzento na Tabela 3). Com o aumento do desequilíbrio do delineamento aumenta o número de testes que violam o critério de robustez, e há um aumento do afastamento da taxa de erro de tipo I empírica destes testes relativamente ao nível de significância nominal. O teste *WTS* mostrou ser demasiado liberal, principalmente quando se testa a interação. O comportamento dos testes *L* e *vdW* não é consistente, pois são testes conservadores quando se testa a presença de interação e são liberais quando se testa a presença dos efeitos principais. De um modo geral, a taxa de erro de tipo I empírica dos métodos robustos tende a estar mais próxima do nível de significância considerado nos delineamentos equilibrados do que nos desequilibrados.

Na Tabela 4 destacam-se a negrito os testes que revelaram ser os mais potentes nos diferentes desequilíbrios considerados para os delineamentos. A título informativo, apresenta-se a cinzento e itálico a potência empírica dos testes cuja probabilidade do erro de primeira espécie violou o critério de robustez adotado. A potência empírica dos procedimentos robustos é menor nos delineamentos desequilibrados, sendo esta mais reduzida nos delineamentos com maior desequilíbrio (*>deseq.*).

## 4.2 Tamanho da amostra

As Figuras 1 e 2 ilustram a eficácia dos testes quando se consideram diferentes tamanhos da amostra global, tendo em consideração o desequilíbrio do delineamento. De notar que, nestas figuras, não existem representações quando  $N = 27$  e o delineamento é mais desequilibrado uma vez que, neste estudo, não foi gerado este caso. Na Figura 1, os testes que se encontram entre as duas linhas verticais

Tabela 3: Taxa de erro de tipo I empírica, com  $\alpha = 0,05$ , por desequilíbrio do delineamento: equilibrado (Equil.), menor desequilíbrio (<deseq.) e maior desequilíbrio (>deseq.). Valores a cinzenito representam as situações em que o teste é conservativo e a cinzenito e itálico quando o teste é liberal.

Efeito testado	A			B			AB		
	Equil.	<deseq.	>deseq.	Equil.	<deseq.	>deseq.	Equil.	<deseq.	>deseq.
ANOVA	0,050	0,049	0,051	0,046	0,068	<i>0,090</i>	0,050	0,050	0,051
ART+INT	0,051	0,052	0,060	0,046	0,050	0,026	0,049	0,049	0,046
ART.ry	0,053	0,051	0,050	0,048	0,049	0,022	0,055	0,050	0,041
ART.y	0,052	0,054	0,062	0,049	0,052	0,026	0,053	0,055	0,052
ATS	0,043	0,044	0,060	0,040	0,044	0,058	0,038	0,043	0,068
ATS.y	0,041	0,038	0,041	0,037	0,039	0,036	0,035	0,036	0,041
INT	0,050	0,049	0,050	0,046	0,069	<i>0,092</i>	0,047	0,046	0,045
L	<i>0,272</i>	<i>0,178</i>	<i>0,160</i>	<i>0,181</i>	<i>0,104</i>	0,060	0,020	0,024	0,024
vdW	<i>0,281</i>	<i>0,187</i>	<i>0,179</i>	<i>0,190</i>	<i>0,116</i>	<i>0,076</i>	0,019	0,023	0,027
RT	0,050	0,048	0,047	0,047	0,068	<i>0,086</i>	0,052	0,047	0,040
WTPS	0,049	0,046	0,039	0,046	0,049	0,039	0,049	0,046	0,031
WTS.ry	<i>0,078</i>	<i>0,092</i>	<i>0,129</i>	0,074	<i>0,098</i>	<i>0,164</i>	<i>0,142</i>	<i>0,177</i>	<i>0,264</i>
WTS.y	<i>0,076</i>	<i>0,083</i>	<i>0,102</i>	0,072	<i>0,091</i>	<i>0,127</i>	0,130	0,152	0,195



Tabela 4: Potência empírica, com  $\alpha = 0,05$  por desequilíbrio do delineamento: equilibrado (Equil.), menor desequilíbrio (<deseq.) e maior desequilíbrio (>deseq.). Valores a negrito representam os testes mais potentes e os valores a cinzento os testes que não são robustos (a itálico os liberais e a não itálico os conservativos).

Efeito testado	A			B			AB		
	Equil.	<deseq.	>deseq.	Equil.	<deseq.	>deseq.	Equil.	<deseq.	>deseq.
ANOVA	<b>0,650</b>	<b>0,612</b>	<b>0,593</b>	0,652	0,624	<i>0,677</i>	<b>0,475</b>	<b>0,434</b>	<b>0,421</b>
ART+INT	0,642	0,606	<b>0,594</b>	0,635	0,576	<b>0,530</b>	0,452	0,410	0,395
ART.ry	0,635	0,592	0,567	0,630	0,563	<i>0,508</i>	0,442	0,391	0,360
ART.y	0,648	0,614	0,599	0,650	0,590	0,536	0,476	0,431	0,414
ATS	0,622	0,563	0,418	0,615	0,561	0,423	0,407	0,351	0,250
ATS.y	0,627	0,552	0,360	0,627	0,559	0,378	0,432	0,360	0,198
INT	<b>0,653</b>	<b>0,613</b>	<b>0,598</b>	0,647	<b>0,618</b>	<i>0,682</i>	0,461	0,418	0,409
L	<i>0,444</i>	<i>0,396</i>	<i>0,375</i>	<i>0,393</i>	<i>0,256</i>	<b>0,131</b>	<i>0,334</i>	<i>0,292</i>	<i>0,281</i>
vdW	<i>0,456</i>	<i>0,417</i>	<i>0,409</i>	<i>0,409</i>	<i>0,288</i>	<i>0,176</i>	<i>0,348</i>	<i>0,314</i>	0,317
RT	0,641	0,595	0,572	0,636	0,605	<i>0,666</i>	0,445	0,396	0,369
WTPS	0,638	0,581	0,497	0,638	0,588	0,499	0,441	0,382	0,236
WTS.ry	<i>0,684</i>	<i>0,657</i>	<i>0,644</i>	<b>0,679</b>	<i>0,665</i>	<i>0,685</i>	<i>0,570</i>	<i>0,565</i>	<i>0,597</i>
WTS.y	<i>0,687</i>	<i>0,652</i>	<i>0,631</i>	<b>0,687</b>	<i>0,665</i>	<i>0,659</i>	<i>0,577</i>	<i>0,559</i>	<i>0,559</i>

a tracejado são considerados robustos, os que se estão à esquerda da primeira linha vertical são classificados como conservativos e os que estão representados à direita da segunda linha vertical são liberais.

A maioria dos testes que não verificam o critério de Bradley são liberais (Figura 1). À medida que aumenta o tamanho global da amostra observa-se um aumento do número de testes que violam o critério de robustez e um aumento da taxa de erro de tipo I empírica, principalmente quando os delineamentos são mais desequilibrados. Estes comportamentos também são observados para a maior parte dos procedimentos à medida que aumenta o desequilíbrio do delineamento.

Com o aumento da dimensão da amostra observa-se um aumento da potência empírica dos testes (Figura 2). Nos testes robustos observa-se ainda que com o acentuar do desequilíbrio dos delineamentos há uma redução na potência empírica.

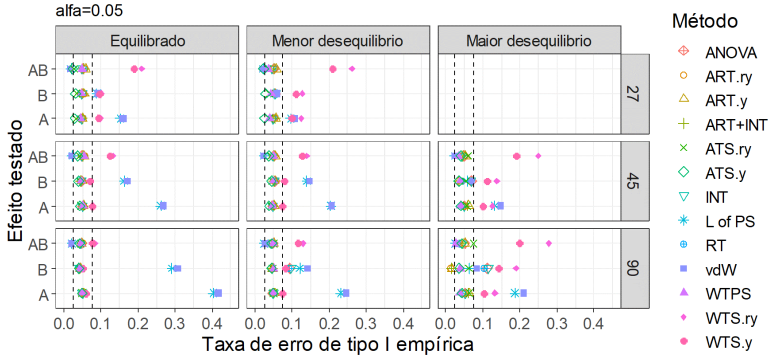


Figura 1: Taxa de erro de tipo I empírica por dimensão da amostra, efeito testado e desequilíbrio do delineamento. As linhas verticais a tracejado indicam os limites de robustez do critério de Bradley.

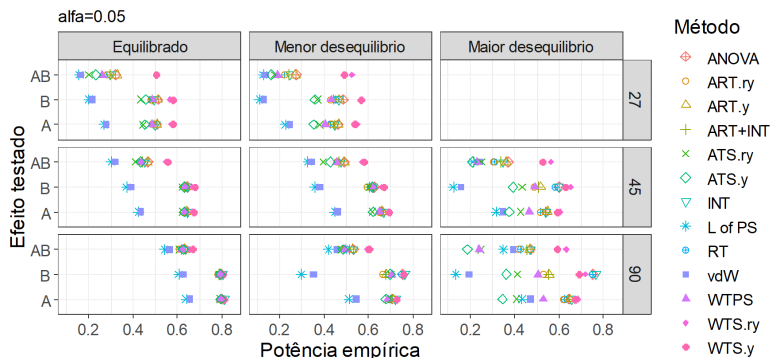


Figura 2: Potência empírica por dimensão da amostra, efeito testado e desequilíbrio do delineamento.

### 4.3 Tamanho dos efeitos

Apenas se observa um aumento da taxa de erro de tipo I empírica nos testes liberais (*L*, *vdW*, *WTS*) com o aumento do tamanho do efeito dos níveis dos fatores e da interação, que depende da ponderação atribuída ao desvio-padrão da população amostrada (Figura 3). Em todos os outros procedimentos a taxa de erro de tipo I empírica mantém-se inalterada seja qual for o tamanho do efeito dos níveis dos fatores e da interação.

Quanto maior o tamanho dos efeitos maior é a capacidade dos testes para rejeitar  $H_0$  quando esta hipótese é falsa (Figura 4).

### 4.4 Modelo

Uma vez que a taxa de erro de tipo I empírica corresponde à proporção de réplicas que rejeitaram  $H_0$  quando  $H_0$  (o efeito é nulo) é verdadeira, na Figura 5 só se representam as taxas associadas aos efeitos nulos considerados em cada modelo. Do mesmo modo, como a po-

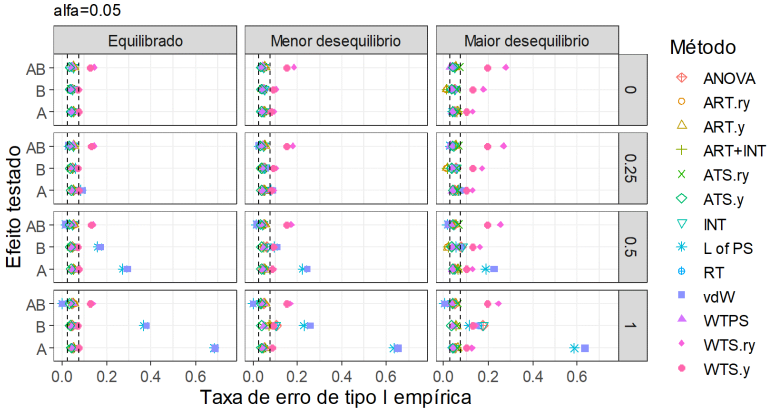


Figura 3: Taxa de erro de tipo I empírica por tamanho do efeito  $c = 0, 0,25\sigma, 0,5\sigma$  e  $1\sigma$ , efeito testado e desequilíbrio do delineamento. As linhas verticais a tracejado indicam os limites de robustez do critério de Bradley.

tência empírica corresponde à proporção de réplicas que rejeitaram  $H_0$  quando  $H_0$  é falsa, na Figura 6 só se representam as potências associadas aos efeitos não nulos do respetivo modelo.

No teste à interação, quer a taxa de erro de tipo I quer a potência empírica não é afetada pela presença ou não de efeitos principais (Figura 5 e Figura 6). No teste aos efeitos principais na presença de interação observa-se um aumento na taxa de erro de tipo I empírica, que se agrava com o desequilíbrio do delineamento.

Com o aumento do desequilíbrio do delineamento parece haver uma diminuição da capacidade dos procedimentos decidirem corretamente (Figura 5 e Figura 6).

## 4.5 Distribuições

As alterações identificadas na classificação dos testes, segundo o critério de Bradley, e na potência dos mesmos não está relacionada com

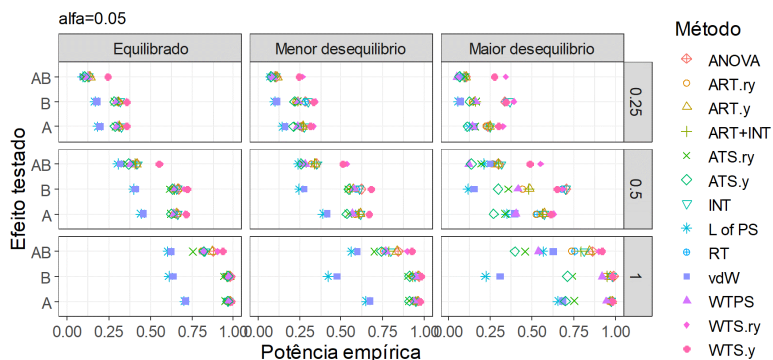


Figura 4: Potência empírica por tamanho do efeito  $c = 0, 0,25\sigma, 0,5\sigma$  e  $1\sigma$ , efeito testado e desequilíbrio do delineamento.

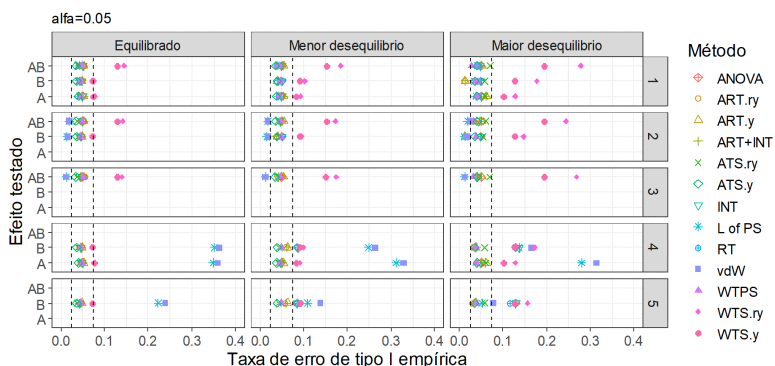


Figura 5: Taxa de erro de tipo I empírica por modelo, efeito testado e desequilíbrio do delineamento. As linhas verticais a tracejado indicam os limites de robustez do de Bradley.

a distribuição dos erros nem com o grau de dispersão e assimetria.

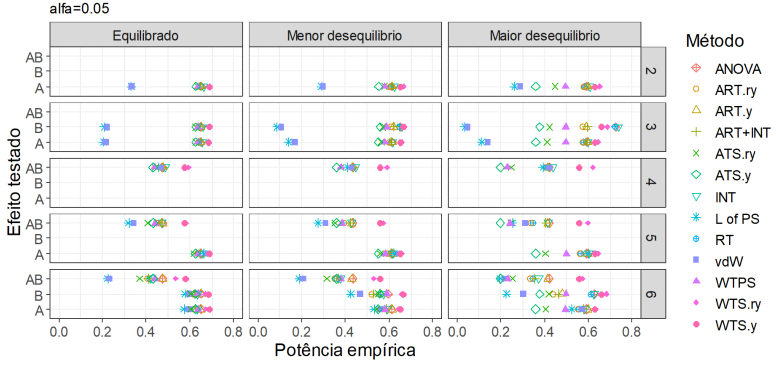


Figura 6: Potência empírica por modelo, efeito testado e desequilíbrio do delineamento.

## 4.6 Empates

O número de empates presentes nos dados aumenta com a redução da dispersão e com o aumento da dimensão da amostra. Apenas o teste *WTPS* parece ser afetado pelo número de empates quando o delineamento é desequilibrado, situação em que o teste é conservativo. Na análise da potência dos testes não foram identificadas alterações devido à presença de empates.

## 5 Conclusão

Os nossos resultados mostram que, de um modo geral, o desempenho dos testes não é afetado pela presença de empates nem pela distribuição dos erros, mas a sua capacidade de decidir corretamente tende a diminuir quanto mais desequilibrado for o delineamento. Além disso, o desempenho dos testes é afetado pela dimensão da amostra, efeitos principais presentes no modelo e pelo tamanho dos efeitos. O teste *WTS* mostrou ser demasiado liberal. O comportamento

dos testes  $L$  de  $PS$  e de van der Waerden não é consistente, pois tanto são testes conservadores como liberais. Quando se testam os efeitos principais, a taxa de erro de tipo I empírica dos testes  $ART$  e  $ART+INT$  é maior nos delineamentos desequilibrados do que nos equilibrados, e todos os procedimentos robustos apresentam potências menores nos delineamentos desequilibrados.

No teste à interação, a taxa de erro de tipo I empírica dos procedimentos é menor nos delineamentos desequilibrados, mas a taxa de erro de tipo II é menor nos delineamentos equilibrados.

A  $ANOVA$  paramétrica tem um comportamento estável, exceto nos delineamentos com maior desequilíbrio e o tamanho dos efeitos principais e da interação é elevado.

Recomendamos o uso do teste  $WTPS$  que mostrou ser sempre robusto, seja qual for o número de réplicas. Os testes  $ANOVA$ ,  $RT$ ,  $INT$ ,  $ART$  e  $ART+INT$  apenas não são robustos no teste à presença do efeito  $B$  nos delineamentos desequilibrados e quando a amostra global é grande. Estes testes apresentam uma potência similar.

De futuro pretende-se estender este estudo à situação em que as variâncias são heterogêneas.

## Agradecimentos

Este trabalho é financiado por Fundos Nacionais através da FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia no âmbito do projeto “UID/MAT/04674/2020 (CIMA)”.

## Referências

- [1] Beasley, T. M., Zumbo, B. D. (2009). Aligned rank tests for interactions in split-plot designs: distributional assumptions and stochastic heterogeneity. *Journal of Modern Applied Statistical Methods*, 8, 16–50.

- [2] Bradley, J. V. (1978). Robustness? *British Journal of Mathematics and Statistical Psychology*, 31, 144–151.
- [3] Afonso, A., Pereira, D. G. (2019). Comparação entre métodos não paramétricos para a análise de variância com dois fatores: um estudo de simulação. In *Classificação e Análise de Dados – Métodos e Aplicações III* (Eds. Bacelar-Nicolau, H., Sousa, F., Marcelo, C., Ferreira, A. S., Infante, P., Figueiredo, A.). Instituto Nacional de Estatística, 147–158.
- [4] Pereira, D. G., Afonso, A. (2020) Taxas de erros de tipos I e II de procedimentos não paramétricos alternativos à ANOVA com dois fatores para dados discretos. *Atas do XXIII Congresso da SPE*. Sociedade Portuguesa de Estatística (Eds. Salgueiro, M. F., Vicente, P., Calapez, T., Marques, C., Silva, M. E.), 75-88.
- [5] Hahn, S., Konietzschke, F., Salmaso, L. (2014). A Comparison of efficient permutation tests for unbalanced ANOVA in two by two designs and their behavior under heteroscedasticity. In *Topics in Statistical Simulation: Research Papers from the 7th International Workshop on Statistical Simulation* (Eds. Melas, V.B., Mignani, S., Monari, P., Salmaso, L. ). Springer, New York, USA, 257–269.
- [6] Luepsen, H. (2017). The aligned rank transform and discrete variables - a warning. *Communications in Statistics – Simulation and Computation*, 46, 6923–6936.
- [7] Pauly M., Brunner E., Konietzschke F. (2015). Asymptotic permutation tests in general factorial designs. *Journal of the Royal Statistical Society*, Series B, 77, 461–473.
- [8] R Core Team (2016). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.



# Sobre a escolha estatística de modelos extremais na metodologia POT

António Gomes

Departamento Comercial do Hospital Particular da Madeira S. A.,  
Funchal, Portugal, *antoniogomes@grupohpa.com*

Délia Gouveia-Reis

Universidade da Madeira, Funchal, Portugal e Centro de Estatística  
e Aplicações (CEA-UL), Lisboa, Portugal, *delia.reis@staff.uma.pt*

Sandra Mendonça

Universidade da Madeira, Funchal, Portugal e Centro de Estatística  
e Aplicações (CEA-UL), Lisboa, Portugal, *smfm@uma.pt*

**Palavras-chave:** Metodologia POT; Distribuição exponencial; Distribuição generalizada de Pareto não exponencial

**Resumo:** Uma das metodologias da área de Estatística de Extremos é a denominada metodologia POT, designação que advém do nome em inglês *Peaks Over Threshold*. Nesta metodologia, são considerados os valores extremos acima de um determinado nível elevado. Um problema de interesse prático é a escolha da distribuição a utilizar na modelação desses valores extremos. Neste estudo são apresentadas seis estatísticas de teste existentes na literatura científica relativa ao problema da escolha entre a distribuição generalizada de Pareto com parâmetro de forma nulo, ou seja, a distribuição exponencial, e a distribuição generalizada de Pareto não exponencial. Os procedimentos necessários para a aplicação dos testes estatísticos analisados são exemplificados com recurso ao programa R.

# 1 Introdução

Na metodologia POT, são considerados relevantes os maiores valores observados que se encontram acima de um nível ou limiar elevado  $u$ . Um marco importante nesta metodologia foi obtido por Pickands [17] e Balkema and de Haan [2]. Estes autores estabeleceram que a função de distribuição condicional dos excessos (diferenças entre os valores acima do limiar, denominados de excedências, e este valor) pode ser bem aproximada por uma função de distribuição generalizada de Pareto definida por, para  $\beta > 0$ :

$$H_{\gamma,\beta}(x) = \begin{cases} 1 - \left(1 + \gamma \frac{x}{\beta}\right)^{-1/\gamma}, & \text{se } \gamma \neq 0, \\ 1 - \exp(-\frac{x}{\beta}), & \text{se } \gamma = 0, \end{cases}$$

com  $x \geq 0$  se  $\gamma \geq 0$  e  $0 \leq x \leq -\beta/\gamma$  se  $\gamma < 0$ .

Vários métodos para estimar os parâmetros  $\gamma$  e  $\beta$  têm sido propostos na literatura da área (*e.g.* [4, 5]). Além da estimação destes parâmetros, temos também a estimação de quantis extremos, a qual se revela de vital importância em áreas de aplicação tais como a gestão do risco. A obtenção de tais valores associados a um acontecimento extremo está associada à escolha de uma função de distribuição. Na metodologia POT, essa escolha pode recair entre a escolha da função de distribuição exponencial ( $\gamma = 0$ ) ou a função de distribuição generalizada de Pareto não exponencial ( $\gamma \neq 0$ ), sendo a função de distribuição exponencial a preferida muito por conta da sua simplicidade na estimação. Neste contexto, apresentamos na Secção 2 seis estatísticas de teste existentes na literatura científica. A aplicação dos testes apresentados a um conjunto de dados da área das Finanças, considerando diferentes valores para o nível elevado  $u$  com recurso ao programa R, é exemplificada na Secção 3. Finalmente, na Secção 4, apresentamos algumas considerações finais, tendo por base os resultados da aplicação dos testes referidos na Secção 2.

## 2 Escolha estatística de modelos extremos

Consideremos  $Y_1, \dots, Y_m$  variáveis independentes e identicamente distribuídas a uma variável  $Y$  com função de distribuição generalizada de Pareto,  $m$  o número de excessos. A primeira estatística de teste aqui sugerida (cf. [7, 9, 13]) é a seguinte:

$$T_1 = \frac{L_p(\gamma_0)}{L_p(\hat{\gamma})},$$

onde, para cada valor de  $\gamma$ , a função  $L_p$ , designada por *profile log-likelihood* é a log-verosimilhança maximizada relativamente ao parâmetro  $\beta$ , ou seja,  $L_p(\gamma) = \max_{\beta|\gamma} L(\gamma, \beta)$ ,  $\gamma_0$  é o valor a testar para  $\gamma$  e  $\hat{\gamma}$  é o estimador de  $\gamma$  pelo método da máxima verosimilhança (método ML). Reiss and Thomas [18] recomendam a aplicação da correção de Bartlett, resultando assim na estatística de teste

$$T_{1,b} = \frac{T_1}{1 + \frac{4}{m}}.$$

Sob a validade de  $H_0 : \gamma = 0$ ,

$$T_1^* = -2 \ln(T_1) \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{d} V_1 \quad \text{e} \quad T_{1,b}^* = -2 \ln(T_{1,b}) \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{d} V_{1,b},$$

onde  $V_1$  e  $V_{1,b}$  têm cada uma distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade.

Chaouche and Bacro [8] propuseram a seguinte estatística de teste

$$T_2 = \frac{M_2[Y]}{2M_1[Y]^2} - 1,$$

com  $M_k[Y] = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m Y_j^k$ . Chaouche and Bacro [8] também demonstraram que, sob a validade de  $H_0 : \gamma = 0$ ,

$$T_2^* = \sqrt{m} \left( T_2 - \frac{1 - \gamma}{1 - 2\gamma} \right) \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{d} V_2,$$

onde  $V_2$  tem distribuição normal com média zero e variância

$$\frac{(1 - \gamma)^2(1 - \gamma + 6\gamma^2)}{(1 - 2\gamma)^3(1 - 3\gamma)(1 - 4\gamma)}.$$

Além da estatística de teste  $T_1$ , Reiss and Thomas [18] referem outra estatística de teste, que também pode ser encontrada em Marohn [16]. Esta estatística de teste, que se escreve em função do quadrado do coeficiente de variação amostral, é dada por

$$T_3 = \frac{1}{2} \left( \frac{S_Y^2}{\bar{Y}^2} - 1 \right),$$

com  $\bar{Y} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m Y_j$  e  $S_Y^2 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (Y_j - \bar{Y})^2$ .

Gomes and van Montfort [14] demonstraram que, sob a validade de  $H_0 : \gamma = 0$ ,  $T_3^* = \sqrt{m}T_3 \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{d} V_3$ , onde  $V_3$  tem distribuição normal padrão.

Gomes and van Montfort [14] propuseram e estudaram também, no contexto da metodologia POT, a estatística de teste que aqui denotamos por estatística de teste  $T_4$ . A estatística de teste  $T_4$  é igual a razão entre o máximo ( $Y_{m:m}$ ) e mediana ( $M_m$ ) das variáveis  $Y_1, \dots, Y_m$ , ou seja,

$$T_4 = \frac{Y_{m:m}}{M_m},$$

com  $Y_{m:m} := \max_{1 \leq i \leq m} Y_i$  e  $M_m = Y_{\frac{m+1}{2}:m}$  se  $m$  é ímpar ou  $M_m = \frac{1}{2} (Y_{\frac{m}{2}:m} + Y_{\frac{m}{2}+1:m})$  se  $m$  é par.

Gomes [12] utiliza na escolha de modelos extremais, no contexto da metodologia dos máximos anuais, a estatística de teste dada pela razão entre a diferença do máximo e a mediana e a diferença desta e o mínimo,  $Y_{1:m} := \min_{1 \leq i \leq m} Y_i$ . Brilhante [6] refere que esta estatística de teste, a qual já tinha sido proposta por Gumbel [15] para a estimação dos parâmetros e realização de testes na distribuição de

Fréchet, também pode ser utilizada para testar a distribuição exponencial *versus* a distribuição generalizada de Pareto não exponencial. Assim, a estatística  $T_5$  aqui referida é a seguinte

$$T_5 = \frac{Y_{m:m} - M_m}{M_m - Y_{1:m}}.$$

Sob a validade de  $H_0 : \gamma = 0$ ,

$$T_4^* = T_4 \times \ln 2 - \ln m \xrightarrow{m \rightarrow \infty} V_4 \text{ e } T_5^* = T_5 \times \ln 2 - \ln(m/2) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} V_5,$$

onde  $V_4$  e  $V_5$  são variáveis aleatórias com distribuição Gumbel padrão.

Brilhante [6], tendo em conta a estatística de teste  $T_5$ , apresentou a estatística de teste dada pela razão entre a diferença do quarto superior e a mediana e a diferença desta e o quarto inferior. A estatística de teste, aqui denotada por  $T_6$ , é escrita do seguinte modo

$$T_6 = \frac{F_U - M_m}{M_m - F_L},$$

onde  $F_U = Y_{m - \{\frac{m}{4}\} + 1:m}$  e  $F_L = Y_{\{\frac{m}{4}\}:m}$  com  $\{\cdot\}$  a representar o arredondamento para o número inteiro mais próximo. Brilhante [6] demonstrou que, sob a validade de  $H_0 : \gamma = 0$ ,

$$T_6^* = \ln(3/2) \sqrt{\frac{m}{2}} \left( T_6 - \frac{\ln 2}{\ln(3/2)} \right) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} V_6,$$

onde  $V_6$  é uma variável aleatória com distribuição normal padrão.

Em resumo, na Tabela 1, apresentamos as estatísticas de teste sugeridas, a distribuição da variável limite associada,  $V_\bullet$ , sob a validade da hipótese nula  $H_0 : \gamma = 0$  e uma correspondente referência para consulta.

A escolha entre as funções de distribuição exponencial e função de distribuição generalizada de Pareto não exponencial também pode ser realizada por meio de intervalos de confiança ao observarmos

Tabela 1: Estatísticas de teste - distribuições.

Estatística de teste $T_{\bullet}^*$ $\left(T_{\bullet}^* \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{} V_{\bullet}\right)$	$V_{\bullet}$	Referência
$T_1^* = -2 \ln(T_1)$ $T_{1,b}^* = -2 \ln(T_{1,b})$	$\chi^2$	[7] [18]
$T_2^* = \sqrt{m} \left( T_2 - \frac{1-\gamma}{1-2\gamma} \right)$ $T_3^* = \sqrt{m} T_3$	Normal	[8] [14]
$T_4^* = T_4 \times \ln 2 - \ln m$ $T_5^* = T_5 \times \ln 2 - \ln(m/2)$	Gumbel	[14] [6]
$T_6^* = \ln(3/2) \sqrt{\frac{m}{2}} \left( T_6 - \frac{\ln 2}{\ln(3/2)} \right)$	Normal	[6]

a inclusão ou não do valor zero num intervalo de confiança obtido para o parâmetro de forma  $\gamma$ . Aqui relembramos apenas o método ML e o método dos momentos ponderados pela probabilidade (método PWM) utilizados na ilustração prática. No método ML, a log-verosimilhança (*cf.* [3, 13]) é dada por

$$\ln L(\gamma, \beta) = -m \ln \beta - \left( \frac{1}{\gamma} + 1 \right) \sum_{i=1}^m \ln \left( 1 + \gamma \frac{Y_i}{\beta} \right),$$

a qual é escrita do seguinte modo

$$\ln L(\gamma, \tau) = -m \ln \gamma + m \ln \tau - \left( \frac{1}{\gamma} + 1 \right) \sum_{i=1}^m \ln(1 + \tau Y_i),$$

se utilizarmos a reparametrização  $(\gamma, \beta) \rightsquigarrow (\gamma, \tau)$  com  $\tau := \frac{\gamma}{\beta}$ . Os estimadores de máxima verosimilhança de  $\gamma$  e  $\tau$ ,  $\hat{\gamma}_{\text{ML}}$  e  $\hat{\tau}_{\text{ML}}$ , resultam da resolução de

$$\frac{1}{\hat{\tau}_{\text{ML}}} - \left( \frac{1}{\hat{\gamma}_{\text{ML}}} + 1 \right) \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{Y_i}{1 + \hat{\tau}_{\text{ML}} Y_i} = 0,$$

com  $\hat{\gamma}_{\text{ML}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ln(1 + \hat{\tau}_{\text{ML}} Y_i)$ . Os estimadores de  $\gamma$  e  $\beta$  pelo método PWM,  $\hat{\gamma}_{\text{PWM}}$  e  $\hat{\beta}_{\text{PWM}}$ , são dados por:

$$\hat{\gamma}_{\text{PWM}} = 2 - \frac{\hat{M}_{1,0,0}}{\hat{M}_{1,0,0} - 2\hat{M}_{1,0,1}} \quad \text{e} \quad \hat{\beta}_{\text{PWM}} = \frac{2\hat{M}_{1,0,0}\hat{M}_{1,0,1}}{\hat{M}_{1,0,0} - 2\hat{M}_{1,0,1}},$$

respetivamente, com (*cf.* [3])

$$\hat{M}_{1,0,s} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(1 - \frac{j}{m+1}\right)^s Y_{j:m}, \text{ para } s \in \{0, 1\}.$$

Os estimadores obtidos pelos métodos ML e PWM para os parâmetros da função de distribuição generalizada de Pareto têm uma distribuição assintoticamente normal (*cf.* [3, 7]). Assim, quando na presença de grandes amostras, um intervalo a  $(1 - \alpha) \times 100\%$  de confiança para  $\gamma$  (*cf.* [3]) é dado aproximadamente por

$$\hat{\gamma} \pm z_{1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\hat{v}}{m}},$$

com  $z_{1-\frac{\alpha}{2}}$  o quantil de probabilidade  $1 - \frac{\alpha}{2}$  da distribuição normal padrão,  $\hat{\gamma} = \hat{\gamma}_{\text{ML}}$  e  $\hat{v} = (1 + \hat{\gamma}_{\text{ML}})^2$  ou

$$\hat{\gamma} = \hat{\gamma}_{\text{PWM}} \quad \text{e} \quad \hat{v} = \frac{(1 - \hat{\gamma}_{\text{PWM}})(2 - \hat{\gamma}_{\text{PWM}})^2(1 - \hat{\gamma}_{\text{PWM}} + 2\hat{\gamma}_{\text{PWM}}^2)}{(1 - 2\hat{\gamma}_{\text{PWM}})(3 - 2\hat{\gamma}_{\text{PWM}})}.$$

### 3 Ilustração prática

Segundo a plataforma Plus500, que opera no mercado bolsista, o índice bolsista *S&P500* é constituído pelas 500 ações ou ativos americanos com as maiores capitalizações de mercado. À semelhança do que é realizado em alguns artigos relativos à teoria dos valores extremos aplicada na área das Finanças (*e.g.* [1, 10, 11]), a base de dados escolhida para esta ilustração prática é constituída pelas taxas dos retornos diários. A obtenção dos valores de  $u$  apresentados na Tabela 3 foi realizada por meio da aplicação da função `findthreshold`

da biblioteca `fExtremes` do programa R considerando as 0.5%, 1%, 2.5%, 5% e 10% maiores observações da amostra (*e.g.* [1, 10]). No gráfico da vida média residual (Gráfico MRL) da Figura 1 estão apresentados três desses valores como também as correspondentes estimativas para os parâmetros de escala e de forma pelo método ML. Este gráfico foi obtido por meio da aplicação da função `mrlplot` da biblioteca `evmix` ligeiramente alterada (notação e tradução para português).

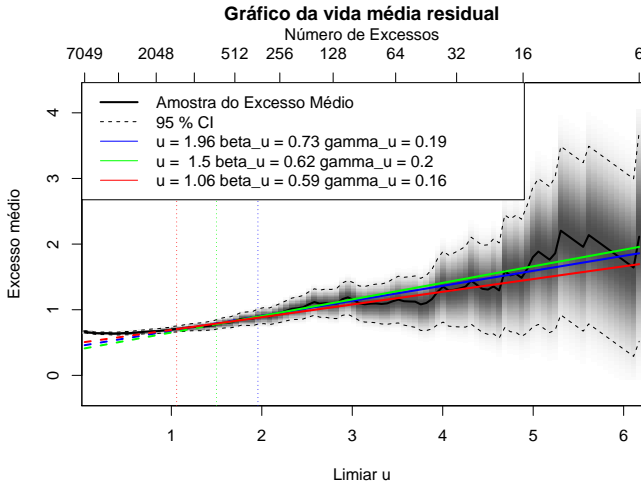


Figura 1: Gráficos MRL considerando  $u = 1.96$ ,  $u = 1.50$  e  $u = 1.06$  correspondentes a 2.5%, 5% e 10% dos valores extremos.

A decisão de rejeitar ou não a distribuição exponencial, ao nível de significância  $\alpha = 0.05$ , para cada uma das seis estatísticas de teste analisadas está apresentada na Tabela 2. Ao analisarmos a mesma, observamos que para todas as estatísticas de teste analisadas rejei-



tamos a distribuição exponencial para os excessos relacionados com o limiar  $u = 1.959207$ . De igual forma, podemos verificar que a função de distribuição exponencial é rejeitada quando a estatística de teste  $T_3$  é aplicada, qualquer que seja o limiar considerado. No caso do limiar  $u = 3.421284$ , notamos que a função de distribuição exponencial só não é rejeitada quando são realizados testes bilaterais, ou seja, quando são aplicadas as estatísticas de teste  $T_1$ ,  $T_{1,b}$  e  $T_2$ .

Tabela 2: Decisão de rejeição (Sim) ou não rejeição (Não) da distribuição exponencial ( $\alpha = 0.05$ ).

	0.5%	1%	2.5%	5%	10%
Limiar $u$	3.421284	2.672995	1.959207	1.499139	1.059779
$T_1$ ( $\gamma \neq 0$ )	Não	Não	Sim	Sim	Sim
$T_{1,b}$ ( $\gamma \neq 0$ )	Não	Não	Sim	Sim	Sim
$T_2$ ( $\gamma \neq 0$ )	Não	Sim	Sim	Sim	Sim
$T_3$ ( $\gamma > 0$ )	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim
$T_4$ ( $\gamma > 0$ )	Sim	Não	Sim	Sim	Sim
$T_5$ ( $\gamma > 0$ )	Sim	Não	Sim	Sim	Sim
$T_6$ ( $\gamma > 0$ )	Sim	Não	Sim	Não	Não

Observamos assim para este limiar diferentes decisões para as estatísticas de teste  $T_2$  e  $T_3$ , ao contrário do que é observado para o limiar igual a 2.672995. Para este limiar, a função de distribuição exponencial não é rejeitada para todas as restantes estatísticas de teste. Observamos também que, para os limiares iguais a 1.499139 e 1.059779, a distribuição exponencial só não é rejeitada quando é aplicada a estatística de teste  $T_6$ . Brilhante [6] constatou que a estatística de teste  $T_6$  tem um pior desempenho na deteção da distribuição exponencial em comparação com as estatísticas de teste  $T_4$  e  $T_5$ . Aqui observamos que as estatísticas de teste  $T_4$ ,  $T_5$  e  $T_6$  apenas indiciam decisões de rejeição diferentes para os dois valores de limiar mais baixos correspondentes a uma maior quantidade de dados retidos na análise. No cálculo dos valores observados para as estatísticas de teste  $T_1$  e  $T_{1,b}$  foi utilizado o método ML. Este método e o método PWM estão implementados em muitas bibliote-

cas do R tais como as bibliotecas *eva*, *evir*, *fExtremes*, *QRM* e *POT*. A representação gráfica para a estimativa do parâmetro de forma e os respetivos intervalos de confiança na Figura 2 foram obtidos por meio da função gráfica *shape* na biblioteca *evir* ligeiramente alterada (notação e tradução para português).

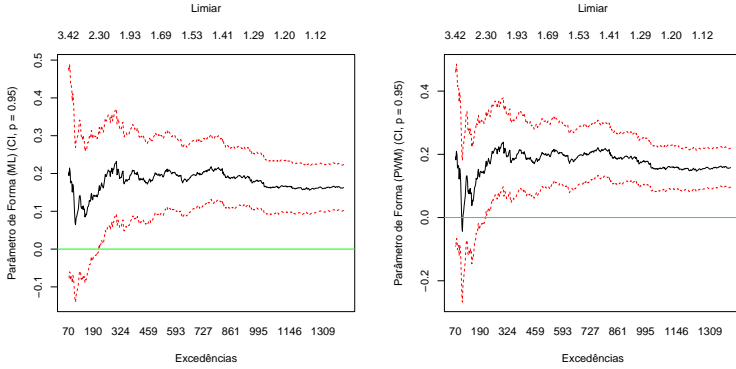


Figura 2: Estimativas e intervalos de confiança para  $\gamma$ .

Nesta ilustração, optamos por utilizar a biblioteca *POT* na obtenção das estimativas e intervalos de confiança para  $\gamma$  apresentados na Tabela 3. Ao analisarmos a tabela, observamos que os intervalos de confiança calculados quando consideramos 0.5% e 1% dos valores extremos contêm o valor zero, qualquer que seja o método de estimação de parâmetros utilizado. Assim, para estes valores em particular, não temos evidência suficiente para rejeitar a distribuição exponencial.

A análise de gráficos tais como gráficos Q-Q, por exemplo, além de poder indiciar possíveis modelos probabilísticos para a distribuição subjacente a um determinado conjunto de dados numa observação preliminar destes, permite uma validação informal da escolha realizada quer por meio dos testes de hipóteses ou dos intervalos de con-

fiança aplicados. A título exemplificativo apresentamos na Figura 3 os gráficos de diagnóstico da biblioteca *isnev* para  $u = 1.059779$ , limiar para o qual os intervalos de confiança calculados não contêm o valor zero e a distribuição exponencial foi rejeitada na aplicação de todas as estatísticas de testes indicadas, excepto a estatística de teste  $T_6$ . Na Figura 3, observamos que os dados têm uma aproximação razoável à diagonal apresentada nos dois primeiros gráficos e um bom ajustamento dos dados do histograma à curva no terceiro gráfico.

Tabela 3: Estimativas para  $\gamma$  e intervalos a 95% de confiança.

	0.5%	1%	2.5%	5%	10%
Limiar $u$	3.421284	2.672995	1.959207	1.499139	1.059779
$\hat{\gamma}_{ML}$	0.2016	0.1094	0.1859	0.2006	0.1626
I.C. <sub>ML</sub>	-0.07, 0.47	-0.06, 0.28	0.06, 0.31	0.11, 0.29	0.10, 0.22
$\hat{\gamma}_{PWM}$	0.1916	0.0828	0.1898	0.2027	0.1579
I.C. <sub>PWM</sub>	-0.09, 0.47	-0.11, 0.27	0.06, 0.32	0.12, 0.29	0.1, 0.22

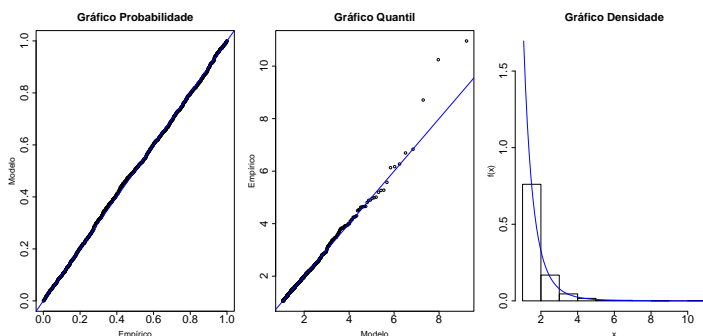


Figura 3: Gráficos de diagnóstico da biblioteca *isnev* para  $u = 1.059779$ .

## 4 Considerações finais

O objetivo do estudo aqui realizado foi sugerir métodos de escolha entre a função de distribuição exponencial e a função de distribuição generalizada de Pareto não exponencial. De modo a exemplificar a aplicação destes métodos foi realizada uma ilustração prática com recurso ao programa R.

Ao aplicarmos as estatísticas de teste  $T_1$  e  $T_{1,b}$  obtivemos as mesmas conclusões para qualquer limiar considerado. Conclusões análogas foram extraídas dos intervalos de confiança obtidos quando foi considerada a estimativa para o parâmetro de forma  $\gamma$  obtida tanto pelo método ML como pelo método PWM. Aplicando a estatística de teste  $T_2$ , foi considerado que os dados forneceram evidência suficiente para considerar que os excessos em estudo seguem uma distribuição generalizada de Pareto não exponencial quando todos os limiares são considerados, exceto quando foi considerado o limiar correspondente a 0.5% dos valores extremos. Esta exceção não foi observada na aplicação da estatística de teste  $T_3$ , uma vez que qualquer que seja o limiar considerado, os dados forneceram sempre evidência suficiente para a rejeição do modelo exponencial para os excessos em estudo. Por sua vez, ao aplicarmos as estatísticas de teste  $T_4$  e  $T_5$  foram obtidas as mesmas conclusões para quaisquer limiares utilizados, existindo apenas evidência para não rejeitar a distribuição exponencial quando foi considerado 1% dos valores extremos. Por fim, as estatísticas de teste  $T_4$ ,  $T_5$  e  $T_6$  apenas indicaram decisões de rejeição diferentes para os dois valores de limiar mais baixos correspondentes a uma maior quantidade de dados retidos na análise. Notemos também que os intervalos de confiança calculados quando consideramos 5% e 10% dos valores extremos não contêm o valor zero e a distribuição exponencial foi rejeitada na aplicação de todas as estatísticas de testes indicadas, com exceção da estatística de teste  $T_6$ . No estudo realizado, a análise visual dos gráficos de diagnóstico da biblioteca *ismev* permitiu observar indícios de um bom ajustamento da distribuição generalizada de Pareto para os dois valores elevados de  $u$  correspondentes. Os gráficos apresentados na

Secção 3 para  $u = 1.059779$  foram escolhidos em detrimento dos gráficos para  $u = 1.499139$  por apresentarem indícios mais fortes desse bom ajustamento. Como, segundo Coles [9], é prática comum na seleção do limiar  $u$  considerar para este o menor valor possível que proporcione uma aproximação razoável, a escolha de 10% dos valores extremos aparenta ser a escolha aconselhável de entre as percentagens de valores extremos utilizadas. No entanto, é necessário ter sempre em atenção que a escolha de um valor demasiado baixo para  $u$  pode ter como consequência a inclusão de valores que podem não ser úteis para o estudo dos valores extremos e a escolha de um limiar demasiado elevado pode levar à supressão de valores que são realmente relevantes.

## Agradecimentos

Este trabalho é financiado por Fundos Nacionais através da FCT-Fundação para a Ciência e a Tecnologia no âmbito do projeto UIDB/00006/2020. Os autores agradecem ao revisor pelos seus comentários e sugestões pertinentes.

## Referências

- [1] Allen, E., Singh, A., Powell, R. (2011). Extreme market risk-an extreme value theory approach. *Edith Cowan University*, 1–26.
- [2] Balkema, A., de Haan, L. (1974). Residual life time at great age. *The Annals of Probability*, 792–804.
- [3] Beirlant, J., Goegebeur, Y., Teugels, J., Segers J. (2004). *Statistics of Extremes: Theory and Applications*, John Wiley & Sons Ltd.
- [4] Bermudez, P., Kotz, S. (2008). Parameter estimation of the generalized Pareto distribution - Part I. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1353–1373.

- [5] Bermudez, P., Kotz, S. (2008). Parameter estimation of the generalized Pareto distribution - Part II. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1374–1388.
- [6] Brilhante, M. (2004). Exponentiality versus generalized Pareto - a resistant and robust test. *REVSTAT - Statistical Journal*, Vol. 2(1), 1–13.
- [7] Castillo, E., Hadi, A., Balakrishnan, N., Sarabia, J. (2005). *Extreme Value and Related Models with Applications in Engineering and Science*. Wiley Hoboken, NJ.
- [8] Chaouche, A., Bacro, J. (2006). Statistical inference for the generalized Pareto distribution: Maximum likelihood revisited. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Vol 35, 785–802.
- [9] Coles, S. (2001). *An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values*. Springer.
- [10] Curto, J., Rios, A. (2007). Teoria de valores extremos: aplicação aos mercados de capitais. *Actas do XV Congresso Anual da SPE*, 175–184.
- [11] Gilli, M., Këllezi, E. (2006). An application of extreme value theory for measuring financial risk. *Computational Economics*, Vol. 27(2-3), 207–228.
- [12] Gomes, I. (1982). A note on statistical choice of extremal models. *Actas de las IX Jornadas Matemáticas Hispano-Lusas: Salamanca 12-16 abril 1982*, Vol. 1, 653–655.
- [13] Gomes, I., Fraga Alves, M. I., Neves, C. (2013). *Análise de Valores Extremos: Uma Introdução*. Sociedade Portuguesa de Estatística.
- [14] Gomes, I., van Montfort, J. (1986). Exponentiality versus generalized Pareto-quick tests. *Third International Conference on Statistical Climatology Vienna*, 185–195.

- [15] Gumbel, E. J. (1965). A quick estimation of the parameters in Fréchet's distribution. *Review of the International Statistical Institute*, Vol 33, 349–363.
- [16] Marohn, F. (2000). Testing extreme value models. *Extremes*, Vol. 3(4), 363–384.
- [17] Pickands III, J. (1975). Statistical inference using extreme order statistics. *The Annals of Statistics*, Vol. 3 (1), 119–131.
- [18] Reiss, R., Thomas, M. (2007). *Statistical Analysis of Extreme Values - Applications to Insurance, Finance, Hydrology and Other Fields*. Springer.





# Delineamento amostral para estimar concentração média de organismos em água de lastro por abordagem bayesiana semiparamétrica

Eliardo G. Costa

Dep. Estatística, UFRN, Brasil, *eliardocosta@ccet.ufrn.br*

Carlos Daniel Paulino

DM-IST e Centro de Estatística e Aplicações (CEAUL), Universidade de Lisboa, Portugal, *daniel.paulino@tecnico.ulisboa.pt*

Julio M. Singer

IME, Universidade de São Paulo, Brasil, *jmsinger@ime.usp.br*

**Palavras-chave:** Risco Bayes; Intervalo de credibilidade; Mistura por processo Dirichlet; Distribuição Poisson; Água de lastro

**Resumo:** Considera-se aqui a determinação de tamanhos amostrais ótimos para estimar a concentração média de micro-organismos em água de lastro de navios por uma abordagem bayesiana semiparamétrica, envolvendo uma mistura por processo Dirichlet baseada num modelo amostral Poisson. Este modelo providencia uma maior flexibilidade na modelação da distribuição dos organismos do que os modelos paramétricos competidores e afigura-se robusto perante deficiências de especificação. A obtenção de um tamanho ótimo resulta da aplicação do critério de minimização de um custo total baseado na soma do risco de Bayes minimizado, associado à função perda adotada, com uma função do custo de amostragem da água a recolher. Os intervalos de credibilidade para a concentração média que constituem a função de decisão, a obter do modelo proposto, para o tamanho da amostra escolhido podem então ser usados para verificar a conformidade da água com estabelecidos padrões internacionais.

# 1 Introdução

A norma D-2 da *International Maritime Organization* (IMO) requer que a água desbalastrada, entre outras restrições, não deve conter mais do que 10 organismos (vivos), com dimensão máxima  $10\ \mu\text{m}$  e  $50\ \mu\text{m}$  por mL. Dado que o volume de água de lastro nos tanques de navios pode chegar a 100000 toneladas, a conformidade com tal regulamentação deve ser verificada através de procedimentos de amostragem que requerem uma cuidadosa análise estatística. Um motivo para tal está na inerente heterogeneidade da concentração dos organismos no tanque - *vide e.g.* Murphy *et al.* [9]. Este traço tem justificado o uso de modelos binomiais negativos como em Costa *et al.* [3]. Uma das vantagens do recurso ao paradigma bayesiano está na possibilidade de incorporação de conhecimento apriorístico adquirido ao longo de análises de sucessivos deslastres de água.

Suponha-se que se recolhem  $n$  alíquotas de água com volume  $w$  (em mL) e que  $X_i$  denota o número de organismos na  $i$ -ésima alíquota. Considere-se ainda que a concentração média de organismos na região do tanque donde se extrai a alíquota  $i$  é denotada por  $\lambda_i$ , pelo que se espera encontrar  $w\lambda_i$  organismos nessa alíquota. Para  $i = 1, \dots, n$ , admita-se que, dado  $\lambda_i$ ,  $X_i$  segue uma distribuição Poisson com média  $w\lambda_i$  e que a variabilidade de  $\lambda_i$  é traduzida por uma medida de probabilidade  $F$ , parcial ou totalmente desconhecida. Por exemplo, num dos modelos em Costa *et al.* [3]  $F$  é a medida correspondente à distribuição gama.

Para permitir maior flexibilidade na modelação e robustez perante más especificações pode-se adotar diversas alternativas para  $F$ . Uma maneira de evitar a especificação duma forma paramétrica para  $F$  é considerar medidas de probabilidade aleatórias (RPM), que são distribuições no espaço de medidas de probabilidade (aqui, em  $R_+$ ). Uma RPM é baseada no denominado processo Dirichlet (DP) que Ferguson [5] introduziu, como uma possível solução para o problema de especificação *a priori* numa abordagem bayesiana não paramétrica, em que o espaço apriorístico é um conjunto de distribuições de probabilidade sobre um dado espaço amostral. Veja-se *e.g.* Pha-

dia [10] para detalhes. O nosso objetivo é lidar primeiramente com o problema de delineamento amostral para efeitos de estimação da concentração média de organismos em tanques de água de lastro com informação maleável sobre a repartição neles dos organismos.

Na Secção 2 descreve-se o modelo bayesiano semiparamétrico adotado e algoritmos necessários para obter distribuições *a posteriori* pela via de simulação. Critérios para determinação de tamanhos amostrais são apresentados na Secção 3. Conclui-se o texto central do artigo com uma discussão de resultados juntamente com uma ilustração na Secção 4.

## 2 Modelo bayesiano semiparamétrico e como simular dele

Suponha-se que  $F$  segue um processo Dirichlet com parâmetros  $\alpha$  and  $F_0$ , simbolicamente  $F \sim \text{DP}(\alpha, F_0)$ . Neste quadro, sendo  $A$  um elemento da álgebra- $\sigma$  associada ao espaço,  $\Lambda$ , de  $\lambda_i$ , tem-se  $\mathbb{E}[F(A)] = F_0(A)$  e  $\text{Var}[F(A)] = F_0(A)[1 - F_0(A)]/(\alpha + 1)$ , onde  $F_0$  é rotulada como distribuição de base e  $\alpha$  é um parâmetro de precisão. No nosso problema considera-se  $F_0$  como uma distribuição gama de média  $\lambda_0$  e parâmetro de forma  $\theta_0$ , ambos conhecidos, de modo que a correspondente variância é  $\lambda_0^2/\theta_0$ . Notando que o processo Dirichlet é a medida *a priori* imputada à distribuição supostamente desconhecida das concentrações esperadas das contagens poissonianas, o modelo em questão pode ser descrito hierarquicamente como

$$X_i | \lambda_i \stackrel{\text{ind}}{\sim} \text{Poisson}(w\lambda_i), \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (1)$$

$$\lambda_i | F \stackrel{\text{iid}}{\sim} F, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (2)$$

$$F \sim \text{DP}(\alpha, F_0). \quad (3)$$

O parâmetro de interesse é a média, denotada por  $\bar{\lambda}_R$ , da real distribuição (desconhecida) da concentração esperada de organismos no

tanque,  $F$ . A correspondente média (aleatória) do processo *a priori*

$$\bar{\lambda} = \int_{\Lambda} uF(du),$$

é assim um funcional do processo. Para detalhes sobre a distribuição de funcionais do processo Dirichlet e suas propriedades remete-se o leitor para Cifarelli e Regazzini [2], Regazzini *et al.* [11], entre outros. No nosso caso não precisamos de especificar a distribuição de probabilidade do funcional uma vez que é suficiente saber como se pode simular da distribuição de  $\bar{\lambda}$ . Para tal pode-se usar a Proposição 2 de Hjort e Ongaro [7] que se reporta a uma representação estocástica para funcionais do processo Dirichlet obtida da representação quebra-vara deste. Se  $\mathbb{E}[\log(1 + |\xi|)] < \infty$ , tem-se

$$\bar{\lambda} =_d B\xi + (1 - B)\bar{\lambda}, \quad (4)$$

em que  $\xi \sim F_0$ ,  $B \sim \text{Be}(1, \alpha)$  denota uma distribuição beta de média  $1/(1 + \alpha)$  e a notação ‘ $=_d$ ’ significa “segue a mesma distribuição que”. No 2º membro de (4) os termos  $B$ ,  $\xi$  e  $\bar{\lambda}$  são distribucionalmente independentes. Como se adota para  $F_0$  uma distribuição gama, então  $\mathbb{E}[|\xi|]$  é finito e atendendo à desigualdade de Jensen, conclui-se que  $\mathbb{E}[\log(1 + |\xi|)]$  é também finito de modo que se pode usar a representação estocástica (4).

A estratégia de simulação para estimar  $\bar{\lambda}$  é baseada numa cadeia de Markov da forma

$$\bar{\lambda}_t = B_t \xi_t + (1 - B_t) \bar{\lambda}_{t-1}, \quad t \geq 2. \quad (5)$$

Para o efeito decidiu-se usar o algoritmo proposto por Guglielmi *et al.* [6], que consiste em simular cadeias superior ( $U$ ) e inferior ( $L$ ) por meio de

$$\bar{\lambda}_t^U = B_t \xi_t + (1 - B_t) \bar{\lambda}_{t-1}^U, \quad \bar{\lambda}_t^L = B_t \xi_t + (1 - B_t) \bar{\lambda}_{t-1}^L, \quad t \geq 2, \quad (6)$$

em que  $B_t$  e  $\xi_t$  são simulados de  $\text{Be}(1, \alpha)$  e  $F_0$ , respetivamente. O algoritmo é iniciado a partir das quantidades,  $\bar{\lambda}_1^U$  e  $\bar{\lambda}_1^L$ . Guglielmi

*et al.* [6] fixou-as como os limites superior e inferior do espaço paramétrico, respetivamente. No caso de este ser ilimitado à direita, eles sugerem fixar  $\bar{\lambda}_1^U$  como o maior bit interno do computador em uso. Atualizam-se então essas quantidades usando (6) até a diferença entre elas ser pequena, *i.e.*,  $|\bar{\lambda}_t^U - \bar{\lambda}_t^L| < \epsilon$ , para um pequeno  $\epsilon > 0$ . O algoritmo em 3 passos é especificado a seguir:

### Algoritmo 1

1. Fixar um valor para  $\epsilon$  e tomar  $\bar{\lambda}_1^L = 0$  e  $\bar{\lambda}_1^U = 1.79 \times 10^{308}$ ;
2. Atualizar as quantidades superior e inferior usando (6);
3. Se a diferença absoluta das duas quantidades for menor que  $\epsilon$ , o valor requerido para  $\bar{\lambda}$  pode ser tomado como  $\bar{\lambda}_t^U$  ou  $\bar{\lambda}_t^L$ . No caso contrário, voltar ao passo 2.

Prova-se quando  $t \rightarrow \infty$  que  $\bar{\lambda}_t \rightarrow \bar{\lambda}$  em distribuição. Usando o Algoritmo 1 pode-se então obter amostras de  $\bar{\lambda}$ .

Dada uma amostra aleatória de contagens  $\mathbf{x}_n = (x_1, \dots, x_n)$ , considere-se a média aleatória *a posteriori*

$$\bar{\lambda}^{(n)} = \int_{\Lambda} u F^{(n)}(du),$$

com  $F^{(n)} \equiv F|\mathbf{x}_n$  denotando a distribuição *a posteriori* de  $F$  dada por

$$F^{(n)} = \int_{\Lambda^n} \text{DP}(\alpha + n, G_n) \nu(d\boldsymbol{\lambda}_n | \mathbf{x}_n),$$

em que  $\boldsymbol{\lambda}_n = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  e  $G_n = (\alpha F_0 + \sum_{i=1}^n \delta_{\lambda_i})/(\alpha + n)$  com  $\delta_{\lambda_i}(A) = 1$ , se  $\lambda_i \in A$ , e  $\delta_{\lambda_i}(A) = 0$ , em caso contrário. Segundo a representação em urna de Pólya (Blackwell e MacQueen [1]) da medida *a priori* DP para  $\{\lambda_i\}$ , a distribuição conjunta marginal dos

$\{\lambda_i\}$  dado  $\mathbf{x}_n$ , explicitada na mistura  $F^{(n)}$  de processos Dirichlet, é dada por

$$\nu(d\boldsymbol{\lambda}_n|\mathbf{x}_n) \propto \prod_{i=1}^n f(x_i|\lambda_i) \left[ \alpha F_0(d\lambda_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \delta_{\lambda_i}(d\lambda_j) \right],$$

em que  $f(\cdot|\lambda)$  é a função de probabilidade Poisson com média  $w\lambda$ . Tomando em consideração a natureza discreta do DP para os  $\{\lambda_i\}$  e denotando os correspondentes valores distintos por  $\lambda_j^*$  (em número de  $n^* \leq n-1$ ) com multiplicidade  $n_j$ , as probabilidades condicionais completas podem ser calculadas (*vide* Müller, Quintana, Jara e Hanson [8]) por

$$\nu(d\lambda_i|\boldsymbol{\lambda}_{(-i)}, \mathbf{x}_n) \propto q_0 f(x_i|\lambda_i) F_0(d\lambda_i) + \sum_{j=1}^{n^*} n_j q_j^* \delta_{\lambda_j^*}(d\lambda_i), \quad (7)$$

em que  $\boldsymbol{\lambda}_{(-i)} = \{\lambda_j, j \neq i, j = 1, \dots, n\}$  com

$$q_0 \propto \alpha \int_{\Lambda} f(x_i|\lambda_i) F_0(d\lambda_i) \quad \text{e} \quad q_j^* \propto f(x_i|\lambda_j^*),$$

tal que  $q_0 + \sum_j n_j q_j^* = 1$ . Note-se a estrutura binomial negativa para  $q_0$  quando se toma uma distribuição gama para  $F_0$ .

Assim pode usar-se um amostrador de Gibbs para obter amostras da distribuição misturadora  $\nu(d\boldsymbol{\lambda}_n|\mathbf{x}_n)$  por meio de (7). Para o efeito, adotou-se um algoritmo baseado no procedimento proposto por Escobar e West [4], denotado aqui como **Algoritmo 2**.

Para a média aleatória *a posteriori* usou-se a seguinte representação estocástica, Hjort e Ongaro [7, eq. 5.3]

$$\bar{\lambda}^{(n)} =_d (1 - B_*) \bar{\lambda} + B_* \sum_{i=1}^n D_i Z_i, \quad (8)$$

em que  $B_* \sim \text{Be}(n, \alpha)$ , com média  $n/(\alpha + n)$ ,  $D_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  são os elementos de um vetor com distribuição uniforme multivariada e

$(Z_1, \dots, Z_n) \sim \nu(d\lambda_n | \mathbf{x}_n)$ . Tomando em conta todos estes traços, a simulação de amostras de  $\bar{\lambda}^{(n)}$  pode ser executada através do seguinte algoritmo em 5 passos:

### Algoritmo 3

1. Simular  $B_*$  de uma distribuição  $\text{Be}(n, \alpha)$ ;
2. Simular  $\bar{\lambda}$  pelo Algoritmo 1;
3. Simular  $D_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  de uma distribuição uniforme multivariada;
4. Simular  $(Z_1, \dots, Z_n)$  de  $\nu(d\lambda_n | \mathbf{x}_n)$  usando o Algoritmo 2;
5. Obter o valor requerido usando as quantidades geradas nos passos 1-4 e (8).

## 3 Determinação do tamanho da amostra via teoria da decisão

O tamanho amostral que se pretende ótimo é determinado por um critério de minimização de um custo total assente em duas componentes: i) o risco de Bayes relativo a uma função perda especificada avaliado na melhor função de decisão; ii) uma função que traduza o custo do processo de amostragem. A função perda a especificar para uma dada forma de decisão  $d_n$  baseada numa amostra  $\mathbf{X}_n = \{X_i\}$  quando o parâmetro de interesse é  $\bar{\lambda}_R$  é denotada por  $L(\bar{\lambda}_R, d_n)$ . Neste problema, o tipo de função de decisão que nos interessa é um intervalo de credibilidade para o parâmetro especificado para cada amostra concreta pelos seus limites inferior,  $a = a(\mathbf{x}_n)$ , e superior,  $b = b(\mathbf{x}_n)$ , ambos dependentes de  $n$ . Isto justifica-se pelo objetivo de avaliação da conformidade da água de lastro do navio com a referida norma D-2. A regra de decisão consistiria, uma vez determinado um adequado tamanho  $n_o$  da amostra de água a coletar, em declarar

um navio desconforme se  $a(\mathbf{x}_{n_o}) > 10$  ou conforme se  $b(\mathbf{x}_{n_o}) < 10$ . na opção que resta,  $a(\mathbf{x}_{n_o}) < 10 < b(\mathbf{x}_{n_o})$ , mais dados deveriam ser coletados para então se tomar uma decisão.

Neste quadro, o risco Bayes para a função  $d_n$  pode ser escrito por

$$r(F^{(n)}, d_n) = \int_{\mathcal{X}^n} \mathbb{E}[L(\bar{\lambda}_R, d_n) | \mathbf{x}_n] g(\mathbf{x}_n) d\mathbf{x}_n, \quad (9)$$

em que  $g(\mathbf{x}_n)$  é a função de probabilidade marginal calculada das distribuições Poisson e do DP para  $\{\lambda_i\}$ . A função de decisão  $d_n^*$  que minimiza  $r(F^{(n)}, d_n)$  entre todas as decisões  $d_n$  costuma ser denominada regra de Bayes e corresponde à menor perda esperada *a posteriori* para qualquer  $\mathbf{x}_n$ . O tamanho amostral ótimo minimiza então o custo total que vai aqui tomar-se como

$$\text{TC}(n) = r(F^{(n)}, d_n^*) + cn,$$

em que  $c$  pretende representar o custo de amostrar uma alíquota. Muitas vezes não é possível calcular analiticamente o risco de Bayes  $r(F^{(n)}, d_n^*)$ . Opta-se então por recorrer a simulações Monte Carlo para estimar de modo tão preciso quanto possível tal risco para um conjunto fixado de valores de  $n$ , gerando amostras de  $\mathbf{x}_n$ , calculando o valor esperado em (9) aplicado em  $d_n^*$  e tomando a média desses valores. Com as estimativas de  $r(F^{(n)}, d_n^*)$  para cada  $n$  tenta-se ajustar-lhes uma curva a partir de alguma classe de funções de  $n$ . Propondo a classe indicada em

$$\text{TC}(n) - cn = \frac{E}{(1+n)^H},$$

por linearização e aplicação do método de mínimos quadrados obtém-se uma curva substituindo  $E$  e  $H$  pelas correspondentes estimativas. O tamanho amostral ótimo  $n_o$  é o inteiro mais próximo de

$$\left( \frac{\hat{E} \hat{H}}{c} \right)^{1/(\hat{H}+1)} - 1, \quad (10)$$



em que  $\widehat{E}$  e  $\widehat{H}$  denotam as referidas estimativas de  $E$  e  $H$ .

Para implementação deste procedimento de planeamento amostral, vai-se considerar a função perda

$$L(\bar{\lambda}_R, d_n) = \gamma\tau + (\bar{\lambda}_R - m)^2/\tau,$$

em que  $\gamma > 0$  é uma quantidade fixa,  $\tau = (b-a)/2$  é a semiamplitude e  $m = (a+b)/2$  o centro do intervalo de credibilidade  $(a,b)$  - omite-se aqui, por simplicidade notacional, o argumento  $\mathbf{x}_n$  nos limites do intervalo. Esta função perda é assim uma soma ponderada de dois termos expressos na mesma unidade de medida. O 1º termo é uma medida de precisão do intervalo e o 2º uma medida relativa do viés escalada pela precisão.

Prova-se que a regra de Bayes corresponde às quantidades que delimitam o intervalo  $[a^*, b^*] = [m - s_\gamma, m + s_\gamma]$ , onde

$$(m, s_\gamma) = \left( \mathbb{E}\bar{\lambda}^{(n)}, \gamma^{-1/2} \sqrt{\text{Var}\bar{\lambda}^{(n)}} \right).$$

Os momentos indicados são calculados com base na representação da distribuição de  $\bar{\lambda}^{(n)}$  indicada em (8). Todos os cálculos deste procedimento foram feitos na linguagem R.

A Tabela 1 apresenta os tamanhos amostrais calculados usando o critério de minimização do custo total para alguns valores do volume e custo de cada alíquota, do peso do termo de precisão e do hiperparâmetro de precisão do processo Dirichlet *a priori*. A Figura 1 ilustra os pontos  $(n, TC(n))$  determinados e a curva ajustada por MQ para o caso do modelo com o processo Dirichlet *a priori* definido por  $\alpha = 0.5$ ,  $\lambda_0 = \theta_0 = 10$  e o custo unitário por alíquota de  $w = 1mL$  igual a  $c = 0.01$ .

## 4 Discussão e ilustração

O uso na prática do DP requer escolha de valores para  $\alpha$ , cuja elicitação é bastante complicada, até porque é controversa a interpretação

Tabela 1: Tamanho amostral ( $n$ ) sob o modelo Poisson/processo Dirichlet (1)-(3) com  $F_0 \sim Ga(\theta_0, \theta_0/\lambda_0)$  e média  $\lambda_0 = 10$

Volume alíquota ( $w$ )	Custo alíquota ( $c$ )	$\gamma$	$\alpha$	Param. forma ( $\theta_0$ )				
				1.0	2.5	5.0	7.5	10.0
0.5	0.005	1	0.5	108	92	83	78	74
			1.5	133	106	92	84	79
			2.5	138	109	92	83	77
			5.0	138	106	85	76	69
			10.0	126	92	72	61	54
		1/4	0.5	69	59	53	49	47
			1.5	83	67	58	52	49
			2.5	86	68	57	50	47
			5.0	84	64	52	45	41
			10.0	75	55	42	35	31
	0.010	1	0.5	69	59	53	49	47
			1.5	84	67	57	52	49
			2.5	86	68	57	51	47
			5.0	85	64	51	45	41
			10.0	75	54	42	36	31
		1/4	0.5	45	37	33	31	30
			1.5	53	42	36	32	30
			2.5	54	42	35	31	28
			5.0	52	39	31	27	24
			10.0	45	32	24	20	18
1.0	0.005	1	0.5	103	85	75	70	66
			1.5	128	100	85	77	72
			2.5	135	104	87	77	72
			5.0	135	102	82	73	66
			10.0	125	91	71	61	55
		1/4	0.5	67	54	48	44	42
			1.5	82	64	54	49	45
			2.5	85	65	54	48	44
			5.0	84	62	50	44	40
			10.0	74	53	42	36	32
	0.010	1	0.5	66	54	47	44	42
			1.5	81	64	53	48	45
			2.5	85	65	53	48	44
			5.0	84	63	50	44	40
			10.0	75	53	41	36	32
		1/4	0.5	43	34	30	28	27
			1.5	52	40	33	30	28
			2.5	53	41	33	30	27
			5.0	52	38	30	26	24
			10.0	44	32	25	21	19

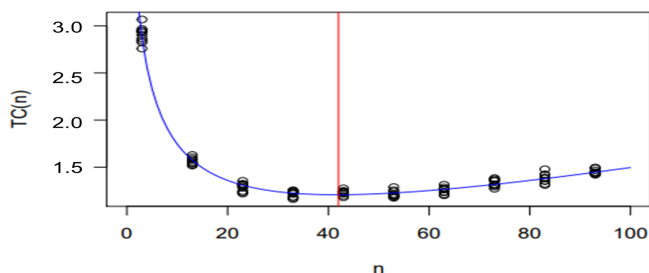


Figura 1: Gráfico de pontos  $(n, TC(n))$  com a curva dos MQ ajustada e  $n$  mínimo assinalado.

de valores diminutos (Phadia, 2016, p.22). Quando há informação a priori sobre algum funcional de interesse, Walker and Malick (1997) propõem uma estimativa para  $\alpha$  calculável de distribuições de funcionais. Deste modo, a via a seguir depende da experiência acumulada de quem faz a inspeção das amostras e a análise estatística. Num problema de delineamento amostral como este, será sensato considerar vários valores de alfa e comparar os resultados para depois se avançar com a determinação das concentrações de organismos e a decorrente análise rumo ao objetivo pretendido.

Os resultados da Tabela 1 mostram que o tamanho amostral  $n_o$  é influenciado com a variação de  $\theta_0$  para  $\alpha$  fixo e também com a de  $\alpha$  para  $\theta_0$  fixo. Nesta última situação,  $n_o$  aumenta até um determinado valor de  $\alpha$ , passando então a diminuir.

O efeito do volume das alíquotas não afeta consideravelmente a magnitude de  $n_o$  para todas as restantes quantidades fixadas, o que sugere usar volumes que impliquem uma redução do custo de amostragem. Por outro lado,  $n_o$  parece diminuir com o aumento do custo unitário  $c$ .

Para ilustração do procedimento considera-se um cenário de um tanque vertical com três estratos de água como descrito na Figura 2 de Murphy *et al.* [9] e um quadro pouco informativo com  $\lambda_0 = 10$  e  $\theta_0 = 1$ , implicando uma variância de 100 para a distribuição-base do processo *a priori*,  $F_0$ . Fixa-se ainda  $w = 1$ ,  $c = 0.01$ ,  $\gamma = 1/4$  and  $\alpha = 3/2$ . De acordo com a Tabela 1, devem ser coletadas 52 alíquotas de 1mL, que se repartem pelos três estratos em 18, 17 e 17 partes.

Para a geração de contagens abrangem-se dois cenários de concentrações esperadas que se pretendem sugestivos de uma real concentração média superior e inferior ao limite 10 da norma internacional considerada. O cenário 1 estabelece para os três estratos (de cima para baixo) os valores de 20, 15 e 8, com média global de  $14.33 > 10$ , enquanto o cenário 2 considera os valores 12, 7, and 4, cuja média perfaz  $7.67 < 10$ . Usando três distribuições gama com as médias dadas pelos valores mencionados acima e um parâmetro de forma igual a 100 geram-se concentrações esperadas para cada cenário, das quais se simulam contagens de organismos poissonianas que se exibem na Tabela 2.

Tabela 2: Contagens simuladas de modelos Poi em dois cenários com médias geradas de distintas distribuições gama

Caso	Contagens																	
1	14	9	25	8	25	32	20	18	23	19	16	16	22	21	26	13	18	21
	17	16	7	13	10	15	11	12	11	10	13	19	14	14	18	17	19	
	10	10	7	8	7	13	6	6	15	9	9	4	7	6	9	7	6	
2	7	14	5	13	20	14	11	14	12	8	11	15	10	16	17	10	10	12
	9	8	8	10	3	5	8	5	7	10	4	8	8	8	6	5	5	
	3	3	9	3	5	4	2	5	8	3	9	6	2	4	6	3	3	

Para cada cenário geraram-se 1000 valores da distribuição da média aleatória *a posteriori*  $\bar{\lambda}^{(52)}$ , e deles calculam-se os limites dos intervalos de credibilidade Bayes relativos à função perda considerada com  $\gamma = 1/4$ . Os histogramas dos valores simulados apresentam-se na Figura 2. Os intervalos obtidos são [12.10, 15.38] e [6.90, 9.16]

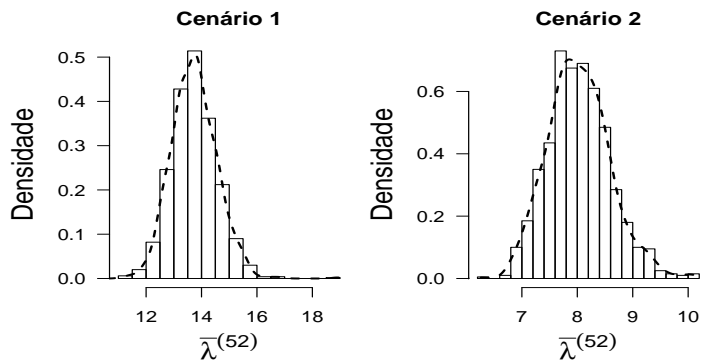


Figura 2: Histograma dos valores simulados de  $\bar{\lambda}^{(52)}$  para cada cenário.

para os cenários 1 e 2, respetivamente. Segundo a regra de decisão definida relativamente à norma D-2 da IMO considerada na Secção 1, as amostras que se simularam indiciam que a água do navio está em conformidade (desconformidade) com tal norma no cenário 2 (1).

## Agradecimentos

Este trabalho recebeu financiamento da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq, processos 153526/2014-9 e 304841/2019-6), Brasil. Este trabalho também foi parcialmente financiado pelo projeto FCT UIDB/00006/2020, Portugal.

## Referências

- [1] Blackwell, D., MacQueen, J. B. (1973). Ferguson distributions via Pólya urn schemes. *The Annals of Statistics* 1, 353–355.
- [2] Cifarelli, D. M., Regazzini, E. (1990). Distribution functions of means of a Dirichlet process. *The Annals of Statistics* 18, 429–442. Correction in *The Annals of Statistics* 22, 1633–1634.
- [3] Costa, E. G., Paulino, C. D., Singer, J. M. (2020). Sample size for estimating organism concentration in ballast water: a Bayesian approach. To appear in *Brazilian Journal of Probability and Statistics*.
- [4] Escobar, M. D., West, M. (1998). Computing nonparametric hierarchical models. In D. Dey, P. Muller, D. Sinha (eds): *Practical nonparametric and semiparametric Bayesian statistics*, chap.1. New York: Springer, pp. 1–22.
- [5] Ferguson, T. S. (1973). A Bayesian analysis of some nonparametric problems. *The Annals of Statistics* 1, 209–230.
- [6] Guglielmi, A., Holmes, C. C., Walker, S. G. (2002). Perfect simulation involving functionals of a Dirichlet process. *Journal of Computational and Graphical Statistics* 11, 306–310.
- [7] Hjort, N. L., Ongaro, A. (2005). Exact inference for random Dirichlet means. *Statistical Inference for Stochastic Processes* 8, 227–254.
- [8] Müller, P., Quintana, F.A., Jara, A., Hanson, T. (2015). *Bayesian nonparametric data analysis*. Springer.
- [9] Murphy, K. R., Ritz, D., Hewitt, C. L. (2002). Heterogeneous zooplankton distribution in a ship's ballast tanks. *Journal of Plankton Research* 24, 729–734.
- [10] Phadia, E. G. (2016). *Prior processes and their applications*, 2nd ed.. Springer.
- [11] Regazzini, E., Guglielmi, A., Nunno, G. D. (2002). Theory and numerical analysis for exact distributions of functionals of a Dirichlet process. *The Annals of Statistics* 30, 1376–1411.
- [12] Walker, S. G., Mallick, B. K. (1997). A note on the scale parameter of the Dirichlet process. *The Canadian Journal of Statistics* 25, 473–479.

# Propriedade de Taylor e curtose em modelos CP-INARCH(1)

Esmeralda Gonçalves

Universidade de Coimbra, Departamento de Matemática da Univ. Coimbra (DM-FCTUC) e Centro de Matemática da Univ. Coimbra (CMUC), *esmerald@mat.uc.pt*

Cristina Martins

Universidade de Coimbra, Departamento de Matemática da Univ. Coimbra (DM-FCTUC), *cmtm@mat.uc.pt*

Nazaré Mendes-Lopes

Universidade de Coimbra, Departamento de Matemática da Univ. Coimbra (DM-FCTUC) e Centro de Matemática da Univ. Coimbra (CMUC), *nazare@mat.uc.pt*

**Palavras-chave:** Modelos CP-INARCH; Curtose; Propriedade de Taylor

**Resumo:** Neste trabalho estuda-se a ocorrência da propriedade de Taylor numa classe de modelos GARCH de valores inteiros não negativos com lei condicional de Poisson composta, CP-INGARCH, obtendo-se uma condição necessária e suficiente para que tais modelos possuam a referida propriedade. A presença da propriedade de Taylor é analisada em modelos CP-INGARCH(1) considerando algumas distribuições de Poisson compostas particulares e é relacionada a intensidade da presença desta propriedade com a curtose do processo. É ainda apresentada uma série observada de valores inteiros, com efeito de Taylor, bem ajustada por um modelo CP-INARCH.

# 1 Introdução

A *propriedade de Taylor* corresponde à contrapartida teórica do *efeito de Taylor* [11], característica empírica observada por este autor em várias séries financeiras, que se refere ao facto de as autocorrelações das observações em valor absoluto serem superiores às autocorrelações de mesma ordem das observações ao quadrado. O efeito de Taylor tem sido observado em séries temporais de natureza diversa, pelo que é de todo o interesse encontrar condições mediante as quais a propriedade de Taylor seja válida nas diferentes classes de modelos de séries temporais.

Para cada  $h \in \mathbb{Z}$  tal que  $\rho_{|X|}(h)$  e  $\rho_{X^2}(h)$  são estritamente positivas, a propriedade de Taylor de ordem  $h$  é expressa pela condição

$$\rho_{|X|}(h) > \rho_{X^2}(h).$$

Esta propriedade começou por ser analisada em modelos condicionalmente heteroscedásticos, sendo de referir neste âmbito os trabalhos de He e Teräsvirta [8], Gonçalves, Leite e Mendes-Lopes [2] e Haas [7]. Os resultados obtidos nestes trabalhos revelam uma forte relação entre a presença desta propriedade e valores elevados da curtose do modelo, o que reforça o interesse de alargar tal estudo a outras classes de modelos de séries temporais.

Neste sentido, Gonçalves, Martins e Mendes-Lopes [3], [4], [5] investigaram a presença da propriedade em modelos bilineares e ainda em subclasses da família dos modelos ARMA de valores não negativos. Constatou-se também nestes estudos a relevância da leptocurtose do modelo na presença da referida propriedade.

A presença da propriedade de Taylor foi também analisada em modelos bilineares periódicos para séries temporais por Bibi e Ghezel [1] e em modelos bilineares em tempo contínuo por Merahi e Bibi [9]. Recentemente observou-se a presença do efeito do Taylor em várias séries observadas de valores inteiros não negativos, tornando-se assim relevante desenvolver estudos teóricos que permitam avaliar da compatibilidade de modelos de séries temporais de valores inteiros com tal facto estilizado.



Assim, apresentamos neste trabalho um tal estudo na classe dos modelos CP-INGARCH, isto é, dos processos GARCH de valores inteiros com lei condicional de Poisson composta, introduzidos em 2015 por Gonçalves, Mendes-Lopes e Silva [6]. Concretamente, avaliamos a presença da propriedade de Taylor numa subfamília destes modelos, a dos CP-INARCH(1), isto é, dos processos CP-INARCH com ordem de atrasos igual 1 na equação de evolução associada, procurando identificar as características de tais processos que determinam a sua presença. É, em particular, analisada a relação entre a ocorrência daquela propriedade e a curtose do processo CP-INARCH(1) considerando modelos específicos desta família pela escolha de leis condicionais particulares, nomeadamente a Poisson, a Poisson generalizada e a Neyman type A. Recorremos neste estudo a resultados, obtidos por Silva [10], sobre momentos de ordens elevadas do processo CP-INARCH(1).

O interesse prático deste estudo é ilustrado exibindo uma série observada de valores inteiros, bem ajustada por um modelo CP-INARCH, que apresenta efeito de Taylor.

## 2 Modelo CP-INARCH(1) e propriedade de Taylor

Seja  $X = (X_t, t \in \mathbb{Z})$  uma série temporal de valores inteiros não negativos verificando um modelo INARCH(1) de lei condicional de Poisson composta cuja função característica é dada por

$$\phi_{X_t|X_{t-1}}(u) = \exp \left\{ i \frac{\lambda_t}{\varphi'(0)} [\varphi(u) - 1] \right\}, \quad u \in \mathbb{R}, \quad (1)$$

com  $\lambda_t = E(X_t|X_{t-1}) = \alpha_0 + \alpha_1 X_{t-1}$ , para constantes  $\alpha_0$  e  $\alpha_1$  tais que  $\alpha_0 > 0$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$ , e onde  $\varphi$  é uma função característica sobre  $\mathbb{R}$ , associada a uma lei discreta com suporte em  $\mathbb{N}_0$  e média finita, com derivadas até à ordem 4 no ponto zero. Na expressão (1),  $i$  representa a unidade imaginária.

Notamos que  $\varphi$  é a distribuição de composição e caracteriza a lei de Poisson composta.

As condições impostas asseguram a estacionaridade forte e fraca do processo CP-INARCH(1).

Sendo este processo não negativo, a propriedade de Taylor de ordem  $h$ ,  $h \geq 1$ , traduz-se por

$$\rho_X(h) > \rho_{X^2}(h).$$

Usando resultados presentes em [10] (Corolário 3.2 e Secção 4.1), conclui-se que, para  $h \geq 1$ ,  $\rho_X(h) = \alpha_1^h > 0$  e que  $\rho_{X^2}(h)$  é função de

$$\alpha_0, \alpha_1, \nu_0 = -i \frac{\varphi''(0)}{\varphi'(0)}, d_0 = -\frac{\varphi'''(0)}{\varphi'(0)} \text{ e } c_0 = i \frac{\varphi^{iv}(0)}{\varphi'(0)}.$$

A propriedade de Taylor de ordem  $h$  pode então traduzir-se por

$$T(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0, h) = \alpha_1^h - \rho_{X^2}(h) > 0, \quad (2)$$

constatando-se que

$$T(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0, h) = \alpha_1^h (1 - \alpha_1^h) \frac{N(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0)}{D(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0)}, \quad (3)$$

onde  $N$  e  $D$  são funções polinomiais dos parâmetros indicados, independentes de  $h$ , e  $D(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0) > 0$ . A positividade de  $D$  é verificada em anexo. Quanto à função polinomial  $N$ , tem-se

$$N(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0) = (1 - \alpha_1^2 - \alpha_1^3 + \alpha_1^5) c_0 - 2\alpha_0 (1 + \alpha_1^2) f(\alpha_1, d_0, \nu_0) + \nu_0 g(\alpha_1, d_0, \nu_0), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{com } f(\alpha_1, d_0, \nu_0) &= (-1 + \alpha_1)(1 + \alpha_1)^2 d_0 + \alpha_1(1 - 2\alpha_1 - 2\alpha_1^2) \nu_0^2 \\ \text{e } g(\alpha_1, d_0, \nu_0) &= (-1 - \alpha_1 + 4\alpha_1^2 + 6\alpha_1^3 + \alpha_1^4 - 9\alpha_1^5) d_0 + \\ &\quad + 3\alpha_1^3 (-1 - \alpha_1 + 4\alpha_1^2) \nu_0^2. \end{aligned}$$

Como  $\alpha_1^h (1 - \alpha_1^h) > 0$ , e tendo em conta (2) e (3), obtém-se uma condição necessária e suficiente para a presença da propriedade de Taylor de qualquer ordem  $h$  no processo CP-INARCH(1), a qual é estabelecida no teorema que se segue.

**Teorema 2.1** *Uma condição necessária e suficiente para que a propriedade de Taylor ocorra no processo CP-INARCH(1), para qualquer ordem  $h$ , é*

$$N(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0) > 0,$$

sendo  $N$  a função polinomial definida por (4).

### 3 Propriedade de Taylor e curtose

Nesta secção analisa-se a presença da propriedade de Taylor no processo CP-INARCH(1), bem como a intensidade dessa presença e a sua relação com a curtose do processo, considerando algumas distribuições de Poisson compostas particulares.

O excesso de curtose do processo CP-INARCH(1) foi obtido em [10] (Secção 4.1) e é dado por

$$K_X = \frac{c_0(1 - \alpha_1^2)(1 - \alpha_1^3) + \nu_0^3(3\alpha_1^2 + 15\alpha_1^5) + 2\nu_0 d_0 \alpha_1^2(2 + 3\alpha_1 - 5\alpha_1^3)}{\alpha_0(1 + \alpha_1 + \alpha_1^2)(1 + \alpha_1^2)\nu_0^2}.$$

Tendo em conta que  $2 + 3\alpha_1 - 5\alpha_1^3 = 2(1 - \alpha_1^3) + 3\alpha_1(1 - \alpha_1^2)$ , conclui-se que  $K_X > 0$ , ou seja, o processo CP-INARCH(1) é leptocúrtico.

Como foi referido, analisam-se a seguir alguns exemplos de processos CP-INARCH(1), nomeadamente os processos INARCH(1), GP-INARCH(1) e NTA-INARCH(1). Já vimos que  $\rho_X(h) > 0$ , para qualquer processo CP-INARCH(1) e, além disso, em todos os casos analisados verificou-se que  $\rho_{X^2}(h) > 0$ ,  $h \geq 1$ .

#### 3.1 Processo INARCH(1)

O processo INARCH(1) tem como lei condicional uma lei de Poisson, resultando do modelo (1) no caso em que distribuição de composição é a lei de Dirac no ponto 1. Tem-se então  $\nu_0 = d_0 = c_0 = 1$ , pelo que  $T(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0, h) = T(\alpha_0, \alpha_1, h)$ . A condição necessária e

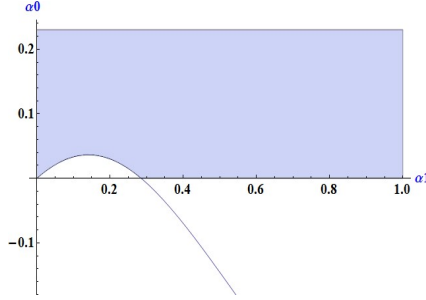


Figura 1: Parametrizações  $(\alpha_0, \alpha_1)$  que asseguram a propriedade de Taylor no processo INARCH(1)

suficiente da presença da propriedade de Taylor neste processo é equivalente a

$$\alpha_0 > -\frac{\alpha_1}{2} \frac{-1 + 3\alpha_1 + 2\alpha_1^2 - 2\alpha_1^3 + 4\alpha_1^4}{1 + 2\alpha_1^2 + \alpha_1^3 + \alpha_1^4 + \alpha_1^5}.$$

Assim, o conjunto das parametrizações  $(\alpha_1, \alpha_0)$  que asseguram a presença da propriedade de Taylor no processo INARCH(1) para qualquer ordem  $h$  corresponde à região do primeiro quadrante restrita a  $0 < \alpha_1 < 1$  e situada acima da curva  $\alpha_0 = -\frac{\alpha_1}{2} \frac{-1 + 3\alpha_1 + 2\alpha_1^2 - 2\alpha_1^3 + 4\alpha_1^4}{1 + 2\alpha_1^2 + \alpha_1^3 + \alpha_1^4 + \alpha_1^5}$ , como se ilustra na Figura 1.

Na Figura 2 apresentam-se os gráficos de  $K_X(\alpha_0, \alpha_1)$  e de  $T(\alpha_0, \alpha_1, h)$ , para  $h = 1$ . Observa-se que, quando a propriedade de Taylor está presente, esta presença é mais forte para valores de  $\alpha_0$  próximos de zero, atenuando-se com o aumento de  $\alpha_0$ . Verifica-se que há parametrizações que não permitem a ocorrência da propriedade, mas o afastamento dessa ocorrência é muito pequeno ( $T$  é negativo, mas próximo de zero). Por outro lado, de um modo geral, a presença

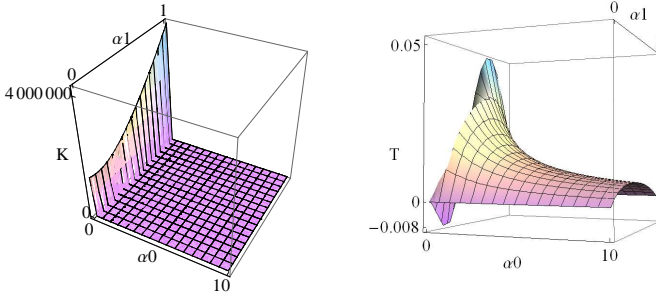


Figura 2: Gráficos de  $K = K_X(\alpha_0, \alpha_1)$  (esq.) e de  $T = T(\alpha_0, \alpha_1)$  (dir.) para o processo INARCH(1)

da propriedade de Taylor é tanto mais acentuada quanto maior é a curtose de  $X$ . Foram analisados outros valores de  $h$ , tendo-se obtido conclusões análogas tanto no que diz respeito à intensidade da presença da propriedade de Taylor como no que diz respeito à relação entre essa intensidade e a curtose do processo.

### 3.2 Processo GP-INARCH(1)

Quando se considera a lei de Borel de parâmetro  $\kappa$ ,  $0 < \kappa < 1$ , como distribuição de composição do modelo (1), obtém-se o processo GP-INARCH(1), cuja lei condicional é uma lei de Poisson generalizada. Neste caso, tem-se  $\nu_0 = \frac{1}{(1-\kappa)^2}$ ,  $d_0 = \frac{2\kappa+1}{(1-\kappa)^4}$  e  $c_0 = \frac{6\kappa^2+8\kappa+1}{(1-\kappa)^6}$ , pelo que  $T(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0, h) = T(\alpha_0, \alpha_1, \kappa, h)$ . Assim, a condição necessária e suficiente presente no Teorema 2.1 depende de  $\alpha_0$  e  $\alpha_1$ , e também de  $\kappa$ . Foram analisados os casos  $\kappa = 0.1$ ,  $\kappa = 0.5$  e  $\kappa = 0.9$  e, para cada um deles, analisou-se a presença da propriedade de Taylor de ordens 1 e 10, para as parametrizações  $(\alpha_0, \alpha_1)$  tais que  $0 < \alpha_0 < 10$  e  $0 < \alpha_1 < 1$ . Constatou-se que a propriedade de Taylor está presente em todos os casos analisados. Esta presença é mais

forte para valores de  $\alpha_0$  próximos de zero e atenua-se com o aumento de  $\alpha_0$ . Mais uma vez, de um modo geral, a presença da propriedade de Taylor é tanto mais acentuada quanto maior é a curtose de  $X$ . Estes comportamentos são semelhantes aos do modelo INARCH(1), quando a propriedade de Taylor está presente neste modelo, mas há casos do modelo GP-INARCH(1) em que a propriedade surge de modo mais acentuado (por exemplo, para  $\kappa = 0.9$  e  $h = 1$ , o valor máximo de  $T$  é próximo de 0.15, enquanto no caso anterior tal valor máximo é próximo de 0.05).

Com o objetivo de comparar a curtose e a presença da propriedade de Taylor de ordem 1 nos casos  $\kappa = 0.1$  e  $\kappa = 0.9$ , apresenta-se, na Figura 3, o gráfico da diferença  $K_X(\alpha_0, \alpha_1, 0.9) - K_X(\alpha_0, \alpha_1, 0.1)$ ,  $0 < \alpha_0 < 10$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$ , bem como o gráfico da diferença  $T(\alpha_0, \alpha_1, 0.9, 1) - T(\alpha_0, \alpha_1, 0.1, 1)$ ,  $0 < \alpha_0 < 100$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$ . Podemos observar que ambas as diferenças são positivas o que significa que a presença da propriedade de Taylor de ordem 1 é mais forte no modelo com maior curtose.

Foram considerados outros valores de  $h$  na diferença  $T(\alpha_0, \alpha_1, 0.9, h) - T(\alpha_0, \alpha_1, 0.1, h)$ , concretamente  $h = 2, 3, 4, 10$ , tendo sido obtidos resultados do mesmo tipo.

### 3.3 Processo NTA-INARCH(1)

No caso em que a distribuição de composição do modelo (1) é a lei de Poisson de parâmetro  $\lambda$ ,  $\lambda > 0$ , obtém-se um processo com lei condicional Neyman type A, NTA-INARCH(1). Tem-se  $\nu_0 = \lambda + 1$ ,  $d_0 = \lambda^2 + 3\lambda + 1$  e  $c_0 = \lambda^3 + 6\lambda^2 + 7\lambda + 1$ , pelo que  $T$  é função de  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\lambda$  e  $h$ . A condição necessária e suficiente estabelecida no Teorema 2.1 depende de  $\alpha_0$  e  $\alpha_1$ , e também de  $\lambda$ . Para  $\lambda = 1, 2, 3$ , constatou-se analiticamente que esta condição é verificada para todas as parametrizações  $(\alpha_0, \alpha_1)$  admissíveis. Este facto foi observado graficamente para outros valores particulares de  $\lambda$ . No entanto, existem valores de  $\lambda$  para os quais a condição necessária e suficiente não é verificada para algumas parametrizações (como exemplo, refira-se  $\lambda = 35$  e  $(\alpha_0, \alpha_1) = (0.1, 0.2)$ ).

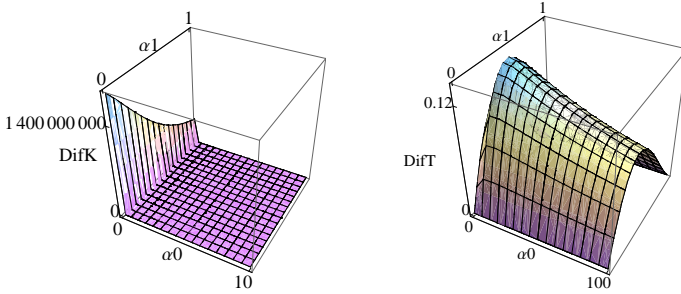


Figura 3: Gráfico de  $K_X(\alpha_0, \alpha_1, 0.9) - K_X(\alpha_0, \alpha_1, 0.1)$ ,  $0 < \alpha_0 < 10$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$  (esq.) e gráfico de  $T(\alpha_0, \alpha_1, 0.9, 1) - T(\alpha_0, \alpha_1, 0.1, 1)$ ,  $0 < \alpha_0 < 100$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$  (dir.) para o processo GP-INARCH(1)

Como em todos os casos anteriormente analisados em que a propriedade de Taylor está presente, esta presença é mais acentuada para valores de  $\alpha_0$  próximos de zero, atenuando-se com o aumento deste parâmetro.

Relativamente à relação entre a intensidade da ocorrência da propriedade de Taylor e a curtose do processo, foram analisados os casos  $\lambda = 1, 2, 3$ , tendo sido observados comportamentos semelhantes aos dos modelos anteriores.

Foram comparados, dois a dois, modelos NTA-INARCH(1) que diferem no parâmetro da distribuição de composição, analisando, para alguns casos de  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ , com  $\lambda_2 > \lambda_1$ , diferenças do tipo  $K_X(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_2) - K_X(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_1)$  bem como as correspondentes diferenças  $T(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_2, h) - T(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_1, h)$ , para  $h = 1$ .

Os gráficos obtidos para  $K_X(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_2) - K_X(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_1)$  sugerem que  $K_X(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_2) > K_X(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_1)$ . Relativamente à diferença  $T(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_2, 1) - T(\alpha_0, \alpha_1, \lambda_1, 1)$ , há casos em que o processo de maior curtose apresenta propriedade de Taylor de ordem 1 com maior intensidade, isto é, a diferença anterior é positiva, mas também há casos com parametrizações  $(\alpha_0, \alpha_1)$  para os quais esta diferença é

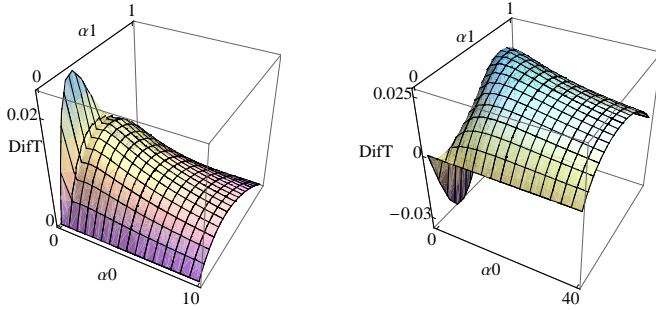


Figura 4: Gráfico de  $T(\alpha_0, \alpha_1, 0.9, 1) - T(\alpha_0, \alpha_1, 0.1, 1)$ ,  $0 < \alpha_0 < 10$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$  (esq.) e gráfico de  $T(\alpha_0, \alpha_1, 15, 1) - T(\alpha_0, \alpha_1, 0.9, 1)$ ,  $0 < \alpha_0 < 40$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$  (dir.) para o processo NTA-INARCH(1)

negativa, ou seja, nem sempre o processo de maior curtose apresenta a propriedade de Taylor com maior intensidade. Tais diferenças negativas ocorrem para valores de  $\alpha_0$  próximos de zero. Estes factos são ilustrados na Figura 4 com os casos  $(\lambda_1, \lambda_2) = (0.1, 0.9)$  e  $(\lambda_1, \lambda_2) = (0.9, 15)$ , respetivamente.

## 4 Aplicação

A procura do modelo que melhor reproduz a dinâmica temporal de uma série temporal observada é guiada pelos factos empíricos (tendência, sazonalidade, comportamento de autocorrelações, propriedade de Taylor, ...) que ela exhibe, sendo natural procurá-lo numa classe alargada de modelos estocásticos exibindo as correspondentes contrapartidas teóricas. Assim, ilustramos nesta secção o interesse prático do estudo desenvolvido considerando um exemplo de uma série real de valores inteiros não negativos que apresenta efeito de Taylor e que é bem ajustada por um modelo INARCH(1) o qual, como esperado, verifica a propriedade de Taylor. Trata-se da série do nú-



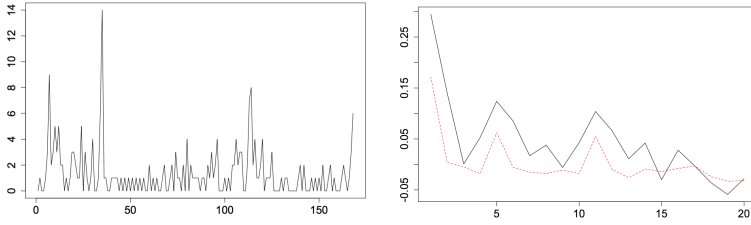


Figura 5: Trajetória e autocorrelações empíricas  $\hat{\rho}_X(h)$  (a cheio) e  $\hat{\rho}_X^2(h)$  (a tracejado),  $h = 1, 2, \dots, 20$ , da série do número de casos mensais de poliomielite nos EUA, de 1970 a 1983

mero de casos mensais de poliomielite nos EUA, de janeiro de 1970 a dezembro de 1983, descrita em [12]. Na Figura 5, apresentam-se a trajetória desta série e um gráfico com os valores das autocorrelações empíricas das séries  $\hat{\rho}_X(h)$  e  $\hat{\rho}_X^2(h)$ ,  $h = 1, \dots, 20$ . Constata-se a presença do efeito de Taylor na maioria das ordens consideradas, pois  $\hat{\rho}_X(h) > \hat{\rho}_X^2(h)$ ,  $h = 1, 2, \dots, 14, 16$ .

O ajustamento de um modelo INARCH(1) à série da poliomielite forneceu as estimativas  $\hat{\alpha}_0 = 0.864055$  e  $\hat{\alpha}_1 = 0.364986$ . Para estes valores de  $\hat{\alpha}_0$  e  $\hat{\alpha}_1$ , tem-se  $\rho_X(h) > 0$  e  $\rho_X^2(h) > 0$ ,  $h \geq 1$ . De acordo com a Figura 1, a propriedade de Taylor ocorre no modelo ajustado para qualquer ordem  $h$ .

Na Figura 6 estão presentes as autocorrelações e as autocorrelações parciais dos resíduos da estimação, comprovando a qualidade do ajustamento.

## 5 Conclusão

O estudo efetuado mostra que a presença da propriedade de Taylor no processo CP-INARCH(1) é independente da ordem  $h$ , dependendo apenas da parametrização  $(\alpha_0, \alpha_1)$  e dos parâmetros da distribuição de composição. Na maioria das parametrizações con-

Sample: 1970M01 1983M11  
Included observations: 166

Autocorrelation	Partial Correlation	AC	PAC	Q-Stat	Prob
		1 -0.019	-0.019	0.0613	0.804
		2 0.096	0.095	1.6143	0.446
		3 -0.097	-0.095	3.2408	0.356
		4 0.073	0.062	4.1525	0.386
		5 0.056	0.077	4.7027	0.453
		6 0.098	0.079	6.3716	0.383
		7 -0.026	-0.024	6.4877	0.484
		8 0.056	0.050	7.0463	0.532
		9 -0.044	-0.031	7.3849	0.597
		10 0.051	0.022	7.8545	0.643
		11 0.093	0.105	9.4213	0.583
		12 0.052	0.032	9.9124	0.624
		13 -0.009	-0.018	9.9270	0.700
		14 0.044	0.050	10.282	0.741
		15 -0.068	-0.068	11.128	0.743
		16 0.042	0.001	11.452	0.781
		17 0.028	0.038	11.596	0.824
		18 -0.031	-0.061	11.772	0.859
		19 -0.050	-0.058	12.243	0.875
		20 0.013	0.031	12.273	0.906

Figura 6: Autocorrelações e autocorrelações parciais dos resíduos do ajustamento de um modelo INARCH(1) à série do número de casos mensais de poliomielite nos EUA

sideradas, há ocorrência da propriedade de Taylor, notando-se que, quando não ocorre, o parâmetro  $\alpha_0$  assume valores próximos de zero.

Relativamente à intensidade da ocorrência da propriedade de Taylor e sua relação com a curtose do processo, observa-se que, de um modo geral, e tal como acontece noutros modelos de valores não inteiros estudados, o aumento da curtose do processo acentua a presença da propriedade. Quando isso não acontece, mais uma vez o parâmetro  $\alpha_0$  assume valores próximos de zero. Observa-se ainda que a presença da propriedade de Taylor é atenuada com o aumento de  $\alpha_0$ .

## 6 Anexo - Função $D$ presente em (3)

A função  $D(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0)$  que surge na definição da função  $T$  em (3) é definida pela expressão seguinte:

$$\begin{aligned} & (1 - \alpha_1^2 - \alpha_1^3 + \alpha_1^5) c_0 + 4\alpha_0^2 (1 + 2\alpha_1 + 3\alpha_1^2 + 3\alpha_1^3 + 2\alpha_1^4 + \alpha_1^5) \nu_0 \\ & + \nu_0 \alpha_1^2 [2d_0 (2 + 3\alpha_1 - 5\alpha_1^3) + 3(1 + 5\alpha_1^3) \nu_0^2] \\ & + 2\alpha_0 (1 + \alpha_1^2) [2(1 - \alpha_1)(1 + \alpha_1)^2 d_0 + (1 + \alpha_1 + 7\alpha_1^2 + 6\alpha_1^3) \nu_0^2]. \end{aligned}$$

Atendendo a que  $0 < \alpha_1 < 1$  tem-se

$$1 - \alpha_1^2 - \alpha_1^3 + \alpha_1^5 = 1 - \alpha_1^2 - \alpha_1^3 (1 - \alpha_1^2) = (1 - \alpha_1^2) (1 - \alpha_1^3) > 0$$

e

$$2 + 3\alpha_1 - 5\alpha_1^3 = 2 - 2\alpha_1^3 + 3\alpha_1 - 3\alpha_1^3 = 2(1 - \alpha_1^3) + 3\alpha_1(1 - \alpha_1^2) > 0,$$

pelo que  $D(\alpha_0, \alpha_1, \nu_0, d_0, c_0) > 0$ .

## Agradecimentos

Este trabalho foi parcialmente apoiado pelo Centro de Matemática da Universidade de Coimbra - UIDB/00324/2020, com fundos do Governo Português via FCT/MCTES.

## Referências

- [1] Bibi, A., Ghezel, A. (2016). On periodic time-varying bilinear processes: structure and asymptotic inference. *Stat Methods Appl*, 25, 395–420.
- [2] Gonçalves, E., Leite, J., Mendes-Lopes, N. (2009). A mathematical approach to detect the Taylor property in TARCH processes. *Stat. Prob. Lett.*, 79, 5, 602–610.
- [3] Gonçalves, E., Martins, C.M., Mendes-Lopes, N. (2014). Propriedade de Taylor em processos autorregressivos. In Pereira, I., Freitas, A.,

- Scotto, M., Silva, M.E., Paulino, C.D. (eds.): *Estatística: A ciência da incerteza, Atas do XXI Congresso Anual da Sociedade Portuguesa de Estatística* 51–63, Edições SPE.
- [4] Gonçalves, E., Martins, C.M., Mendes-Lopes, N. (2015). The Taylor property in bilinear models. *RevStat - Statistical Journal* 13, 3, 207–226.
- [5] Gonçalves, E., Martins, C.M., Mendes-Lopes, N. (2020). Propriedade de Taylor e curtose em modelos MA. In Salgueiro, M.F., Vicente, P., Calapez, T., Marques, C., Silva, M.E. (eds.): *Atas do XXIII Congresso da Sociedade Portuguesa de Estatística* 105–116, Edições SPE.
- [6] Gonçalves, E., Mendes-Lopes, N., Silva, F. (2015). Infinitely divisible distributions in integer-valued GARCH models. *J. Time Ser. Anal.* 36, 503–527.
- [7] Haas, M. (2009). Persistence in volatility, conditional kurtosis, and the Taylor property in absolute value GARCH processes. *Statist. Probab. Lett.* 79, 5, 1674–1683.
- [8] He, C., Teräsvirta, H. (1999). Properties of moments of a family of GARCH processes. *J. Econom.* 92, 173–192.
- [9] Merahi, F., Bibi, A. (2020). Evolutionary transfer functions solution for continuous-time bilinear stochastic processes with time-varying coefficients. *Communications in Statistics - Theory and Methods* DOI: 10.1080/03610926.2020.1726390
- [10] Silva, F. (2016). *Compound Poisson integer-valued GARCH processes*. Tese de Doutoramento, Univ. Coimbra.
- [11] Taylor, S. (1986). *Modelling Financial Time Series*. Wiley.
- [12] Zeger, S.A. (1988). Regression model for time series of counts. *Biometrika* 75, 4, 621–629.

# Análise de filas $M^X/M/1/n$ com bloqueio

Fátima Ferreira

Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, UTAD, Departamento de Matemática e CEMAT, *mmferrei@utad.pt*

António Pacheco

Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, Departamento de Matemática e CEMAT, *apacheco@math.tecnico.ulisboa.pt*

Helena Ribeiro

Escola Superior de Tecnologia e Gestão do Instituto Politécnico de Leiria e CEMAT, *helenaribeiro@ipleiria.pt*

**Palavras-chave:** Filas de espera; Períodos de ocupação contínua; Clientes servidos; Clientes bloqueados

**Resumo:** Neste trabalho estudam-se filas de espera  $M^X/M/1/n$  com bloqueio, com mecanismo de entrada de clientes estocástico e modulado pelo estado do sistema nos instantes de chegada. Generalizando os resultados de *Ferreira, Pacheco e Ribeiro* [3] para filas  $M/M/1/n$  com bloqueio, caracteriza-se a distribuição de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos, em períodos de ocupação contínua iniciados com múltiplos clientes no sistema. Em particular, deriva-se um método recursivo para o cálculo da respetiva função geradora de probabilidades exprimindo-a em termos da função geradora de probabilidades conjunta em períodos de ocupação contínua. Os resultados obtidos são ilustrados para diferentes políticas de bloqueio de clientes.

## 1 Introdução

Neste trabalho analisamos sistemas  $M^X/M/1/n$  com bloqueio, ou seja, filas de espera markovianas com chegadas em grupo, serviços

exponenciais, um único servidor, capacidade finita e bloqueio estocástico de clientes à chegada dos mesmos ao sistema.

Referências explícitas a trabalhos em filas de espera com chegadas em grupo surgiram apenas no final da década de 50 [4]. Atualmente, existe vasta literatura relativa a filas de espera com chegadas em grupo. Em Chaudhry e Templeton [2] encontram-se apresentados os resultados mais relevantes anteriores a 1983. Com origem no trabalho de Haight [6], o estudo de filas com bloqueio (*balking* e *reversed balking*) tem despertado o interesse de diversos autores (*c.f.* [7], [9], [1] e [5] e suas referências). Estas filas de espera com bloqueio possuem muitas aplicações porque é frequente os clientes terem a possibilidade de postergar ou desistir de um dado tipo de serviço quando, à chegada ao sistema, o nível de congestionamento do servidor é considerado insatisfatório por parte dos mesmos clientes.

A análise de filas de espera com bloqueio de clientes em períodos de ocupação contínua, i.e., em períodos contínuos de utilização efetiva do servidor, é relevante do ponto de vista do operador e fornece informação crucial para a sua gestão. Consideram-se neste estudo períodos de ocupação contínua iniciados com múltiplos clientes no sistema. Em particular, um  $i$ -período de ocupação contínua ( $i$ -p.o.c.) representa um período que se inicia com  $i$  clientes no sistema, com um cliente a iniciar serviço nesse instante, e termina no instante subsequente em que o sistema fica vazio.

Este trabalho visa calcular a distribuição de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua de sistemas  $M^X/M/1/n$  com bloqueio, generalizando os resultados obtidos pelos autores [3] para sistemas  $M/M/1/n$  com bloqueio.

Na Secção 2, apresenta-se uma breve descrição do sistema e caracteriza-se o seu estado (número de clientes no sistema) em tempo contínuo e a matriz de probabilidades de transição da cadeia de Markov em tempo discreto, embebida nos instantes de chegadas e saídas de clientes.

Tirando partido da estrutura markoviana de filas  $M^X/M/1/n$  com

bloqueio obtém-se, na Secção 3, a função geradora de probabilidades e a respetiva função de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua nestes sistemas. Na Secção 4 ilustram-se os resultados obtidos e, finalmente, na Secção 5 apresentam-se algumas considerações finais.

## 2 Caracterização do sistema e do sistema embebido

As filas de espera  $M^X/M/1/n$  com bloqueio parcial são sistemas com um único servidor e capacidade finita,  $n$ , nos quais os clientes chegam em grupos de tamanho  $X$ , segundo um processo de Poisson de taxa  $\lambda$ . Os tamanhos dos grupos são variáveis aleatórias independentes do processo de chegadas com função de probabilidade  $\mathbf{f} = (f_a)_{a \in \mathbb{N}}$  e média finita  $\bar{f}$ . Os serviços têm durações independentes e são exponencialmente distribuídos com taxa  $\mu$ .

O mecanismo estocástico de entrada de clientes no sistema é modulada pelo estado do sistema nos instantes de chegada. Se um grupo encontra à chegada  $n$  clientes no sistema, todos os clientes do grupo são bloqueados com probabilidade 1. Se, à chegada, um grupo de tamanho  $a$  encontra  $i$  clientes no sistema, ainda que haja lugares disponíveis na fila ( $i < n$ ), os clientes podem decidir entrar ou não no sistema. Mais precisamente, se um grupo de tamanho  $a$  encontra à chegada  $i$  clientes no sistema, então com probabilidade  $e_{i,k}(a)$  o sistema transita do estado  $i$  para o estado  $k$ ,  $i \leq k \leq \min(n, i+a)$ . Em particular  $e_{n,n}(a) = 1$ ,  $e_{i,k}(a) = 0$  para  $k < i$  e  $k > \min(n, i+a)$  e  $\sum_{k=1}^{\min(n, i+a)} e_{i,k}(a) = 1$ . Decorre então que

$$e_{ij} = \sum_{a \geq 1} f_a e_{ij}(a)$$

denota a probabilidade de o sistema transitar para o estado  $j$  se aquando da chegada de um grupo este encontra  $i$  clientes no sistema.

Seja  $Z = (Z(t))_{t \in \mathbb{R}_0^+}$  o processo em tempo contínuo onde  $Z(t)$  denota o número de clientes no instante  $t$  num sistema  $M^X/M/1/n$  com bloqueio.  $Z$  é uma cadeia de Markov em tempo contínuo com espaço de estados  $E = \{0, 1, \dots, n\}$ , matriz de taxas de transição

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \lambda e_{0,0} & \lambda e_{0,1} & \lambda e_{0,2} & \lambda e_{0,3} & \dots & \lambda e_{0,n-1} & \lambda e_{0,n} \\ \mu & \lambda e_{1,1} & \lambda e_{1,2} & \lambda e_{1,3} & \dots & \lambda e_{1,n-1} & \lambda e_{1,n} \\ 0 & \mu & \lambda e_{2,2} & \lambda e_{2,3} & \dots & \lambda e_{2,n-1} & \lambda e_{2,n} \\ 0 & 0 & \mu & \lambda e_{3,3} & \dots & \lambda e_{3,n-1} & \lambda e_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mu & \lambda e_{n,n} \end{bmatrix}$$

e taxas de saída dos estados

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \lambda \\ \lambda + \mu \\ \lambda + \mu \\ \lambda + \mu \\ \vdots \\ \lambda + \mu \end{bmatrix}.$$

Apresenta-se na Figura 3 uma trajetória destes sistemas, onde  $(\tau_m)_{m \in \mathbb{N}}$  denota a sucessão de instantes de chegada ou saída de clientes do sistema, com  $\tau_0 = 0$ . Em particular, na trajetória apresentada, inicia-se, em  $\tau_1$ , um 2-p.o.c. com a chegada de um grupo e a entrada de 2 clientes. Nos instantes  $\tau_2$  e  $\tau_3$ , registam-se chegadas de grupos com entrada de 1 e de 0 clientes, respetivamente. O sistema permanece com 3 clientes até ao instante  $\tau_4$  em que termina um serviço e ocorre a saída de um cliente. Após nova entrada, em  $\tau_5$ , de 2 clientes, as subsequentes mudanças de estado até terminar o 2-p.o.c, em  $\tau_9$ , correspondem a saídas sucessivas de um cliente, decorrentes do término dos seus serviços. No instante  $\tau_{10}$  ocorre a chegada de um grupo sem entrada de clientes, pelo que o sistema permanece vazio até à chegada de 3 clientes, em  $\tau_{11}$ , iniciando-se um 3-p.o.c.. A cadeia de Markov em tempo discreto embebida nos instantes de chegada ou saída de clientes do sistema,  $W = (Z(\tau_m))_{m \in \mathbb{N}_0^+}$ ,



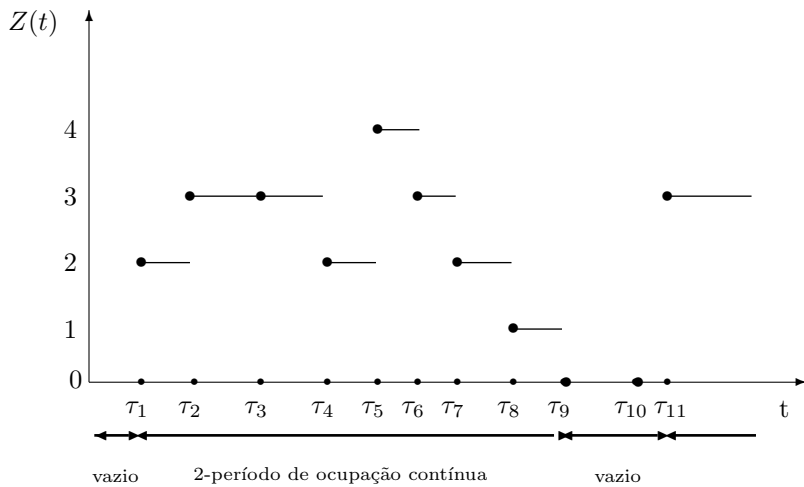


Figura 1: Trajetória no sistema  $M^X/M/1/n$  com bloqueio.

tem espaço de estados  $E$  e matriz de probabilidades de transição  $\mathbf{P} = [\text{diag}(\mathbf{r})]^{-1} \mathbf{R}$ , mais precisamente,

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} e_{0,0} & e_{0,1} & e_{0,2} & e_{0,3} & e_{0,4} & \cdots & e_{0,n-1} & e_{0,n} \\ \frac{\mu}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{1,1}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{1,2}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{1,3}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{1,4}}{\lambda+\mu} & \cdots & \frac{\lambda e_{1,n-1}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{1,n}}{\lambda+\mu} \\ 0 & \frac{\mu}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{2,2}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{2,3}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{2,4}}{\lambda+\mu} & \cdots & \frac{\lambda e_{2,n-1}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{2,n}}{\lambda+\mu} \\ 0 & 0 & \frac{\mu}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{3,3}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{3,4}}{\lambda+\mu} & \cdots & \frac{\lambda e_{3,n-1}}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda e_{3,n}}{\lambda+\mu} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\mu}{\lambda+\mu} & \frac{\lambda}{\lambda+\mu} \end{bmatrix}.$$

### 3 Probabilidade conjunta de $(S_i, L_i)$

Nesta secção derivamos a distribuição de probabilidade conjunta do vetor aleatório  $(S_i, L_i)$  onde, para  $i \in E \setminus \{0\}$ ,  $S_i$  denota o número de clientes servidos durante um  $i$ -p.o.c. e  $L_i$  denota o número de clientes perdidos durante um  $i$ -p.o.c.

Para o efeito, calculamos a função geradora de probabilidades de  $(S_i, L_i)$ :

$$g_i(u, v) = E(u^{S_i} v^{L_i}) = \sum_{s \in \mathbb{N}} \sum_{l \in \mathbb{N}_0} u^s v^l P(S_i = s, L_i = l) \quad (1)$$

com  $|u| \leq 1$  e  $|v| \leq 1$  donde, por derivação, obtemos a respetiva distribuição de probabilidade de  $(S_i, L_i)$ ,

$$\begin{aligned} p_i(s, l) &= P(S_i = s, L_i = l) \\ &= \frac{1}{s! l!} \left. \frac{\partial^{s+l} g_i(u, v)}{\partial u^s \partial v^l} \right|_{u=0, v=0}, \quad (s, l) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N}_0. \end{aligned}$$

Para  $i \in E \setminus \{0\}$ , vamos caracterizar o que sucede no instante da primeira chegada ou saída de clientes após o início de um período de ocupação contínua iniciado com  $i$  clientes. Em particular, consideramos o par aleatório  $(X_i, Y_i)$  onde  $X_i$  denota o tamanho do grupo que chega no instante da primeira chegada ou saída de clientes após o início de um  $i$ -p.o.c e  $Y_i$  denota o número de clientes que entram no sistema no mesmo instante. Note-se que, caso o referido instante seja uma saída  $X_i = Y_i = 0$ . O par aleatório  $(X_i, Y_i)$  possui função massa de probabilidade conjunta

$$P((X_i, Y_i) = (a, b)) = \begin{cases} \frac{\mu}{\lambda + \mu}, & (a, b) = (0, 0) \\ \frac{\lambda}{\lambda + \mu} f_a e_{i, i+b}(a), & a \geq 1, 0 \leq b \leq \min(a, n - i) \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2)$$

com  $(a, b) \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$ .

Note-se que, para  $i \in E \setminus \{0\}$ ,

$$(S_i, L_i)|_{(X_i, Y_i)=(0,0)} =_{st} (1 + S_{i-1}, L_{i-1})$$

e

$$(S_i, L_i)|_{(X_i, Y_i)=(a,b)} =_{st} (S_{i+b}, (a-b) + L_{i+b})$$

para  $a \geq 1$  e  $0 \leq b \leq \min(a, n-i)$ , onde  $st$  denota igualdade em distribuição.

Tratamos em seguida a distribuição de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos no caso de um período de ocupação contínua iniciado com o sistema cheio, prosseguindo com os casos de períodos de ocupação contínua iniciados com o sistema não cheio.

Pelo teorema da probabilidade total e por (2), para  $(s, l) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N}_0$ ,

$$\begin{aligned} p_n(s, l) &= P(S_n = s, L_n = l) \\ &= P((X_n, Y_n) = (0, 0))P(S_{n-1} = s-1, L_{n-1} = l) \quad (3) \\ &\quad + \sum_{a=1}^l P((X_n, Y_n) = (a, 0))P(S_n = s, L_n = l-a) \\ &= \frac{\mu}{\lambda + \mu} p_{n-1}(s-1, l) + \sum_{a=1}^l \frac{\lambda f_a}{\lambda + \mu} p_n(s, l-a) \end{aligned}$$

e, para  $1 \leq i \leq n-1$ ,

$$\begin{aligned} p_i(s, l) &= P(S_i = s, L_i = l) \\ &= P((X_i, Y_i) = (0, 0)) P(S_{i-1} = s-1, L_{i-1} = l) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{a=1}^{n-i+l} \sum_{b=a-l}^{\min(a, n-i)} P((X_i, Y_i) = (a, b)) \cdot \\ &\quad \cdot P(S_{i+b} = s, L_{i+b} = l - (a - b)) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\mu}{\lambda + \mu} p_{i-1}(s-1, l) \\ &+ \sum_{a=1}^{n-i+l} \sum_{b=a-l}^{\min(a, n-i)} \frac{\lambda e_{i, i+b}(a)}{\lambda + \mu} f_a p_{i+b}(s, l - (a - b)) \end{aligned} \quad (6)$$

Atendendo a (3) e (4) obtém-se:

$$g_n(u, v) = \frac{u\mu}{\lambda + \mu} g_{n-1}(u, v) + \frac{\lambda \sum_{a \geq 1} v^a f_a}{\lambda + \mu} g_n(u, v)$$

e

$$\begin{aligned} g_i(u, v) &= \frac{u\mu}{\lambda + \mu} g_{i-1}(u, v) \\ &+ \frac{\lambda \sum_{a \geq 1} \sum_{b=0}^{\min(a, n-i)} v^{a-b} f_a e_{i, i+b}(a)}{\lambda + \mu} g_{i+b}(u, v). \end{aligned}$$

Temos, para  $i = n$ ,

$$g_n(u, v) = \theta_n(u, v) g_{n-1}(u, v), \text{ com } \theta_n(u, v) = \frac{u\mu}{\lambda + \mu - \lambda \sum_{a \geq 1} v^a f_a}.$$

Procedendo de modo recursivo para  $i = n-1, n-2, \dots, 1$ , escrevemos a função geradora de probabilidades de  $(S_i, L_i)$  em função da função geradora de probabilidades de  $(S_{i-1}, L_{i-1})$ ,

$$g_i(u, v) = \theta_i(u, v) g_{i-1}(u, v),$$

com

$$\theta_i(u,v) = u\mu / \left[ \lambda + \mu - \lambda \sum_{a \geq 1} v^a f_a e_{i,i}(a) - \lambda \sum_{b=1}^{n-i} \sum_{a \geq b} v^{a-b} f_a e_{i,i+b}(a) \prod_{k=1}^b \theta_{i+k}(u,v) \right]$$

Finalizamos esta secção apresentando, na Figura 2, um procedimento recursivo para obter a função geradora de probabilidades de  $(S_i, L_i)$  em sistemas  $M^X/M/1/n$  com bloqueio, usando o facto de  $g_0(u,v) = 1$ .

Figura 2: Algoritmo para calcular a função geradora de probabilidades de  $(S_i, L_i)$  em sistemas  $M^X/M/1/n$  com bloqueio.

**Input:**  $n, \lambda, \mu, \mathbf{f}, (e_{ij}(a))$

$$\theta_n(u,v) = \frac{u\mu}{\lambda + \mu - \lambda \sum_{a \geq 1} v^a f_a};$$

For  $i = n - 1 : -1 : 1$

$$\theta_i(u,v) = \frac{u\mu}{\lambda + \mu - \lambda \sum_{a \geq 1} v^a f_a e_{i,i}(a) - \lambda \sum_{b=1}^{n-i} \sum_{a \geq b} v^{a-b} f_a e_{i,i+b}(a) \prod_{k=1}^b \theta_{i+k}(u,v)};$$

End for

$$g_1(u,v) = \theta_1(u,v);$$

For  $i = 2 : n$

$$g_i(u,v) = \theta_i(u,v) g_{i-1}(u,v);$$

End for

**Output:**  $(g_i(u,v))_{i=1,2,\dots,n}$

## 4 Ilustração numérica

Nesta secção, usamos os resultados anteriores e calculamos a função de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua de sistemas  $M^X/M/1/n$  com diferentes políticas de bloqueio.

Para efeitos de ilustração numérica consideramos dois tipos de políticas de admissão de clientes, nomeadamente as políticas de rejeição parcial e de rejeição total. A rejeição parcial, com

$$e_{i,j}(a) = \begin{cases} 1, & j = \min(i + a, n) \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases},$$

que representa a política de bloqueio parcial padrão dos sistemas  $M^X/M/1/n$  na qual, com probabilidade 1, entram no sistema todos os clientes do grupo que tenham lugar na fila, sendo os restantes bloqueados. A rejeição total, com

$$e_{i,j}(a) = \begin{cases} 1, & j = i, i + a > n \\ p_i, & j = i + a \leq n \\ 1 - p_i, & j = i, i + a \leq n \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases},$$

que representa a política de bloqueio, na qual, um grupo que encontra à chegada  $i$  clientes no sistema, é bloqueado com probabilidade 1 caso não haja lugares disponíveis na fila para acomodar todo o grupo ou, caso haja lugares disponíveis na fila para acomodar todo o grupo, todo o grupo entra com probabilidade  $p_i$  ou não entra com probabilidade  $1 - p_i$ . Em particular, para as probabilidades  $p_i$ , consideramos o vetor  $\mathbf{p} = (p_i)_{i \in \{0,1,\dots,n\}} = (1, 1, \dots, 1, 1, 0)$  que corresponde à situação em que todos os clientes do grupo entram, com probabilidade 1, independentemente do número de clientes que vêm à chegada; e dois vetores  $\mathbf{p} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{n}, \frac{1}{n+1}, 0\right)$  e  $\mathbf{p} = \left(\frac{1}{n+1}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 0\right)$  que correspondem, respetivamente, às situações em que a probabilidade do grupo decidir entrar diminui/ aumenta de forma monótona

à medida que à chegada o grupo encontra mais clientes no sistema. A situação monótona decrescente ocorre frequentemente quando os clientes estão com pressa para serem atendidos tendendo a não entrar no sistema se têm de esperar longos períodos de tempo. Por sua vez, a situação monótona crescente, que favorece a entrada de clientes em sistemas com maior ocupação, ocorre, por exemplo, em investimentos na bolsa.

As Tabelas 1 e 2 apresentam a função de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos num período de ocupação contínua que inicia com dois clientes no sistema (2-p.o.c.) em filas  $M^X/M/1/7$  com taxa de serviço unitária, tamanhos dos grupos com distribuição uniforme discreta de 1 a 5, política de bloqueio de rejeição total com  $\mathbf{p} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{7}, \frac{1}{8}, 0)$  e taxas de chegada  $\lambda = 0.5$  e  $\lambda = 1.1$ , respetivamente.

0	0	0	0	0	0	0	0
0.4444	0.0501	0.0543	0.0589	0.0638	0.0690	0.0246	0.0222
0.0061	0.0014	0.0016	0.0018	0.0020	0.0023	0.0012	0.0011
0.0042	0.0012	0.0014	0.0016	0.0018	0.0022	0.0013	0.0013
0.0029	0.0009	0.0011	0.0014	0.0017	0.0020	0.0013	0.0013
0.0021	0.0008	0.0010	0.0012	0.0015	0.0018	0.0013	0.0013
0.0015	0.0006	0.0008	0.0011	0.0013	0.0017	0.0013	0.0014
0.0003	0.0001	0.0002	0.0002	0.0003	0.0004	0.0003	0.0004

Tabela 1: Probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos num 2-p.o.c.,  $P(S_1 = s, L_1 = l)$  para  $s = 1, 2, \dots, 8$  e  $l = 0, 1, \dots, 7$ , no sistema  $M^X/M/1/7$  com  $\mu = 1$ ,  $\lambda = 0.50$  e  $\mathbf{f} = (\frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5})$ .

No sistema com baixa intensidade de tráfego (Tabela 1), a taxa de entradas é bem menor do que a taxa de serviço pelo que a fila tem pouca tendência a encher e a ter valores elevados de perdas. Consequentemente a massa de probabilidade conjunta concentra-se nos valores mais baixos do número de clientes servidos e do número de cli-

0	0	0	0	0	0	0	0
0.2268	0.0402	0.0455	0.0515	0.0581	0.0656	0.0337	0.0323
0.0035	0.0013	0.0015	0.0018	0.0022	0.0027	0.0019	0.0020
0.0017	0.0008	0.0010	0.0012	0.0015	0.0019	0.0015	0.0016
0.0009	0.0005	0.0006	0.0008	0.0010	0.0013	0.0011	0.0013
0.0005	0.0003	0.0004	0.0005	0.0007	0.0009	0.0009	0.0010
0.0002	0.0002	0.0002	0.0003	0.0005	0.0006	0.0007	0.0008
0.0000	0.0000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0002	0.0002	0.0002

Tabela 2: Probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos num 2-p.o.c.,  $P(S_1 = s, L_1 = l)$  para  $s = 1, 2, \dots, 8$  e  $l = 0, 1, \dots, 7$ , no sistema  $M^X/M/1/7$  com  $\mu = 1$ ,  $\lambda = 1.1$  e  $\mathbf{f} = (\frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5})$ .

entes perdidos. Note-se que, neste caso,  $P(S_2 \leq 4, L_2 \leq 4) = 0.6944$ . Em contraste, no sistema com taxa de utilização mais elevada (Tabela 2), com mais tendência para encher e consequentemente para ocorrerem mais bloqueios,  $P(S_2 \leq 4, L_2 \leq 4) = 0.4384$  dado que a massa de probabilidade conjunta ainda apresenta probabilidades positivas para valores mais elevados do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos.

A Figura 3 apresenta a função de distribuição conjunta de  $(S_2, L_2)$  no ponto (6,6) para filas  $M^X/M/1/10$  com taxa de serviço unitária, tamanho dos grupos com função massa de probabilidade  $\mathbf{f} = (0, 0.2, 0, 0.8)$  e para quatro políticas de bloqueio (total e parcial com  $\mathbf{p} = (1, 1, \dots, 1, 1, 0)$ ,  $\mathbf{p} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{10}, \frac{1}{11}, 0)$  e  $\mathbf{p} = (\frac{1}{11}, \frac{1}{10}, \dots, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 0)$ ), em função da taxa de utilização ( $\rho = \lambda$ ), doravante denotada por  $F_{(S_2, L_2)}^\rho(6, 6)$ . Qualquer que seja a taxa de utilização  $\rho$  considerada, observa-se que o valor de  $F_{(S_2, L_2)}^\rho(6, 6)$  é sensível às diferentes políticas de entrada consideradas e que decresce com o aumento da taxa de utilização. Qualquer que seja a taxa de utilização  $\rho$  considerada, o sistema com política de rejeição parcial é o que apresenta menor valor de  $F_{(S_2, L_2)}^\rho(6, 6)$ , logo seguido do sistema com rejeição total



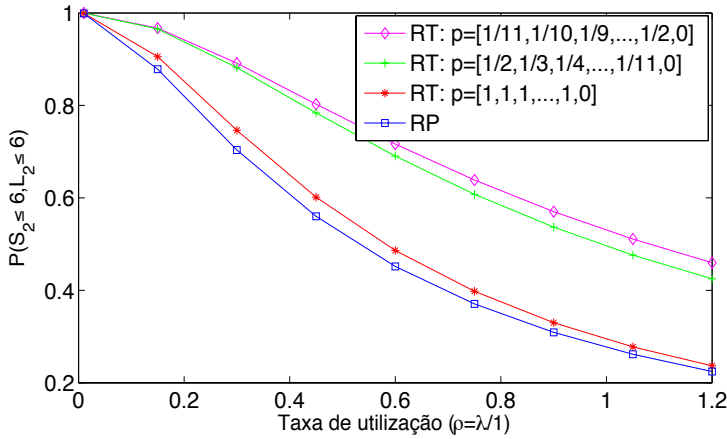


Figura 3: Função de distribuição conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos num 2-p.o.c. no sistema  $M^X/M/1/10$  com  $\mu = 1$  e  $\mathbf{f} = (0, 0.2, 0, 0.8)$ , em função da taxa de utilização.

com  $\mathbf{p} = (1, 1, \dots, 1, 1, 0)$ . Tal prende-se com o facto de, no sistema com rejeição parcial, ser certa a entrada de clientes até o sistema estar cheio, tendo-se probabilidades pequenas de servir e de perder no máximo seis clientes num 2-p.o.c.. No sistema com política de rejeição total onde é certo todos os clientes do grupo entrarem quando têm lugar na fila, a fila (embora ligeiramente menor) também tem tendência a encher conduzindo ainda a pequenos valores de probabilidade de servir e de perder poucos clientes. Em oposição, os sistemas com política de rejeição total na qual um grupo pode decidir não entrar no sistema ainda que tenha lugar na fila são os que apresentam maiores valores de  $F_{(S_2, L_2)}^\rho(6, 6)$ . Entre eles, destaca-se com valores mais elevados de  $F_{(S_2, L_2)}^\rho(6, 6)$  o sistema com rejeição

total monótona decrescente, porque favorece a rejeição dos grupos quando o sistema ainda tem poucos clientes, tornando mais provável a ocorrência de períodos de ocupação contínua mais curtos, com poucos clientes servidos, ainda que com algumas perdas.

## 5 Conclusão

O número de clientes servidos e o número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua são importantes medidas de desempenho dos sistemas de filas de espera. Embora a análise conjunta destas duas medidas de desempenho constitua uma mais valia para a caracterização dos sistemas de filas de espera, a distribuição de probabilidade conjunta destas medidas de desempenho não se encontra derivada na literatura.

Neste trabalho, caracteriza-se a distribuição de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua em sistemas de filas de espera markovianos, com chegadas de clientes ao sistema de tamanho aleatório, com um único servidor e com capacidade finita. Em particular, definimos um processo recursivo para calcular a função geradora de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua que podem ser iniciados por múltiplos clientes no sistema.

A recursão definida foi aplicada para calcular numericamente a função massa de probabilidade conjunta do número de clientes servidos e do número de clientes perdidos em períodos de ocupação contínua de filas  $M^X/M/1/n$  sob várias políticas estocásticas de admissão de clientes, nomeadamente bloqueio parcial e bloqueio monótono (crescente / decrescente) de clientes no sistema.

A abordagem seguida neste trabalho é uma extensão do trabalho apresentado em [3].

## Agradecimentos

Este trabalho foi elaborado com o apoio parcial da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) pelo projeto UID/Multi/04621/2019.

## Referências

- [1] Ancker, C. J., Gafarian, A. V. (1963). Some queuing problems with balking and reneging II. *Operations Research* 11(6), p. 928–937.
- [2] Chaudhry, M.L., Templeton, J.G.C. (1983). *A First Course in Bulk Queues*. Wiley, New York.
- [3] Ferreira, F., Pacheco A., Ribeiro, H. (2020). Números de clientes servidos e bloqueados em períodos de ocupação contínua de filas  $M/M/1/n$  com bloqueio. In Salgueiro, M. F., Vicente, P., Calapez, T., Marques, C., e Silva, M. E., (eds.): *Atas do XXIII Congresso da Sociedade Portuguesa de Estatística*, 117–127, Sociedade Portuguesa de Estatística.
- [4] Gaver, D.P., Jr. (1959). Imbedded Markov chain analysis of a waiting-line process in continuous time. *Annals of Mathematical Statistics*, 30, 698–720.
- [5] Guha, D., Goswami, V., Banik, A. D. (2016). Algorithmic computation of steady-state probabilities in an almost observable  $GI/M/c$  queue with or without vacations under state dependent balking and reneging. *Applied Mathematical Modelling*, 40, 4199–4219.
- [6] Haight, F. A. (1957). Queuing with balking I. *Biometrika* 44(3-4), p. 360–369.
- [7] Jain, N.K., Kumar, R., Som, B. K. (2014). An  $M/M/1/N$  Queuing System with Reverse Balking. *American Journal of Operational Research* 4(2), 17–20.
- [8] Kulkarni, V.G. (1995). *Modeling and Analysis of Stochastic Systems*. Chapman and Hall, Londres.
- [9] Kumar, R., Sharma, S. (2018). Transient Analysis of an  $M/M/c$  Queuing System with Balking and Retention of Reneging Customers. *Communications in Statistics – Theory and Methods* 47(6), 1318–1327.



# On point processes and preferential sampling

Isabel Natário

Departamento de Matemática, Faculdade de Ciências e Tecnologia & Centro de Matemática e Aplicações (CMA), Universidade Nova de Lisboa, Portugal, *icn@fct.unl.pt*

M. Lucília Carvalho

Faculdade de Ciências & Centro de Estatística e Aplicações (CE-AUL), Universidade de Lisboa, Portugal, *mlucilia.carvalho@gmail.com*

**Keywords:** Geostatistics; Preferential Sampling; Point Processes

**Abstract:** Geostatistics infers about a spatially continuous phenomenon  $\{S(x) : x \in \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^2\}$ , sampled in a finite number of locations,  $\mathbf{X}$ , where it is measured with error. Data collected in this context may not be representative. The locations where data are collected may carry useful information about the variable of interest  $S$ , representing a situation of preferential sampling. If this is the case, it is preferable to take  $\mathbf{X}$  into account in the model than just use the observed locations to condition inference. This work describes the current state of the art of the joint modelling approach to this problem and explores experimentally some issues that might need improvement.

## 1 Introduction

Geostatistics is concerned with capturing spatial correlation through a continuous stochastic process, such as a Gaussian spatial process with mean given by a linear model and covariance function dependent only on distance, if isotropy can be assumed. Considering that the spatial process is measured with error through a response varia-

ble  $Y$ , in a discrete set of points of a certain spatial domain, taken in fixed or randomly chosen locations, Geostatistics is able to characterize the spatial phenomenon in the whole domain. This is the case for the chemical composition of maritime soils or the fish abundance in sea, for example.

In practice it happens frequently that the choice of the sampling locations is not random, but rather selected in a preferential way according to the gradient of what is being measured. That results in stochastic dependence between the spatial and sampling processes, known as preferential sampling [2].

The methodology proposed for modelling these type of data [2] addresses the bias problem caused by informative sampling locations through a Log-Gaussian Cox Point Process that describes the sampling design. Its intensity function is given by a predictor including spatial random effects modelled by a Gaussian process that is shared with the predictor of the response. This model is identified in [7] as a Cox Process with marked intensity. Data can be interpreted as a marked point process, where the sampling locations form a point pattern and the measurements are taken in those locations. The estimation of the model parameters is made by maximum likelihood through Monte Carlo simulation, with low efficiency. Following the previous ideas, [10] propose a conceptual close alternative for estimation under the Bayesian paradigm. The estimation method, theoretically well justified, implements the Gibbs and Metropolis samplers of the MCMC approach, not always without problems. More complex models are penalized with complicated inferencial processes, which can be quite challenging computationally.

Transversely, the statistical methods used are strongly based on Gaussian random fields, and on their relation with Markov Gaussian random fields [6]. Under this setting, the Bayesian paradigm stands out to be more flexible in accommodating hierarchical and more sophisticated models. The use of the Stochastic Partial Differential Equation (SPDE) approach [9] is particularly well suited and efficient in the estimation of these models, allowing variations in the traditional paradigms. This approach enables to approximate

the continuous Gaussian field that models  $S$  through a Gaussian Markov random field, using the Integrated Nested Laplace Approximation (INLA) for inference [12, 8].

This work describes, explains and explores the relation between the marked point processes and the geostatistical models under preferential sampling [7, 5]. This allows to deal with some statistical issues that were not yet addressed and to simplify the computational burden of the numerical procedures associated with the latter. Based on simulations, it is explored how these models capture true surfaces, considering different degrees of preferentiality in the data sampling process.

The following section presents the methods, then results of the simulations are described in Section 3 and finally discussed in Section 4.

## 2 Methods

### 2.1 Preferential sampling

The common geostatistical model

$$Y_i = \mu + S(X_i) + \epsilon_i, \quad X_i \in \mathcal{D}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

assumes that there is a phenomenon of interest  $\{S(x) : x \in \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^2\}$  modelled by a spatial continuous stochastic process that is imperfectly observed in some locations  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$  defined according to a sampling scheme, resulting in observations  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)$ ,  $Y_i \in \mathbb{R}$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Although the complexity of the true surface may vary, the most simple and common approach is to model it as a stationary Gaussian process with constant mean and correlation function depending only on the distance between locations,  $\rho(u)$ , [3]. A flexible and widely used class of correlation functions is the Matérn family of correlations:

$$\rho(u) = \frac{2^{1-\kappa}}{\Gamma(\kappa)} \left(\frac{u}{\phi}\right)^\kappa K_\kappa\left(\frac{u}{\phi}\right),$$

where  $\kappa$  is a shape parameter associated to the field smoothness,  $\phi$  is a scale parameter that controls the correlation decay with distance and  $K_\kappa$  is a modified Bessel function of the second kind and order  $\kappa$ .

In the geostatistical model (1),  $\mu \in \mathbb{R}$  is a constant mean parameter,  $S$  is a Gaussian process, with zero mean, variance  $\sigma^2$  and Matérn covariance function dependent on  $(\phi, \kappa, \sigma^2)$ ,  $\epsilon_i$  are i.i.d. random errors with  $E[\epsilon_i] = 0$  and  $Var(\epsilon_i) = \tau^2$  is the nugget variance.

Inference on this model is based on the likelihood function of  $\boldsymbol{\theta} = (\mu, \tau^2, \phi, \kappa, \sigma^2)$ :

$$L(\boldsymbol{\theta}) = [\mathbf{X}, \mathbf{Y}] = \int [\mathbf{X}, \mathbf{Y}, S] dS = \int [\mathbf{Y}|S, \mathbf{X}][\mathbf{X}|S][S] dS, \quad (2)$$

denoting  $[\cdot]$  a density function.

For standard geostatistics, the process of selecting measurement locations is independent of the response,  $[\mathbf{X}|S] = [\mathbf{X}]$ , and consequently the likelihood function is given by

$$L(\boldsymbol{\theta}) = [\mathbf{X}, \mathbf{Y}] = [\mathbf{X}] \int [\mathbf{Y}|S, \mathbf{X}][S] dS = [\mathbf{X}][\mathbf{Y}|\mathbf{X}].$$

However, in practice, is quite common that sampling is preferential because the number of points taken is related with the value of the spatial field, that is  $[\mathbf{X}|S] \neq [\mathbf{X}]$ . If the process that determines the location of data  $\mathbf{X}$  depends on the spatial field of interest  $S$ , the likelihood function, as well as inference, is necessarily different.

This situation has been first modelled in [2], taking into account the preferential sampling effect on inference. For that, the authors model jointly the observations  $\mathbf{Y}$  and the point process (*PP*) of the locations  $\mathbf{X}$ , conditionally on their mutual dependence on  $S$ . The spatial field  $S$  is taken as a shared latent Gaussian process



model, with zero mean and Matérn covariance function dependent on  $(\phi, \kappa, \sigma^2)$ .

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_i | (S, \mathbf{X} = \mathbf{x}) = \mu + S(x_i) + \epsilon_i, \ i = 1, \dots, n \\ X|S \sim PP(\lambda(x)) \end{array} \right., \quad (3)$$

where  $\epsilon_i$  are i.i.d. random errors,  $E[\epsilon_i] = 0$ ,  $Var(\epsilon_i) = \tau^2$  (nugget variance) and  $X|S$  is a Log-Gaussian Cox model for point patterns with intensity function

$$\lambda(x) = \exp(\alpha + \beta S(x)).$$

Preferentiability, if any, is captured by parameter  $\beta$ . The case  $\beta = 0$  corresponds to non-preferential sampling;  $\beta > 0$  to a tendency for having more observations at spatial locations with higher outcome values and  $\beta < 0$  to less observations on those same locations.

Inference for this model is based on the likelihood function of  $\boldsymbol{\theta} = (\mu, \tau^2, \phi, \kappa, \sigma^2, \alpha, \beta)$ .

## 2.2 Point processes in $\mathbb{R}^2$

A spatial point process  $X$  defined in  $\mathcal{D}$  is a random countable subset of the space  $\mathcal{D}$ . A spatial point pattern  $\mathbf{x}$  is a realization of a spatial point process.

**Definition 2.1** *A spatial point process  $X$  in  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$  is an application from the probability space  $(\Omega, \mathcal{S}, \mathcal{P})$  into the measurable space  $(\mathbb{N}, \mathcal{N})$ , with*

$$\mathbb{N} = \{\mathbf{x} \subseteq \mathcal{D} : n(\mathbf{x}_A) < \infty, \text{ for all bounded Borel measurable } A \subseteq \mathcal{D}\},$$

where  $n(\mathbf{x}_A) = N_{\mathbf{x}}(A)$  is the number of points of  $\mathbf{x}$  in  $A$  and  $\mathcal{N}$  is the smallest  $\sigma$ -algebra of subsets of  $\mathbb{N}$  such that, for all sets  $A$

above, the application from  $\mathcal{N}$  to  $\mathbb{N}_0$ , matching each  $\mathbf{x}$  to  $N_{\mathbf{x}}(A)$ , is measurable.

This definition implies that  $N_{\mathbf{x}}(A)$  is finite if  $A \subset \mathcal{D}$  is a bounded region.

The distribution of a spatial point process is a probability measure induced in  $\mathcal{N}$ . It is determined by the probabilities  $P(X \in U)$ , for  $U \in \mathcal{N}$ . However a spatial point process is usually described by its intensity function, due to its interpretability, defined as:

$$\lambda(x) = \lim_{|dx| \rightarrow 0} \left\{ \frac{E[N(dx)]}{|dx|} \right\},$$

for any point  $x \in \mathcal{D}$  with  $|dx|$  the area of a neighbourhood  $dx$  of  $x$  and  $N(dx)$  is the random number of points in  $dx$ .

For stationary processes this represents the constant expected number of events per unit area.

**Definition 2.2** *A spatial Poisson Process in  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$  is a spatial point process characterized by:*

- *For  $A \subset \mathcal{D}$  and  $\lambda(x) > 0$ ,  $x \in \mathcal{D}$ ,  $N(A) \sim \text{Poisson} \left( \int_A \lambda(x) dx \right)$ , where  $N(A)$  is the random number of points in  $A$ .*
- *Given that  $N(A) = n$ , the  $n$  events form a random sample from a distribution in  $A$  with probability density function proportional to  $\lambda(x)$ .*
- *For any two non-overlapping  $A, B \subset \mathcal{D}$ ,  $N(A)$  and  $N(B)$  are independent random variables.*

A Poisson process is called a homogeneous Poisson process if  $\lambda$  is constant, otherwise is said to be inhomogeneous.

This class provides a framework for the inclusion of a spatial tendency,  $\lambda(x) = \lambda(x; \theta)$ , or for the introduction of covariates  $(z_1, \dots, z_p)$

in the analysis of spatial patterns ,  $\lambda(x) = \lambda(z_1(x), z_2(x), \dots, z_p(x))$ .

A Cox Process results from incorporating environmental heterogeneity, assumed to be stochastic, in inhomogeneous Poisson processes.

**Definition 2.3** *A Cox Process in  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$  is characterized by:*

- $\{\Lambda(x) : x \in \mathcal{D}\}$  *is a non-negative valued stochastic process.*
- *Conditional on a realization of  $\Lambda(x)$ ,  $\{\Lambda(x) = \lambda(x) : x \in \mathcal{D}\}$ , the events form a inhomogeneous Poisson Process with intensity function  $\lambda(x)$ .*

**Definition 2.4** *A Log-Gaussian Cox Process is a Cox process where the logarithm of the intensity  $\Lambda$  is a Gaussian process.*

## 2.3 Preferential sampling - inference

Inference is based on the likelihood function (2), from which estimates for the unknown parameters  $\boldsymbol{\theta} = (\mu, \tau, \phi, \kappa, \sigma^2)$  can be obtained. Then one can use spatial prediction techniques (e.g., kriging) to obtain predictions for  $S$ , over a grid of unobserved locations. The integral on the likelihood is difficult to evaluate and hence its optimization is a very difficult problem. It is proposed in [2] to consider a discrete version of the integral, only for a set of values  $\mathbf{S}^*$  of  $S$  on a grid,

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \int [\mathbf{Y}|\mathbf{S}^*, \mathbf{X}][\mathbf{X}|\mathbf{S}^*][\mathbf{S}^*]d\mathbf{S}^*,$$

and then use Monte Carlo (MC) to approximate the discrete version of the integral.

However, the discrete version of the integral in  $L(\boldsymbol{\theta})$  implicitly considers position, i.e conditioning on  $\mathbf{X}$ . This raises some issues [4]. As it implies a different integrand function, its corresponding MC

estimator may not be approximating the desired likelihood function. Additionally, the MC sampling distribution may also be implicitly conditioned on  $\mathbf{X}$ .

Further, the MC method requires an approximation to the distribution of the  $\mathbf{S}^*|\mathbf{Y}, \mathbf{X}$ , which is in general intractable [2], but that can be avoided using an alternative proposed in [4]. This alternative performs the estimation using automatic differentiation of a Laplace approximation to the marginal likelihood, to maximize the preferential likelihood efficiently with respect to the parameters of interest. However, likewise the method in [2], this approximation works well when there is no preferential sampling, but not so nicely otherwise. The work in [4] uses the SPDE approach [9] to approximate the Gaussian random field. This methodology is particularly useful to circumvent computational issues associated with spatial modeling. It resorts to Gaussian Markov Random Fields (GMRF) [6], that are discretely indexed Gaussian Fields (GF), where the field distribution on a site, conditioned on the field on all other sites (finite), depends solely on neighbours. A huge computational gain is obtained through the resulting sparse GMRF inverse covariance matrix that is directly related to the neighbours, enabling the use of numerical methods for sparse matrices. An important breakthrough was made in [9], where it is shown that a GMRF representation, using a finite element method, can be constructed explicitly from a certain stochastic partial differential equation (SPDE). This equation is driven by a Gaussian white noise and has a GF with Matérn covariance function as the solution. It is a basis function representation of piecewise linear basis functions and Gaussian weights, with Markov dependences that are determined by a general triangulation of the domain.

For this challenging inferential problem, a more flexible approach as the one offered by a Bayesian framework seems to be preferable.

In [10], some theoretical results on the estimation of the model in [2] were presented, under the Bayesian paradigm, namely studying the properness of the posterior distributions of  $\beta$  under improper prior distributions and regarding consistency of the density estimates of

the locations and mean response (MCMC approach). In [1], the point process of  $\mathbf{X}$  and the measurement process are specified and modelled in an unified Bayesian model formulation that includes a shared spatial random component, resulting in a general model specification that allows to address continuous and finite population locations over space (MCMC approach).

In [11], the Bayesian approach is used to perform preferential sampling models, resorting to the INLA method and the SPDE approach to approximate the Gaussian random field, gaining computational efficiency. This approach is also applied in [4] for comparison purposes. In the current work, this is also the inference strategy adopted for the preferential model, described in subsection 2.1.

The INLA approach [12] is a computationally efficient alternative to MCMC to do approximate Bayesian inference deterministically for the (large) specific class of latent Gaussian models, the GMRF, due to their mentioned computational properties. Using a nested version of the Laplace approximation and numerical techniques for sparse matrices, it enables the analytical computation of the approximate integrals required in the Bayesian inference.

This method has a computationally efficient implementation in the R-package R-INLA, [13, 12], which is used in the present work. The analysis considers the default R-INLA prior distributions for the models in 2.1.

### 3 Simulation results

In this section several simulation results are presented with the aim of studying how well the model in Section 2.1 captures the existence of preferential sampling and distinguishes that from other factors, such as the presence of covariates or scaling issues.

For this, true realizations of Matérn fields were considered with  $\kappa = 1$ ,  $\sigma^2 = 2.5$  and scale parameter  $\phi$  in  $\{0.7, 1.3, 0.1\}$  (see Figure 1). Additionally, the true field mean was allowed to be  $\mu = 4$  or given by the spatial covariate Euclidean distance to coast,  $dist(x)$ .

Parameters  $\tau^2$  and  $\alpha$  were chosen as  $\tau^2 = 0.2$  and  $\alpha = 0$ .

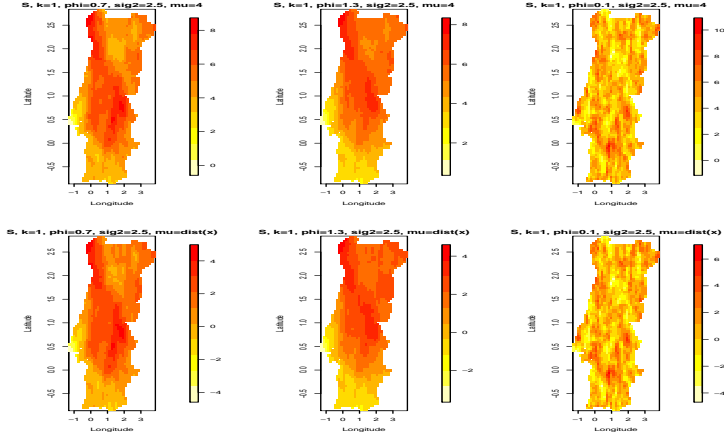


Figure 1: True realizations of Matérn fields for  $\kappa = 1$ ,  $\sigma^2 = 2.5$ , and  $\phi = 0.7$  (left),  $\phi = 1.3$  (middle) and  $\phi = 0.1$  (right),  $\tau^2 = 0.2$  and  $\alpha = 0$ . Top row corresponds to a field with mean  $\mu = 4$  and bottom row corresponds to a mean field given by the spatial covariate  $dist(x)$ .

For each of the two field realizations with  $\phi = 0.7$  and mean  $\mu = 4$  or  $\mu(x) = dist(x)$ ,  $n = 100$  points were simulated according to three different preferential sampling scenarios: positive preferential sampling,  $\beta = 2$ , no preferential sampling,  $\beta = 0$ , and negative preferential sampling,  $\beta = -2$ . Figure 2 depicts the corresponding sampled points plotted on the field realizations. Data are summarized in Table 1.

For these data sets, the preferential model in Section 2.1 was fitted in R-INLA, either considering  $\mu$  as a fixed parameter (*pref.model.mu*) or modeled as  $\mu(x) = \gamma dist(x)$  (*pref.model.x*). For comparison purposes the non-preferential common geostatistical model (1) was also fit-

Table 1: Data description.

Data Id	Field Mean, $\mu$	$\beta$	$\kappa$	$\phi$	$\sigma^2$
<i>sampData</i> (2)	4	2	1	0.7	2.5
<i>sampData</i> (0)	4	0	1	0.7	2.5
<i>sampData</i> (-2)	4	-2	1	0.7	2.5
<i>sampData.x</i> (2)	<i>dist</i> ( <i>x</i> )	2	1	0.7	2.5
<i>sampData.x</i> (0)	<i>dist</i> ( <i>x</i> )	0	1	0.7	2.5
<i>sampData.x</i> (-2)	<i>dist</i> ( <i>x</i> )	-2	1	0.7	2.5

ted in INLA (*nonpref.model. $\mu$* , for  $\mu$  as fixed, or *nonpref.model.x*, for  $\mu(x) = \gamma \text{dist}(x)$ ). Comparisons were made based on the conditional predictive ordinate, CPO, defined for each observation as the posterior probability of observing that observation when the model is fitted only to the rest of the data. From these a logscore given by the symmetric of the log-individual CPO's is calculated and can be seen as an estimator of the logarithm of the marginal likelihood. The largest value of this score indicates better prediction quality among competing models. DIC and WAIC statistics were also calculated [15, 16]. As all these measures are likelihood dependent, they can only be used to compare models within the preferential or non-preferential model classes. Thus, comparisons between classes were made on the base of the parameter estimates proximity to real values. Tables 2 and 3 summarize the findings for data represented in Figure 2. It is highlighted in bold the best (correct) fit, for each case.

The first result that stands out is that, when data are sampled non-preferentially, the estimates of the mean field and of  $\beta$  are closer to their real values.

Another interesting point is that, in general, model parameter estimates are closer to real values for data generated from a field with constant mean  $\mu$  (as opposite to  $\mu(x) = \text{dist}(x)$ ), even for “wrong models”.

Estimates of the non-zero preferential parameter  $\beta$  tend to be smaller in absolute value than the true value, although always reveling the correct type of preferentiability anyway. Intercept parameter  $\alpha$  of the point process intensity is badly estimated by all models but, on

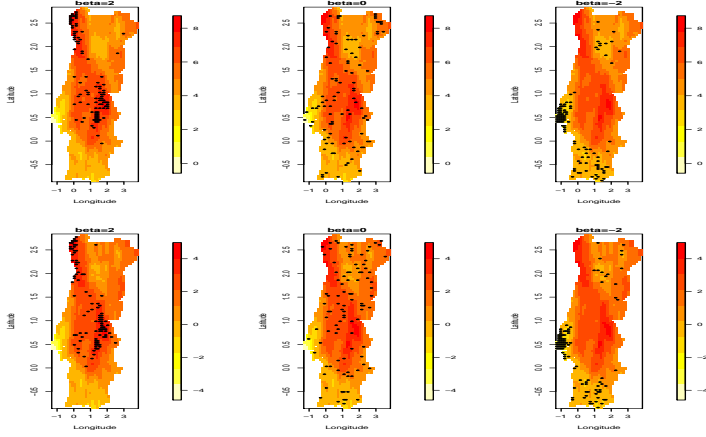


Figure 2: True fields and simulated data for  $\beta = 2$  (left),  $\beta = 0$  (middle) and  $\beta = -2$  (right). Top row corresponds to the field mean  $\mu = 4$  and bottom row corresponds to the mean of  $dist(x)$ .

the contrary, the nugget variance  $\tau^2$  is well estimated by all models and for all data sets.

When the models include a covariate that is not necessary, parameter  $\sigma^2$  is over-estimated. For the models fitted to data generated from a mean field given by  $dist(x)$ ,  $\sigma^2$  is generally underestimated.

Both preferential and non-preferential models have their estimation of the range  $\phi$  worsen if a not needed covariate is included, even if the covariate is not significant.

For non-preferential data or negative preferential data, a covariate that is not needed happens to be significant.

In terms of the considered goodness of fit measures, WAIC is the only measure that consistently identifies the preferential models as the correct ones, when that is the case. DIC only fails that objective in one case. As for the non-preferential models, DIC and WAIC always



Table 2: Model, data and goodness of fit measures.

Case	Model	Data	CPO	DIC	WAIC
<b>1</b>	<b>pref.model.<math>\mu</math></b>	<b>sampData(2)</b>	<b>412.5</b>	<b>683.2 (43.1)</b>	<b>671.9 (28.2)</b>
2	pref.model. $x$	sampData(2)	558.8	681.8 (41.2)	689.5 (36.3)
3	nonpref.model. $\mu$	sampData(2)	95.1	184.8 (25.0)	185.8 (21.6)
4	nonpref.model. $x$	sampData(2)	94.7	185.7 (20.2)	186.3 (17.6)
<b>5</b>	<b>pref.model.<math>\mu</math></b>	<b>sampData(0)</b>	<b>444.3</b>	<b>864.9 (50.6)</b>	<b>863.9 (38.4)</b>
6	pref.model. $x$	sampData(0)	443.5	865.1 (48.4)	864.9 (37.3)
<b>7</b>	<b>nonpref.model.<math>\mu</math></b>	<b>sampData(0)</b>	<b>104.4</b>	<b>184.1 (50.2)</b>	<b>183.3 (37.9)</b>
8	nonpref.model. $x$	sampData(0)	103.5	184.6 (47.6)	184.5 (36.6)
<b>9</b>	<b>pref.model.<math>\mu</math></b>	<b>sampData(-2)</b>	<b>349.2</b>	<b>675.8 (49.9)</b>	<b>668.7 (34.9)</b>
10	pref.model. $x$	sampData(-2)	406.2	780.7 (50.3)	781.0 (39.5)
11	nonpref.model. $\mu$	sampData(-2)	97.3	172.5 (39.5)	175.4 (33.0)
12	nonpref.model. $x$	sampData(-2)	96.9	173.7 (37.0)	176.9 (31.5)
13	pref.model. $\mu$	sampData.x(2)	400.4	602.5 (49.3)	591.5 (31.5)
<b>14</b>	<b>pref.model.<math>x</math></b>	<b>sampData.x(2)</b>	<b>371.1</b>	<b>601.1 (51.2)</b>	<b>589.8 (33.0)</b>
15	nonpref.model. $\mu$	sampData.x(2)	91.9	168.6 (33.9)	170.6 (28.5)
16	nonpref.model. $x$	sampData.x(2)	90.8	169.4 (30.5)	171.0 (30.5)
17	pref.model. $\mu$	sampData.x(0)	455.8	869.7 (62.4)	865.7 (43.9)
<b>18</b>	<b>pref.model.<math>x</math></b>	<b>sampData.x(0)</b>	<b>455.0</b>	<b>867.6 (63.4)</b>	<b>863.1 (44.3)</b>
19	nonpref.model. $\mu$	sampData.x(0)	116.2	190.1 (61.4)	186.2 (43.0)
<b>20</b>	<b>nonpref.model.<math>x</math></b>	<b>sampData.x(0)</b>	<b>115.9</b>	<b>188.3 (62.5)</b>	<b>184.0 (43.4)</b>
21	pref.model. $\mu$	sampData.x(-2)	425.2	727.5 (67.2)	710.4 (42.2)
<b>22</b>	<b>pref.model.<math>x</math></b>	<b>sampData.x(-2)</b>	<b>399.0</b>	<b>727.4 (67.5)</b>	<b>710.3 (42.5)</b>
23	nonpref.model. $\mu$	sampData.x(-2)	94.6	168.4 (45.1)	166.9 (33.8)
24	nonpref.model. $x$	sampData.x(-2)	93.9	168.6 (43.9)	167.0 (33.0)

work well. It should be noticed that the worst fits were obtained for data generated with a mean field given by  $\mu(x) = dist(x)$ . Data generated with mean field constant presented expressive better fits.

## 4 Discussion

The purpose of this work is to describe the relation between marked point processes and geostatistical models under preferential sampling and to look for possible fragilities of this formulation, when some sort of confounding between a preferential sampling effect and model misspecification might exist. From this study, it seems that complicated data are not always better explained by complicated models. Although covariate effects acted additively with spatial effects in the mean response of data generation, the preferential models seemed to struggle to separate these and to identify the correct model. Additionally, the usual goodness of fit measures might have to be reconsidered for more complex settings of joint modelling two different likelihoods.

Table 3: True parameter values (bold) and corresponding pointwise and 95% credible interval estimates for different models.

Case	Parameter					
	$\mu$ ou $\gamma$	$\tau^2$	$\sigma^2$	$\phi$	$\alpha$	$\beta$
<b>True</b>	<b><math>\mu = 4</math></b>	<b>0.2</b>	<b>2.5</b>	<b>0.7</b>	<b>0</b>	<b>2</b>
1	$\mu = 5.43$ [4.11; 6.76]	0.27 [0.38; 0.20]	1.37 [0.54; 3.35]	0.77 [0.44; 1.33]	-3.95 [-5.92; -1.97]	1.51 [0.19; 1.89]
2	$\gamma = -1.09$ [-3.49; 1.31]	0.27 [0.38; 0.2]	4.28 [2.19; 7.95]	1.55 [0.99; 2.37]	-12.58 [-13.68; -11.49]	1.51 [1.09; 1.93]
3	$\mu = 6.34$ [5.60; 7.08]	0.28 [0.20; 0.42]	0.64 [0.27; 1.46]	0.52 [0.24; 1.04]	NA NA	NA NA
4	$\gamma = 2.23$ [-5.60; 10.06]	0.30 [0.21; 0.43]	3.72 [1.72; 7.62]	1.72 [0.90; 2.99]	NA NA	NA NA
<b>True</b>	<b><math>\mu = 4</math></b>	<b>0.2</b>	<b>2.5</b>	<b>0.7</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
5	$\mu = 4.83$ [3.23; 6.42]	0.22 [0.14; 0.36]	2.03 [1.06; 3.75]	0.72 [0.44; 1.12]	-2.39 [-2.59; -2.19]	-0.02 [-0.16; 0.13]
6	$\gamma = -2.41$ [-2.61; -2.21]	0.22 [0.14; 0.37]	3.35 [1.74; 6.18]	0.99 [0.63; 1.51]	-2.41 [-2.61; -2.21]	0.01 [-0.11; 0.12]
7	$\mu = 4.82$ [3.25; 6.38]	0.21 [0.13; 0.36]	2.01 [1.06; 3.69]	0.71 [0.43; 1.11]	NA NA	NA NA
8	$\gamma = 8.33$ [2.65; 14.00]	0.22 [0.14; 0.36]	3.28 [1.74; 6.05]	0.98 [0.62; 1.49]	NA NA	NA NA
<b>True</b>	<b><math>\mu = 4</math></b>	<b>0.2</b>	<b>2.5</b>	<b>0.7</b>	<b>0</b>	<b>-2</b>
9	$\mu = 5.47$ [3.52; 7.42]	0.21 [0.14; 0.34]	2.97 [0.03; 6.36]	0.74 [0.46; 1.18]	-3.38 [-4.87; -1.90]	-0.77 [-0.91; -0.63]
10	$\gamma = 18.44$ [13.94; 22.94]	0.23 [0.14; 0.38]	6.46 [2.70; 14.18]	0.89 [0.52; 1.41]	-2.05 [-2.33; -1.76]	0.32 [0.19; 0.44]
11	$\mu = 4.15$ [3.16; 5.13]	0.21 [0.14; 0.35]	1.32 [0.65; 2.56]	0.47 [0.26; 0.81]	NA NA	NA NA
12	$\gamma = 9.49$ [4.46; 14.21]	0.22 [0.15; 0.35]	2.56 [1.30; 4.88]	0.75 [0.46; 1.20]	NA NA	NA NA
<b>True</b>	<b><math>\mu(x) = \text{dist}(x)</math></b>	<b>0.2</b>	<b>2.5</b>	<b>0.7</b>	<b>0</b>	<b>2</b>
13	$\mu = 0.37$ [-1.19; 1.92]	0.23 [0.16; 0.33]	2.40 [0.97; 5.71]	0.65 [0.38; 1.08]	-4.29 [-6.21; -2.37]	1.24 [0.96; 1.51]
14	$\gamma = -0.77$ [-1.97; 0.44]	0.33 [0.23; 0.16]	2.19 [1.08; 4.28]	0.62 [0.39; 0.97]	-5.19 [-5.77; -4.62]	1.29 [1.00; 1.58]
15	$\mu = 2.09$ [1.57; 2.60]	0.22 [0.14; 0.34]	0.51 [0.13; 1.80]	0.25 [0.13; 0.47]	NA NA	NA NA
16	$\gamma = 5.11$ [2.20; 6.02]	0.22 [0.16; 0.34]	1.02 [0.49; 1.99]	0.40 [0.11; 0.88]	NA NA	NA NA
<b>True</b>	<b><math>\mu(x) = \text{dist}(x)</math></b>	<b>0.2</b>	<b>2.5</b>	<b>0.7</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
17	$\mu = 0.45$ [-0.25; 0.16]	0.17 [0.08; 0.40]	1.24 [1.73; 2.08]	0.39 [0.24; 0.59]	-2.39 [-2.59; -2.19]	-0.05 [-0.25; 0.15]
18	$\gamma = 1.91$ [0.21; 3.61]	0.17 [0.07; 0.39]	1.17 [0.69; 1.94]	0.36 [0.22; 0.56]	-2.41 [-2.62; -2.21]	-0.11 [-0.32; 0.10]
19	$\mu = 0.44$ [-0.27; 1.15]	0.17 [0.08; 0.40]	1.25 [0.73; 2.07]	0.39 [0.24; 0.59]	NA NA	NA NA
20	$\gamma = 1.59$ [-0.13; 3.32]	0.16 [0.07; 0.39]	1.17 [0.70; 1.93]	0.36 [0.22; 0.56]	NA NA	NA NA
<b>True</b>	<b><math>\mu(x) = \text{dist}(x)</math></b>	<b>0.2</b>	<b>2.5</b>	<b>0.7</b>	<b>0</b>	<b>-2</b>
21	$\mu = 0.12$ [-0.71; 0.94]	0.21 [0.14; 0.33]	1.25 [0.58; 2.69]	0.48 [0.28; 0.80]	-3.30 [-4.45; -2.14]	-1.41 [-1.75; -1.07]
22	$\gamma = 0.37$ [-0.69; 1.42]	0.21 [0.14; 0.32]	1.12 [0.56; 2.19]	0.44 [0.27; 0.70]	-3.25 [-3.78; -2.72]	-1.37 [-0.71; -1.02]
23	$\mu = -0.60$ [-1.12; -0.07]	0.19 [0.12; 0.32]	0.76 [0.39; 1.44]	0.31 [0.16; 0.54]	NA NA	NA NA
24	$\gamma = -1.10$ [-3.14; 0.93]	0.20 [0.13; 0.32]	0.93 [0.47; 1.74]	0.36 [0.20; 0.63]	NA NA	NA NA

## Acknowledgments

This work was supported by national funds through FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia - under projects PREFERENTIAL PTDC/MAT-STA/28243/2017, UIDB/00297/2020 (Centro de Matemática e Aplicações) and UIDB/00006/2020 (Centro de Estatística e Aplicações da Universidade de Lisboa). We thank Lúcia André for help with some practical aspects of the paper.

## References

- [1] Cecconi, L., Grisotto, L., Catelan, D., Lagazio, C., Berrocal, V., Biggeri, A. (2016). Preferential sampling and Bayesian geostatistics: Statistical modeling and examples. *Statistical Methods in Medical Research* **25**, 1224–1243.
- [2] Diggle, P.J., Menezes, R., Su, T.L. (2010). Geostatistical Inference under Preferential Sampling (with discussion). *Journal of Royal Statistics Society C* **59**, 191–232 (RSS read paper).
- [3] Diggle, P.J., Ribeiro Jr., P. (2007). *Model-based Geostatistics*. Springer.
- [4] Dinsdale, D., Salibian-Barrera, M. (2019). Methods for preferential sampling in geostatistics. *Applied Statistics* **68**, 181–198.
- [5] Ferreira, G.S, Gamerman, D. (2005). Optimal Design in Geostatistics under Preferential Sampling. *Bayesian Analysis* **10**, 711–735.
- [6] Held, L., Rue, H. (2005). *Gaussian Markov Random Fields: Theory and Applications*. CRC Press.
- [7] Ho, L.P., Stoyan, D. (2008). Modelling marked point patterns by intensity-marked Cox processes. *Statistics and Probability Letters* **78**, 1194–1199.

- [8] Krainski, E.T., Gómez-Rubio, V., Bakka, H., Lenzi, A., Castro-Camilo, D., Simpson, D., Lindgren, F., Rue, H. (2018). *Advanced Spatial Modeling with Stochastic Partial Differential Equations Using R and INLA*. CRC Press.
- [9] Lindgren, F., Rue, H., Linstöm, J. (2011). An explicit link between Gaussian fields and Gaussian Markov random fields: the stochastic partial differential equation approach. *Journal of the Royal Statistical Society B* **73**, 423–498.
- [10] Pati, D., Reich, B.J., Dunson, D.B. (2011). Bayesian geostatistical modelling with informative sampling locations. *Biometrika* **98**, 35–48.
- [11] Pennino, M.G, Paradinas, I., Illian, J.B., Muñoz, F., Bellido, J.M., López-Quílez, A., Conesa, D. (2018). Accounting for preferential sampling in species distribution models. *Ecology and Evolution* **9**, 653–663.
- [12] Rue, H., Martino, S., Chopin, N. (2009). Approximate Bayesian inference for latent Gaussian models by using integrated nested Laplace approximations. *Journal of the Royal Statistical Society B* **71**, 319–392.
- [13] Rue, H., Riebler, A., Sørbye, S.H., Illian, J.B., Simpson, D.P., Lindgren, F.K. (2017). Bayesian Computing with INLA: A Review. *arXiv: 1604.00860v2*, 19 Set 2016.
- [14] Shaddick, G., Zidek, J.V. (2014). A case study in preferential sampling: long term monitoring of air pollution in the UK. *Spatial Statistics* **9**, 51–65.
- [15] Spiegelhalter, D., Best, N., Carlin, B., Van der Linde, A. (2002). Bayesian Measures of Model Complexity and Fit. *Journal of the Royal Statistical Society B* **64**, 583–639.

- [16] Watanabe, S. (2010). Asymptotic equivalence of Bayes cross-validation and widely applicable information criterion in singular learning theory. *Journal of Machine Learning Research* **11**, 3571–3594.



# Comparação assintótica de duas classes de estimadores de um parâmetro de forma de segunda-ordem

Ivanilda Cabral

Centro de Matemática e Aplicações da Universidade Nova de Lisboa (CMA/UNL) e FCT, Universidade de Cabo Verde, *ivanilda.cabral@docente.unicv.edu.cv*

Frederico Caeiro

Centro de Matemática e Aplicações da Universidade Nova de Lisboa (CMA/UNL) e FCT, Universidade Nova de Lisboa, *fac@fct.unl.pt*

M. Ivette Gomes

Centro de Estatística e Aplicações, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, *ivette.gomes@fc.ul.pt*

**Palavras-chave:** Caudas pesadas; Estimação semi-paramétrica; Leis estáveis para extremos

**Resumo:** O principal objectivo deste trabalho é o de comparar assintoticamente duas classes de estimadores de um *parâmetro de segunda-ordem*  $\rho$ , que controla a velocidade de convergência da sucessão de máximos, linearmente normalizada, para uma variável aleatória limite não-degenerada. Essas classes são pela primeira vez comparadas assintoticamente em níveis ótimos, para modelos com uma cauda direita de tipo-Pareto, uma sub-classe vasta da classe de modelos de caudas pesadas. Sob a validade de condições adequadas, impostas a  $k$ , o número de estatísticas ordinais de topo consideradas na estimação de  $\rho$  através de estimadores  $\hat{\rho}^{\bullet}(k)$ , conseguimos proceder à comparação assintótica, em níveis ótimos, dessas classes de estimadores alternativos do parâmetro de segunda-ordem  $\rho$ .

# 1 Introdução e preliminares

Em *teoria de valores extremos* (EVT, do Inglês, ‘*extreme value theory*’), é usual considerar que um modelo  $F$  tem uma cauda direita pesada, quando  $\bar{F} := 1 - F$ , é uma função de variação regular no infinito, com um índice de variação regular denotado por  $-1/\xi$ ,  $\xi > 0$ . De forma equivalente, com a notação  $F^{\leftarrow}(x) := \inf\{y : F(y) \geq x\}$  para a inversa generalizada da função  $F$ , a função quantil de cauda,  $U(t) := F^{\leftarrow}(1 - 1/t)$ ,  $t \geq 1$ , é de variação regular com índice de variação regular igual a  $\xi$ , i.e.  $\forall x > 0$ ,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{F}(tx)/\bar{F}(t) = x^{-1/\xi} \iff \lim_{t \rightarrow \infty} U(tx)/U(t) = x^{\xi} \quad (1)$$

(ver [1], entre outros, para detalhes sobre variação regular).

O parâmetro de segunda-ordem  $\rho$  ( $\leq 0$ ) mede a velocidade de convergência na condição de primeira-ordem, em (1), e é o parâmetro não-positivo na relação limite,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\ln U(tx) - \ln U(t) - \xi \ln x}{A(t)} = \begin{cases} \frac{x^{\rho}-1}{\rho}, & \text{se } \rho < 0 \\ \ln x, & \text{se } \rho = 0 \end{cases} =: \psi_{\rho}(x), \quad (2)$$

que admitimos ser válida  $\forall x > 0$ , e onde  $|A(t)|$  tem de ser de variação regular no infinito com índice  $\rho$  ([11]).

Num contexto de caudas pesadas, avançamos com uma comparação assintótica de dois estimadores de  $\rho$  alternativos, a classe de estimadores em [10] mais frequentemente usada e também incluída e considerada competitiva em artigos recentes, de entre os quais mencionamos [12, 13, 8, 5, 6], e a classe de estimadores introduzida e estudada em [5]. Trata-se de uma comparação inovadora, mas semelhante à anteriormente desenvolvida para o índice de variação regular  $\xi$ , em (1).

De modo a conseguir obter informação sobre o comportamento assintótico não degenerado de estimadores de  $\rho$ , admitiremos uma condição de terceira-ordem, que mede a velocidade de convergência na



condição de segunda-ordem, em (2), i.e. admitiremos que  $\forall x > 0$ ,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\frac{\ln U(tx) - \ln U(t) - \xi \ln x}{A(t)} - \psi_\rho(x)}{B(t)} = \psi_{\rho+\rho'}(x), \quad (3)$$

com  $\psi_\rho(x)$  definida em (2), e onde  $|B(t)|$  tem de ser de variação regular no infinito com índice de variação regular  $\rho'$  ([6, 7]). Somos então confrontados com este parâmetro de terceira-ordem  $\rho' \leq 0$ . De forma um pouco mais restrictiva, admitiremos que estamos a trabalhar com uma classe de modelos tipo-Pareto, tal que

$$\bar{F}(x) = 1 - F(x) = Cx^{-1/\xi} \{1 + D_1 x^{\rho/\xi} + D_2 x^{2\rho/\xi} + o(x^{2\rho/\xi})\}, \quad (4)$$

quando  $x \rightarrow \infty$ , com  $C > 0$ ,  $D_1, D_2 \neq 0$ ,  $\rho < 0$ , uma sub-classe da classe de modelos de Hall-Welsh [23], com uma função de cauda direita dada por

$$\bar{F}(x) = Cx^{-1/\xi} \{1 + Dx^{\rho/\xi} + o(x^\rho)\},$$

quando  $x \rightarrow \infty$ ,  $C > 0$ ,  $D \neq 0$ ,  $\rho < 0$ .

Para modelos em (4), o limite em (3) é válido, com  $\rho = \rho' < 0$ , e vamos considerar a parametrização, também usada em [4],

$$A(t) =: \xi \beta t^\rho, \quad B(t) = \beta' t^\rho = \frac{\beta' A(t)}{\beta \xi} =: \frac{\eta A(t)}{\xi}, \quad \eta = \frac{\beta'}{\beta}, \quad (5)$$

com  $\beta \neq 0$  e  $\beta' \neq 0$  parâmetros de ‘escala’ de segunda e terceira-ordem, respectivamente.

**Observação 1.1** *Note-se que um dos mais frequentes valores de  $\eta$ , em (5), é  $\eta = 1$ , associado a modelos como o modelo generalizado de Pareto (GP), com função de cauda direita  $\bar{F}(x) = (1 + \xi x)^{-1/\xi}$ ,  $x \geq 0$ ,  $\xi > 0$ , e o modelo de Burr, onde  $\bar{F}(x) = (1 + x^{-\rho/\xi})^{1/\rho}$ ,  $x \geq 0$ ,  $\xi > 0$ . Para o modelo Fréchet, outro dos típicos modelos de cauda pesada, temos  $\eta = 5/3$ . Para mais detalhes, consulte-se [4].*

Na Secção 2 deste artigo introduzimos os estimadores de  $\rho$  em análise. A Secção 3 é dedicada à descrição do comportamento assintótico desses estimadores, sob a validade da condição de terceira-ordem em (4). Na Secção 4, procedemos a uma comparação assintótica dos estimadores de  $\rho$  descritos anteriormente, calculados em níveis ótimos, i.e. níveis  $k_{\min}$  onde o *erro quadrático médio* (MSE, do Inglês ‘*mean square error*’) dos estimadores de  $\rho$  é mínimo. Finalmente, na Secção 5, tecemos algumas considerações finais.

## 2 Estimadores de $\rho$ em estudo

Face a uma amostra aleatória,  $(X_1, \dots, X_n)$ , e com a notação  $(X_{1:n} \leq \dots \leq X_{n:n})$  para a amostra de *estatísticas ordinais* associada, a primeira classe de estimadores de  $\rho$  em consideração é a classe mais simples de entre as introduzidas e estudadas em [10]. Tal como provado em [3], essa classe pode ser parametrizada num parâmetro de controlo  $\tau$  não necessariamente não-negativo, mas real, e temos

$$\hat{\rho}_n^{\text{FAGH}}(k) \equiv \hat{\rho}_n^{\text{FAGH}(\tau)}(k) := - \left| \frac{3(T_n^{(\tau)}(k) - 1)}{T_n^{(\tau)}(k) - 3} \right|, \quad (6)$$

onde

$$T_n^{(\tau)}(k) := \begin{cases} \frac{(M_n^{(1)}(k))^\tau - (M_n^{(2)}(k)/2)^{\tau/2}}{(M_n^{(2)}(k)/2)^{\tau/2} - (M_n^{(3)}(k)/6)^{\tau/3}}, & \text{se } \tau \neq 0, \\ \frac{\ln(M_n^{(1)}(k)) - \frac{1}{2} \ln(M_n^{(2)}(k)/2)}{\frac{1}{2} \ln(M_n^{(2)}(k)/2) - \frac{1}{3} \ln(M_n^{(3)}(k)/6)}, & \text{se } \tau = 0, \end{cases}$$

com

$$M_n^{(j)}(k) := \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k V_{ik}^j, \quad j \geq 1,$$

e

$$V_{ik} := \ln X_{n-i+1:n} - \ln X_{n-k:n}, \quad 1 \leq i \leq k < n.$$

Mais recentemente, Caeiro and Gomes ([5]) consideraram estimadores consistentes de  $\xi > 0$ , definidos por combinações lineares das estatísticas

$$U_i := i(\ln X_{n-i+1:n} - \ln X_{n-i:n}), \quad 1 \leq i \leq k < n,$$

dadas por

$$N_{n,k}^{(\alpha)} := \frac{\alpha}{k} \sum_{i=1}^k \left(\frac{i}{k}\right)^{\alpha-1} U_i, \quad \alpha \geq 1,$$

e propuseram uma nova classe de estimadores de  $\rho$ ,

$$\hat{\rho}_n^{\text{CG}}(k) = \hat{\rho}_n^{\text{CG}(\tau)}(k) := \min \left\{ 0, 1 + \frac{1}{1 - R_{n,k}^{(\tau)}} \right\}, \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad (7)$$

onde,

$$R_{n,k}^{(\tau)} := \begin{cases} \frac{\left(N_{n,k}^{(1)}\right)^{\tau} - \left(N_{n,k}^{(3/2)}\right)^{\tau}}{\left(N_{n,k}^{(3/2)}\right)^{\tau} - \left(N_{n,k}^{(2)}\right)^{\tau}}, & \text{se } \tau \neq 0, \\ \frac{\ln N_{n,k}^{(1)} - \ln N_{n,k}^{(3/2)}}{\ln N_{n,k}^{(3/2)} - \ln N_{n,k}^{(2)}}, & \text{se } \tau = 0. \end{cases}$$

### 3 Comportamento assintótico dos estimadores de $\rho$

Consideremos a notação usual  $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$  para uma variável aleatória normal, com valor médio  $\mu$  e variância  $\sigma^2$ . Podemos pois enunciar o resultado seguinte:

**Teorema 3.1** ([10, 5]) *Sob a validade da condição de segunda-ordem, em (2), com  $\rho < 0$ , e para sucessões intermédias de  $k$ , i.e.*

$$k = k_n \rightarrow \infty, \quad k/n \rightarrow 0, \quad \text{quando } n \rightarrow \infty,$$

*se admitirmos que  $\sqrt{k} A(n/k) \rightarrow \infty$ , quando  $n \rightarrow \infty$ , qualquer das classes de estimadores,  $\hat{\rho}_n^{\text{FAGH}}(k) \equiv \hat{\rho}_n^{\text{FAGH}(\tau)}(k)$  e  $\hat{\rho}_n^{\text{CG}}(k) \equiv$*

$\hat{\rho}_n^{\text{CG}(\tau)}(k)$ ,  $\tau \in \mathbb{R}$ , definidos em (6) e (7), respectivamente, são consistentes para a estimação de  $\rho$ .

Se para além disso admitirmos a validade da condição de terceira-ordem, em (4), e níveis  $k$  tais que  $\sqrt{k} A^2(n/k) \rightarrow \lambda_A$ , finito, existem constantes reais  $b_{\text{FAGH}}$ ,  $b_{\text{CG}}$ , geralmente denotadas por  $b_\bullet$ , e constantes reais positivas,  $\sigma_{\text{FAGH}}$ ,  $\sigma_{\text{CG}}$ , geralmente denotadas por  $\sigma_\bullet$ , tais que

$$\sqrt{k} A(n/k) (\hat{\rho}_n^\bullet(k) - \rho) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{d} \mathcal{N}(\lambda_A b_\bullet, \sigma_\bullet^2).$$

### 3.1 Viés e variâncias assintóticas

O viés e variância assintóticos dos estimadores FAGH, em (6), foram obtidos em [10] (veja-se também [7]), tendo-se:

$$b_{\text{FAGH}} = \frac{\tau\rho(3-\rho)(3-2\rho)(1-2\rho)^2 - 6\rho^2(4\rho^3 - 16\rho^2 + 20\rho - 7)}{12\xi(1-\rho)^2(1-2\rho)^2} + \frac{2\rho\eta(1-\rho)^3}{\xi(1-2\rho)^3}, \quad (8)$$

$$\sigma_{\text{FAGH}} = \frac{\xi(1-\rho)^3 \sqrt{2\rho^2 - 2\rho + 1}}{|\rho|}. \quad (9)$$

O viés e a variância assintóticos dos estimadores CG, em (7), foram calculados explicitamente em [5]:

$$b_{\text{CG}} \equiv b_{\text{CG}}(\tau) = \frac{(\tau-1)\rho}{2\xi} + \frac{\rho\eta(2-\rho)(3-2\rho)}{\xi(1-2\rho)(3-4\rho)}, \quad (10)$$

$$\sigma_{\text{CG}} = \frac{\xi(1-\rho)(2-\rho)(3-2\rho)\sqrt{4\rho^2 - 4\rho + 7}}{(\sqrt{120}|\rho|)}. \quad (11)$$

**Observação 3.2** *Relativamente às variâncias assintóticas,  $\sigma_{\text{FAGH}} < \sigma_{\text{CG}}$  só para valores pequenos de  $|\rho|$ , que são contudo os mais relevantes quando consideramos estimação de viés reduzido de parâmetros de primeira-ordem, como o índice de valores extremos (EVI, do Inglês ‘extreme value index’). Para mais detalhes, veja-se [5] e [6].*

**Observação 3.3** *Note-se que  $b_{\text{FAGH}}(\tau) = 0$  em  $\tau = \tau_0^{\text{FAGH}}$ , dado por*

$$\tau_0^{\text{FAGH}} \equiv \tau_0^{\text{FAGH}}(\eta, \rho) = \frac{6\rho(4\rho^3 - 16\rho^2 + 20\rho - 7)(1 - 2\rho) - 24\eta(1 - \rho)^5}{(1 - 2\rho)^3(3 - \rho)(3 - 2\rho)}, \quad (12)$$

*com  $\eta$  definido em (5). Também  $b_{\text{CG}}(\tau) = 0$  em  $\tau = \tau_0^{\text{CG}}$  tal que*

$$\tau_0^{\text{CG}} \equiv \tau_0^{\text{CG}}(\eta, \rho) = 1 - \frac{2\eta(2 - \rho)(3 - 2\rho)}{(1 - 2\rho)(3 - 4\rho)}. \quad (13)$$

*Estes factos foram já referidos em [6], onde foi abordado o problema de redução de viés, em conjunto com a escolha adaptativa dos parâmetros de controlo em jogo.*

### 3.2 O teorema principal

Com base na investigação desenvolvida em [5] para os estimadores  $\hat{\rho}_n^{\text{CG}}(k)$  em (7), e em [10] para os estimadores  $\hat{\rho}_n^{\text{FAGH}}(k)$ , em (6), mas com alguns cálculos adicionais, relacionados com o viés assintótico dos estimadores em análise, descritos na Secção 3.1, enunciamos o teorema seguinte.

**Teorema 3.4** ([10, 5]) *Sob a validade da condição de terceira-ordem considerada no Teorema 3.1, com  $U_k^\bullet$  variáveis aleatórias assintoticamente normal padrão, e com  $b_{\text{FAGH}}$ ,  $\sigma_{\text{FAGH}}$ ,  $b_{\text{CG}}$  e  $\sigma_{\text{CG}}$  respectivamente definidos em (8), (9), (10) e (11), podemos garantir que*

$$\hat{\rho}_n^\bullet(k) - \rho \stackrel{d}{=} \frac{\sigma_\bullet U_k^\bullet}{\sqrt{k} A(n/k)} + b_\bullet A(n/k)(1 + o_{\mathbb{P}}(1)). \quad (14)$$

## 4 Comparação assintótica dos estimadores em níveis ótimos

Vamos em seguida proceder à comparação assintótica dos estimadores  $\hat{\rho}_n^{\text{FAGH}}(k)$  e  $\hat{\rho}_n^{\text{CG}}(k)$ , respectivamente definidos em (6) e (7), e geralmente denotados por  $\hat{\rho}_n^\bullet(k)$ , em níveis ótimos, i.e. níveis  $k = k_{\min}^\bullet$

onde o MSE assintótico de  $\hat{\rho}_n^\bullet(k)$  é mínimo. Esta comparação é feita de modo semelhante à delineada em [22, 15, 17, 19, 16, 14], para estimadores clássicos do EVI, em [18] para estimadores de máxima verosimilhança do EVI com *viés reduzido e variância mínima* (MVRB, do Inglês ‘*minimum-variance reduced-bias*’), e em [4] e mais recentemente em [2], para conjuntos diversos de estimadores MVRB do EVI.

Para um estimador MVRB do EVI, genericamente denotado por  $\hat{\xi}_R(k)$ , e sob a validade da condição de terceira-ordem considerada nos teoremas anteriores, tem-se um MSE *assintótico* (AMSE, do Inglês ‘*asymptotic MSE*’) dado por

$$\text{AMSE}_R(k) = \frac{\sigma_R^2}{k} + b_R^2 A^4(n/k).$$

Por outro lado, com base na distribuição assintótica de  $\hat{\rho}_n^\bullet(k)$ , em (14), o seu AMSE é dado por

$$\text{AMSE}_\bullet(k) = \frac{\sigma_\bullet^2}{k A^2(n/k)} + b_\bullet^2 A^2(n/k),$$

o que realça a semelhança entre o AMSE destes estimadores de  $\rho$  e o AMSE de estimadores do EVI. Sob a validade do contexto assumido, podemos escrever

$$\begin{aligned} \text{AMSE}_\bullet(k) &= \frac{\sigma_\bullet^2}{k \xi^2 \beta^2 (n/k)^{2\rho}} + b_\bullet^2 \xi^2 \beta^2 (n/k)^{2\rho} \\ &= \frac{1}{\xi^2 \beta^2} (\sigma_\bullet^2 n^{-2\rho} k^{2\rho-1} + b_\bullet^2 \xi^4 \beta^4 n^{2\rho} k^{-2\rho}). \end{aligned}$$

O valor  $k_{\min}^\bullet := \arg \min_k \text{AMSE}_\bullet(k)$  é pois solução em  $k$  de

$$-(1-2\rho)\sigma_\bullet^2 n^{-2\rho} k^{2\rho-2} + (-2\rho)b_\bullet^2 \xi^4 \beta^4 n^{2\rho} k^{-2\rho-1} = 0,$$

e obtemos

$$\begin{aligned} k_{\min}^{\bullet} &:= \arg \inf_k \text{AMSE}_{\bullet}(k) \\ &= \left( \frac{\sigma_{\bullet}^2(1-2\rho)}{b_{\bullet}^2 \xi^4 \beta^4 (-2\rho)} \right)^{1/(1-4\rho)} n^{-4\rho/(1-4\rho)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Introduzamos a notação  $\hat{\rho}_{n0}^{\bullet} := \hat{\rho}_n^{\bullet}(k_{\min}^{\bullet})$ , com  $k_{\min}^{\bullet}$  definido em (15). Estamos agora interessados no cálculo de

$$\text{AMSE}_{\bullet}(k_{\min}^{\bullet}) = \frac{\sigma_{\bullet}^2}{k_{\min}^{\bullet} \xi^2 \beta^2 (n/k_{\min}^{\bullet})^{2\rho}} + b_{\bullet}^2 \xi^2 \beta^2 (n/k_{\min}^{\bullet})^{2\rho}.$$

Consequentemente, e com a notação  $\text{AMSE}(\hat{\rho}_{n0}^{\bullet}) := \text{AMSE}_{\bullet}(k_{\min}^{\bullet})$ , podemos garantir que sempre que  $b_{\bullet} \neq 0$ , existe uma função  $\varphi(n) = \varphi(n, \xi, \beta, \rho)$  (veja-se [22], para detalhes), tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(n) \text{AMSE}(\hat{\rho}_{n0}^{\bullet}) = (\sigma_{\bullet}^2)^{-\frac{2\rho}{1-4\rho}} (b_{\bullet}^2)^{\frac{1-2\rho}{1-4\rho}} =: \text{LMSE}(\hat{\rho}_{n0}^{\bullet}),$$

do Inglês *limiting* MSE. É então sensato considerar a seguinte definição de *eficiência assintótica relativa* (AREFF, do Inglês ‘*asymptotic root efficiency*’).

**Definição 4.1** *Dados dois estimadores não-centrados de  $\rho$ ,  $\hat{\rho}_n^{(1)}(k)$  e  $\hat{\rho}_n^{(2)}(k)$ , para os quais é válida uma representação assintótica do tipo da obtida em (14), com constantes  $(\sigma_1, b_1)$  e  $(\sigma_2, b_2)$ ,  $b_1, b_2 \neq 0$ , respectivamente, ambos calculados nos seus níveis ótimos, a AREFF de  $\hat{\rho}_{n0}^{(1)}$  relativamente a  $\hat{\rho}_{n0}^{(2)}$  é*

$$\text{AREFF}_{1|2} := \sqrt{\frac{\text{LMSE}(\hat{\rho}_{n0}^{(2)})}{\text{LMSE}(\hat{\rho}_{n0}^{(1)})}} = \left( \left( \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right)^{-4\rho} \left| \frac{b_2}{b_1} \right|^{2(1-2\rho)} \right)^{\frac{1}{1-4\rho}},$$

função de  $(\rho, \eta)$ , em (5) e de  $\tau$  em (6) e (7).

No que concerne a comparação assintótica em níveis ótimos de  $\hat{\rho}_{n0}^{\text{FAGH}(\tau)}$  e  $\hat{\rho}_{n0}^{\text{CG}(\tau)}$  para um  $\tau$  fixo, começamos por apresentar na Figura 1, os valores de  $\text{AREFF}_{\text{FAGH}(\tau)|\text{CG}(\tau)}$  para  $\tau = -1$  (o valor sugerido para  $\text{CG}(\tau)$ , em [5]). A vasta e relevante região de pontos do plano  $(\eta, \rho)$  onde  $\text{AREFF}_{\text{FAGH}(\tau)|\text{CG}(\tau)} > 1$ , parece favorecer o estimador FAGH de  $\rho$ .

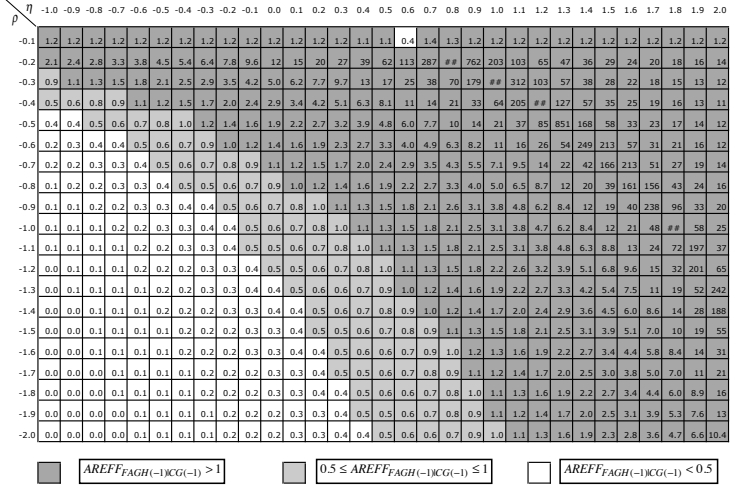


Figura 1: Valores de  $\text{AREFF}_{\text{FAGH}(\tau)|\text{CG}(\tau)}$  para  $\tau = -1$

Em seguida, nas Figuras 2 e 3, a mesma medida  $\text{AREFF}$  é apresentada, respectivamente para  $\tau = 0$  e  $\tau = 1$  (os valores frequentemente sugeridos na literatura para  $\text{FAGH}(\tau)$  para  $|\rho| \leq 1$  e  $|\rho| > 1$ , respectivamente). Estes indicadores parecem estar mais uma vez levemente a favor dos estimadores FAGH de  $\rho$ .



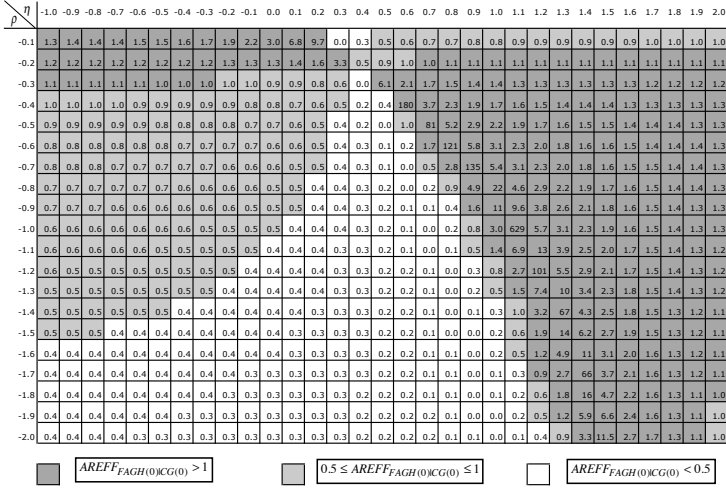


Figura 2: Valores de  $AREFF_{FAGH(\tau)|CG(\tau)}$  para  $\tau = 0$

## 5 Algumas observações finais

Para a comparação assintótica de  $\hat{\rho}_{n0}^{FAGH(\tau_0^{FAGH})}$  e  $\hat{\rho}_{n0}^{CG(\tau_0^{CG})}$  teríamos de avançar com um contexto de quarta-ordem, tópico ainda em desenvolvimento. Na prática, é no entanto sensato proceder a uma escolha adequada do valor de  $\tau$  perto quer de  $\tau_0^{FAGH}$  quer de  $\tau_0^{CG}$ , respectivamente definidos em (12) e (13). Para proceder a essa escolha podemos usar qualquer algoritmo heurístico de estabilidade da trajectória amostral, tal como o usado em [6], semelhante em espírito aos usados em [9] para estimação de quantis elevados e em [20, 21] para a estimação do EVI. Devido ao facto de se ter  $\eta > 0.5$  para a maior parte dos modelos usados nas aplicações (veja-se **Observação 1.1**), podemos dizer que para um  $\tau$  fixo, adequadamente escolhido,  $\hat{\rho}_{n0}^{FAGH(\tau)}$  ultrapassa  $\hat{\rho}_{n0}^{CG(\tau)}$ , em níveis ótimos, numa região vasta

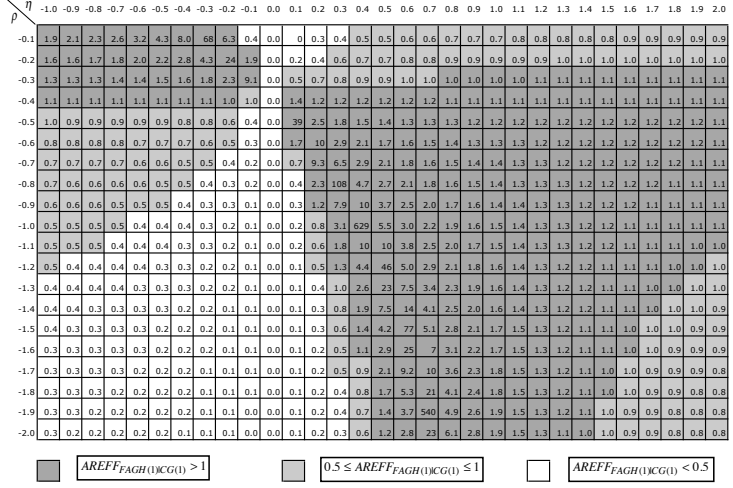


Figura 3: Valores de  $AREFF_{FAGH(\tau)|CG(\tau)}$  para  $\tau = 1$

do plano- $(\eta, \rho)$ , e estamos neste momento a favor da utilização dos estimadores-FAGH de  $\rho$ , definidos em (6).

## Agradecimentos

Investigação financiada por Fundos Nacionais através da **FCT**–Fundação para a Ciência e a Tecnologia, projectos UIDB/MAT 0029 /2020 (CMA/UNL) e UIDB/MAT/00006/2020 (CEA/UL).

## Referências

- [1] Bingham, N.H., Goldie, C.M., Teugels, J.L. (1987). *Regular Variation*. Cambridge Univ. Press.

- [2] Cabral I., Caeiro, F., Gomes M.I. (2020). On a comparison of several classical estimators of the extreme value index. *Comm. Statist.—Theory and Methods*. Accepted, <https://doi.org/10.1080/03610926.2020.1746970>
- [3] Caeiro, F., Gomes, M.I. (2006). A new class of estimators of the ‘scale’ second order parameter. *Extremes* 9, 193–211.
- [4] Caeiro, F., Gomes, M.I. (2011). Asymptotic comparison at optimal levels of reduced-bias extreme value index estimators. *Statistica Neerlandica* 65:4, 462–488.
- [5] Caeiro, F., Gomes, M.I. (2014). A semi-parametric estimator of a shape second order parameter. In A. Pacheco *et al.* (eds.), *New Advances in Statistical Modeling and Application*. Studies in Theoretical and Applied Statistics, Springer-Verlag, Berlin and Heidelberg, 137–144.
- [6] Caeiro, F., Gomes, M.I. (2015). Bias reduction in the estimation of a shape second-order parameter of a heavy tailed model. *J. Statist. Comput. and Simul.* 85:17, 3405–3419.
- [7] Caeiro, F., Gomes, M.I., Henriques-Rodrigues, L. (2009). Reduced-bias tail index estimators under a third order framework. *Commun. Statist.—Theory and Methods* 38:7, 1019–1040.
- [8] Ciuperca, G., Mercadier, C. (2010). Semi-parametric estimation for heavy tailed distributions. *Extremes* 13:1, 55–87.
- [9] Figueiredo, F., Gomes, M.I., Henriques-Rodrigues, L., Miranda, C. (2012). A computational study of a quasi-PORT methodology for VaR based on second-order reduced-bias estimation. *J. Statist. Comput. and Simul.* 82:4, 587–602.
- [10] Fraga Alves, M.I., Gomes, M.I., Haan, L. de (2003). A new class of semi-parametric estimators of the second order parameter. *Portugaliae Mathematica* 60:2, 193–214.
- [11] Geluk, J., Haan, L. de (1987). *Regular Variation, Extensions and Tauberian Theorems*. CWI Tract 40, Center for Mathematics and Computer Science, Amsterdam, Netherlands.
- [12] Goegebeur, Y., Beirlant, J., de Wet, T. (2008). Linking Pareto-tail kernel goodness-of-fit statistics with tail index at optimal threshold and second order estimation. *Revstat* 6:1, 51–69.

- [13] Goegebeur, Y., Beirlant, J., de Wet, T. (2010). Kernel estimators for the second order parameter in extreme value statistics. *J. Statist. Planning and Inference* 140:9, 2632–2652.
- [14] Gomes, M.I., Henriques-Rodrigues, L. (2010). Comparison at optimal levels of classical tail index estimators: a challenge for reduced-bias estimation? *Discussiones Mathematica: Probability and Statistics* 30:1, 35–51.
- [15] Gomes, M.I., Martins, M.J. (2001). Alternatives to Hill’s estimator – asymptotic versus finite sample behaviour. *J. Statist. Planning and Inference* 93, 161–180.
- [16] Gomes, M.I., Neves, C. (2008). Asymptotic comparison of the mixed moment and classical extreme value index estimators. *Statistics and Probability Letters* 78:6, 643–653.
- [17] Gomes, M.I., Miranda, C., Pereira, H. (2005). Revisiting the role of the Jackknife methodology in the estimation of a positive extreme value index. *Comm. in Statistics – Theory and Methods* 34, 1–20.
- [18] Gomes, M.I., Martins, M.J., Neves, M. (2007a). Improving second order reduced bias extreme value index estimation. *Revstat* 5:2, 177–207.
- [19] Gomes, M.I., Miranda, C., Viseu, C. (2007b). Reduced bias extreme value index estimation and the Jackknife methodology, *Statistica Neerlandica* 61:2, 243–270.
- [20] Gomes, M.I., Henriques-Rodrigues, L., Miranda, C. (2011). Reduced-bias location-invariant extreme value index estimation: a simulation study. *Comm.Statist.-Simul. and Comput.* 40:3, 424–447.
- [21] Gomes, M.I., Henriques-Rodrigues, L., Fraga Alves, M.I., Manjunath, B.G. (2013). Adaptive PORT-MVRB estimation: an empirical comparison of two heuristic algorithms. *J. Statist. Comput. and Simul.* 83:6, 1129–1144.
- [22] Haan, L. de, Peng, L. (1998). Comparison of tail index estimators. *Statistica Neerlandica* 52, 60–70.
- [23] Hall, P., Welsh, A.H. (1985). Adaptive estimates of parameters of regular variation. *Ann. Statist.* 13, 331–341.

# Modelos paramétricos flexíveis para acontecimentos recorrentes

Ivo Sousa-Ferreira

Departamento de Estatística e Investigação Operacional, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Portugal e CEAUL – Centro de Estatística e Aplicações, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Portugal, *ivo.ferreira@staff.uma.pt*

Cristina Rocha

Departamento de Estatística e Investigação Operacional, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Portugal e CEAUL – Centro de Estatística e Aplicações, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Portugal, *cmrocha@fc.ul.pt*

Ana Maria Abreu

Departamento de Matemática, Faculdade de Ciências Exatas e da Engenharia, Universidade da Madeira, Portugal e Centro de Investigação em Matemática e Aplicações, Portugal, *abreu@staff.uma.pt*

**Palavras-chave:** Acontecimentos recorrentes; *Gap times*; Modelos de sobrevivência paramétricos; *Software R*; *Spline* cúbico restrito

**Resumo:** Neste trabalho, são propostas duas classes de modelos paramétricos para analisar o tempo entre acontecimentos recorrentes, utilizando *splines* cúbicos restritos. As classes de modelos diferem no modo como se lida com a dependência entre acontecimentos. Além disso, ambas as classes são caracterizadas por uma transformação da função de sobrevivência, através da função de ligação log-log ou –logit. De forma a ilustrar a metodologia proposta, efetua-se uma aplicação a um conjunto de dados reais sobre a recorrência de cancro da bexiga. Os resultados revelam que o uso de *splines* cúbicos restritos permite modelar de forma flexível e adequada o tempo entre acontecimentos sucessivos.

# 1 Introdução

Em estudos longitudinais é frequente que um certo acontecimento possa ocorrer mais do que uma vez para o mesmo indivíduo como, por exemplo, em estudos biomédicos sobre recaídas de uma certa doença. Para analisar dados relativos a acontecimentos recorrentes, as extensões do modelo semiparamétrico de Cox constituem a classe de modelos que mais tem sido aplicada [8]. A utilização de modelos paramétricos tem sido menos frequente, eventualmente devido ao facto de as distribuições disponíveis na maioria dos programas de *software* estatístico não serem, em geral, suficientemente flexíveis para captar a forma como o risco evolui ao longo do tempo. Nesse sentido, para analisar o tempo até à ocorrência de um único acontecimento, Royston e Parmar [6] propuseram modelar a transformação log-log da função de sobrevivência, ou a transformação  $-\logit$  da função de sobrevivência, como uma função *spline* cúbica restrita do logaritmo do tempo, quando os efeitos das covariáveis são expressos na escala de riscos proporcionais (PH), ou na escala de possibilidades proporcionais (PO), respetivamente.

Na análise de acontecimentos recorrentes, um dos maiores constrangimentos é a existência de correlação intra-individual, em virtude de serem registadas várias observações para um mesmo indivíduo. De acordo com Box-Steffensmeier e De Boef [1], este tipo de correlação pode ser proveniente de duas fontes: i) dependência entre acontecimentos, ou seja, a ocorrência de um acontecimento afeta o risco de ocorrência dos acontecimentos subsequentes; e ii) heterogeneidade individual não observada, a qual se deve à existência de fatores de risco desconhecidos ou não mensuráveis. Neste trabalho, aborda-se apenas a primeira fonte de correlação.

Na literatura, têm sido consideradas duas abordagens distintas para lidar com a dependência entre acontecimentos (veja-se [1, 4]). Uma abordagem consiste em considerar que o risco de ocorrência do acontecimento seguinte pode ser caracterizado por uma função do número acumulado de acontecimentos anteriores; a outra baseia-se em estratificar os indivíduos por acontecimento. Como não existe consenso

acerca da melhor abordagem [1, 8], exploram-se aqui estas duas possibilidades.

Neste trabalho, são propostas duas classes de modelos paramétricos flexíveis (com e sem estratificação) para analisar os intervalos de tempo (*gap times*) entre acontecimentos recorrentes, as quais diferem no modo como se lida com a dependência entre acontecimentos. Ambas as classes podem ser vistas como extensões dos modelos de Royston e Parmar [6] para acontecimentos recorrentes, no sentido em que também se recorre ao uso de funções *spline* cúbicas restritas para modelar uma certa transformação da função de sobrevivência. De modo a exemplificar a aplicação dos modelos propostos, são utilizados dados reais sobre recorrências de tumores na bexiga (*Bladder cancer study* [2]). Quanto à restante organização do artigo, a Secção 2 destina-se a formular as novas classes de modelos, a Secção 3 a salientar alguns dos resultados que foram obtidos na aplicação ao conjunto de dados referido e a Secção 4 a tecer alguns comentários finais e a propor trabalho futuro.

## 2 Metodologia

Um *spline* cúbico é uma função suave definida por um conjunto de funções polinomiais de terceiro grau, as quais são unidas num determinado número pré-definido de pontos. O primeiro e o último desses pontos são designados por nós limite e os restantes por nós internos. Quando este *spline* é restrito a ser linear para além dos nós limite, é designado por *spline* cúbico restrito (SCR).

Para um número  $m$  (pré-definido) de nós internos, representados por  $r_1 < \dots < r_m$ , com nós limite  $r_{\min} < r_1$  e  $r_{\max} > r_m$ , a função SCR de uma observação  $x$  pode ser escrita como

$$s(x; \gamma) = \gamma_0 + \gamma_1 x + \gamma_2 v_1(x) + \dots + \gamma_{m+1} v_m(x), \quad (1)$$

onde  $\gamma = (\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_{m+1})'$  é o vetor de parâmetros e  $v_l(\cdot)$  é a  $l$ -ésima função base. A complexidade/flexibilidade da curva resultante é regulada pelo número de graus de liberdade (g.l.), que é dado

por g.l. =  $m + 1$ . Por convenção, g.l. = 1 significa que não são especificados quaisquer nós internos, donde  $s(x; \gamma) = \gamma_0 + \gamma_1 x$ .

Antes de proceder à formulação dos modelos, importa introduzir alguma notação adicional. Admita-se que existem  $n$  indivíduos em estudo e que cada um deles pode sofrer no máximo  $K$  recorrências de um certo acontecimento. Seja  $T_{ik}$  a variável aleatória (v.a.) que representa o tempo desde o início do estudo até à ocorrência do  $k$ -ésimo acontecimento ( $i = 1, \dots, n$  e  $k = 1, \dots, K$ ). Define-se a v.a.  $Y_{ik} = T_{ik} - T_{i,k-1}$  como sendo o tempo entre dois acontecimentos consecutivos (*gap time*), com  $0 \equiv T_{i0} < T_{i1} < \dots < T_{iK}$ . Por último, denote-se por  $\mathbf{z}_{ik} = (z_{ik1}, \dots, z_{ikp})'$  o vetor de  $p$  covariáveis referente ao  $k$ -ésimo acontecimento associado ao  $i$ -ésimo indivíduo e  $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)'$  o correspondente vetor de coeficientes de regressão.

## 2.1 Novas classes de modelos paramétricos flexíveis

As duas classes de modelos aqui propostas são caracterizadas por uma transformação da função de sobrevivência, através de uma função de ligação  $g(\cdot)$ . Para o  $i$ -ésimo indivíduo em estudo, a classe de modelos flexíveis não estratificados (FNE) é definida por

$$\begin{aligned} g[S(y; \mathbf{z}_{ik})] &= g[S_0(y)] + \log \rho(k; \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\beta}' \mathbf{z}_{ik} \\ &= s(\log y; \boldsymbol{\gamma}) + \log \rho(k; \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\beta}' \mathbf{z}_{ik}, \quad y > 0, \end{aligned} \quad (2)$$

e a classe de modelos flexíveis estratificados (FE) por

$$\begin{aligned} g[S(y; \mathbf{z}_{ik})] &= g[S_{0k}(y)] + \boldsymbol{\beta}' \mathbf{z}_{ik} \\ &= s_k(\log y; \boldsymbol{\gamma}_k) + \boldsymbol{\beta}' \mathbf{z}_{ik}, \quad y > 0, \end{aligned} \quad (3)$$

onde  $S_0(y)$  representa a função de sobrevivência subjacente comum a todos os acontecimentos,  $S_{0k}(y)$  é a função de sobrevivência subjacente específica do acontecimento  $k$ ,  $\rho(k; \boldsymbol{\theta}) \geq 0$  é uma função, parametrizada por um vetor  $\boldsymbol{\theta}$ , que visa representar o efeito da acumulação de acontecimentos,  $s(\log y; \boldsymbol{\gamma})$  é a função SCR dada por (1), e  $s_k(\log y; \boldsymbol{\gamma}_k)$  é a função SCR específica do acontecimento  $k$ , onde



$\gamma_k = (\gamma_{0k}, \gamma_{1k}, \dots, \gamma_{m_k+1,k})'$ . Note-se que a estratificação por acontecimento permite que o número de nós internos em  $s_k(\log y; \gamma_k)$  possa ser diferente nos vários estratos e, por isso, designa-se por  $m_k$  o número de nós internos específicos do acontecimento  $k$ , para  $k = 1, \dots, K$ . Deste modo, está-se a admitir que os *gap times* pertencentes a diferentes estratos podem ser modelados por distribuições subjacentes distintas. Por conseguinte, é necessário adaptar a notação da função SCR (1), de modo a acomodar funções base específicas,  $v_{l,k}(\cdot)$ , assim como nós limite e internos específicos,  $r_{\min,k} < r_{1,k} < \dots < r_{m,k} < r_{\max,k}$ .

Na especificação da função  $g(\cdot)$ , considerou-se as funções de ligação log-log e  $-\logit$  que permitem obter modelos PH e PO, respetivamente. Seja  $\eta(y; \mathbf{z}_{ik}) = g[S(y; \mathbf{z}_{ik})]$  e represente-se por  $G(\cdot) = g^{-1}(\cdot)$  a inversa da função de ligação. Para qualquer uma das classes, as funções de sobrevivência e de risco podem ser calculadas por

$$S(y; \mathbf{z}_{ik}) = G[\eta(y; \mathbf{z}_{ik})],$$

e

$$h(y; \mathbf{z}_{ik}) = \frac{\partial \eta(y; \mathbf{z}_{ik})}{\partial y} \exp[\eta(y; \mathbf{z}_{ik})] \overline{G}[\eta(y; \mathbf{z}_{ik})],$$

respetivamente, onde a função  $\overline{G}(\cdot)$  é definida de acordo com a função de ligação considerada. A Tabela 1 sintetiza a informação associada a cada função de ligação.

Tabela 1: Funções de ligação e classificação do modelo resultante.

	$g(S)$	$G(\eta)$	$\overline{G}(\eta)$	Classificação
log-log	$\log(-\log S)$	$\exp(-\exp \eta)$	1	PH
$-\logit$	$\log(S^{-1} - 1)$	$(1 + \exp \eta)^{-1}$	$G(\eta)$	PO

Na classe de modelos FNE (2), é ainda necessário especificar a função  $\rho(\cdot)$ . Neste ponto, decidiu-se considerar a função utilizada por Louzada-Neto [4], que consiste na parametrização  $\rho(k; \theta) = \theta^{k-1}$ ,  $\theta > 0$ . Uma vez que  $k$  toma os valores  $1, 2, \dots, K$ , esta função é

decrecente para  $0 < \theta \leq 1$  e crescente para  $\theta > 1$ . Esta parametrização tem a vantagem de permitir uma interpretação direta do efeito do número acumulado de acontecimentos, pois  $k$  pode ser visto como uma covariável e  $\theta$  como o seu efeito.

A localização e o número de nós internos da função SCR são baseados na abordagem de Royston e Parmar [6]. Assim, considera-se que os nós limite são o mínimo e o máximo do logaritmo dos *gap times* não censurados e que os nós internos são posicionados em quantis obtidos com base nessas observações. Royston e Parmar [6] referem que a localização dos nós não é muito relevante, em virtude de pouco alterar a forma da curva ajustada. Para a classe de modelos FNE (2), a localização dos nós tem em conta os *gap times* correspondentes a todos os acontecimentos, enquanto para a classe de modelos FE (3), os *gap times* considerados são apenas os do respetivo estrato.

A seleção do número de nós internos em (2) é feita com base no valor do critério de informação de Akaike (AIC) dos modelos ajustados com 0, 1, 2 e 3 nós, mas também examinando informalmente o ganho resultante ao adicionar cada nó. De facto, Royston e Parmar [6] referem que o critério de Akaike não deve ser aplicado mecanicamente, pois é importante analisar se o ganho resultante da inclusão de um novo parâmetro é suficientemente relevante para justificar um aumento no grau de complexidade do modelo. Assim, também se pretende evitar o sobre-ajustamento do modelo aos dados. Já em (3) essa decisão não é tão simples, por ser necessário indicar os números  $m_1, m_2, \dots, m_K$  de nós internos específicos. Neste caso, sugere-se que essa escolha seja feita de forma isolada, ou seja, ajustando um modelo de Royston e Parmar por cada estrato de acontecimento. Após este procedimento, efetua-se o ajustamento do modelo estratificado no seu todo. Importa referir que, quando o número de nós internos é zero (isto é,  $m = 0$  ou  $m_k = 0, \forall k$ ), os *gap times* são modelados através das distribuições de Weibull ou log-logística, consoante se considere a função de ligação log-log ou -logit, respetivamente. O método de inferência é baseado na teoria de máxima verosimilhança, assumindo que os *gap times* são condicionalmente independentes, dadas as covariáveis observadas. Considere-se uma amostra

em que a cada indivíduo  $i$  corresponde o vetor observado  $(y_{ik}, \delta_{ik}, z_{ik})$ , onde  $y_{ik}$  é o *gap time* observado e  $\delta_{ik}$  denota a variável indicatriz que caracteriza o estado do  $i$ -ésimo indivíduo relativamente ao acontecimento  $k$ . Além disso, admita-se que as observações estão sujeitas a um mecanismo de censura à direita e que a censura é não informativa. Para ambas as classes de modelos, os estimadores de máxima verosimilhança dos vários parâmetros do modelo podem ser obtidos maximizando o logaritmo da função de verosimilhança dado por  $\ell = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \{\delta_{ik} \log h(y_{ik}; z_{ik}) + \log S(y_{ik}; z_{ik})\}$ , onde  $h(y_{ik}; z_{ik})$  e  $S(y_{ik}; z_{ik})$  são, respetivamente, as funções de risco e de sobrevivência do modelo definido em (2) ou em (3).

Embora este método assegure a obtenção de estimadores consistentes e assintoticamente normais, a existência de correlação intra-individual faz com que o estimador usual da matriz de covariância não seja válido para realizar inferência. Na verdade, esta é uma abordagem *naïve* que usualmente deflaciona o erro padrão, originando resultados demasiado otimistas [8]. Deve-se então recorrer a um estimador mais robusto, como seja o estimador *jackknife* “one-step” [3]. Este estimador é assintoticamente equivalente ao bem conhecido estimador *sandwich*, sendo mais fácil de programar computacionalmente. A implementação dos modelos foi desenvolvida no R [5], versão 4.0.2, recorrendo ao método de otimização de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno. Como o *package flexsurv* permite ajustar o modelo de Royston e Parmar [6], optou-se por também adaptar algumas das suas funcionalidades ao contexto dos acontecimentos recorrentes.

### 3 Aplicação à recorrência de cancro da bexiga

Com o intuito de ilustrar a metodologia proposta, considera-se o conjunto de dados sobre a recorrência de tumores na bexiga disponível no *package survival*, o qual foi obtido no ensaio clínico aleatorizado descrito em [2]. Em particular, reanalisa-se o conjunto de dados *bladder2*, relativo às 4 primeiras recorrências. Um dos princi-

país interesses do estudo é a estimação do efeito do tratamento com tiotepa sobre o tempo até à recidiva tumoral. Sempre que em cada visita clínica eram observados novos tumores, estes eram removidos. Os dados representam os *gap times* (em meses) até ao aparecimento de um novo tumor na bexiga em 85 indivíduos, dos quais 38 foram tratados com tiotepa e 47 receberam um placebo. O tempo máximo em estudo foi 59 meses. No total, 8, 3, 2 e 5 indivíduos do grupo de tratamento e 10, 4, 6 e 9 indivíduos do grupo de controlo, sofreram exatamente 1, 2, 3 e 4 acontecimentos, respetivamente. A correspondente percentagem de observações censuradas por acontecimento foi de 44.7%, 37.0%, 18.5% e 30.0%. A título ilustrativo, foram incorporadas duas covariáveis nos modelos: tratamento (1: placebo e 2: tiotepa) e número inicial de tumores.

Ao considerar as classes de modelos FNE (2) e FE (3), pretende-se selecionar o modelo mais apropriado, tanto na escala PH como na PO. Para isso, a escolha do número de nós internos é efetuada de acordo com o procedimento descrito na Secção 2.1. Ao ajustar os modelos FNE na escala PH (modelos FNE-PH) com 0, 1, 2 e 3 nós internos, obtiveram-se os valores do AIC de 887.4, 856.9, 854.5 e 855.9, respetivamente. Assim, o modelo FNE-PH com  $m = 2$  nós internos revelou-se o mais apropriado. No caso dos modelos FE-PH, efetua-se uma escolha preliminar dos números de nós internos específicos ajustando um modelo de Royston e Parmar para cada um dos 4 estratos, variando o número de nós internos de 0 a 3. Os valores do AIC destes modelos ajustados isoladamente ao primeiro (412.1, 401.8, 396.2 e 397.7), segundo (240.1, 236.2, 235.6 e 235.2), terceiro (145.2, 142.2, 144.1 e 146.1) e quarto (94.7, 92.4, 90.0 e 91.2) estratos, indicam que o mais adequado é considerar o modelo FE-PH com  $m_1 = 2$ ,  $m_2 = 2$ ,  $m_3 = 1$  e  $m_4 = 2$  nós internos específicos. Repare-se que, no caso do segundo estrato, embora o valor do AIC do modelo com 3 nós internos seja ligeiramente inferior ao do modelo com 2 nós internos, o ganho resultante é negligenciável, sendo então preferível escolher o número de nós internos associado ao modelo mais simples. Contudo, após ajustar o referido modelo FE-PH, verificou-se que este apresenta um valor do AIC igual a 859.4, que

Tabela 2: Estimativas dos parâmetros do modelo FNE-PH mais adequado aos dados sobre a recorrência de cancro da bexiga.

Parâmetro	Estimativa	$\widehat{EP}$	$\widehat{EP}_r$	IC a 95%	valor- $p$
$\gamma_0$	-4.965	0.614	0.535	(-6.014, -3.916)	—
$\gamma_1$	2.789	0.494	0.612	(1.591, 3.988)	—
$\gamma_2$	0.498	0.193	0.230	(0.047, 0.948)	—
$\gamma_3$	-0.202	0.132	0.141	(-0.478, 0.075)	—
$\theta$	1.364	0.126	0.137	(1.096, 1.632)	0.008
$\beta_1$	-0.318	0.204	0.235	(-0.778, 0.142)	0.175
$\beta_2$	0.151	0.049	0.058	(0.037, 0.265)	0.009

é superior ao do modelo FNE-PH com 2 nós internos. Assim sendo, na escala PH o mais adequado é considerar o modelo sem estratificação para analisar este conjunto de dados. Os resultados do melhor modelo FNE-PH estão compilados na Tabela 2. Comparando as estimativas usual e robusta do erro padrão, observa-se que  $\widehat{EP}_r$  é, em geral, superior a  $\widehat{EP}$ . Este resultado não é inesperado e adverte para a presença de correlação intra-individual. Para avaliar o efeito do número acumulado de acontecimentos ( $\theta$ ), assim como o efeito do tratamento ( $\beta_1$ ) e do número inicial de tumores ( $\beta_2$ ), aplica-se o teste de Wald robusto. As conclusões que se seguem levam em conta que os resultados foram ajustados para as restantes covariáveis incluídas no modelo. Observa-se que a acumulação de acontecimentos tem influência significativa sobre o tempo até à recorrência de tumores na bexiga. De facto, a ocorrência de um acontecimento anterior leva a um acréscimo estimado de 36% no risco de sofrer uma nova recorrência. Este aspeto reforça a importância de incorporar nos modelos não estratificados uma função que explique a dependência entre acontecimentos. Quanto ao efeito das restantes covariáveis, apenas o número inicial de tumores tem um efeito significativo no tempo, sendo que ter mais um tumor inicialmente origina um acréscimo estimado de 16% no risco de recorrência do cancro. Embora o efeito do tratamento no processo de recorrência não seja significativo, o sinal negativo da sua estimativa indica que o fármaco tiotepa

Tabela 3: Estimativas dos parâmetros do modelo FE-PO mais adequado aos dados sobre a recorrência de cancro da bexiga.

Parâmetro	Estimativa	$\widehat{EP}$	$\widehat{EP}_r$	IC a 95%	valor- $p$
$\gamma_{01}$	-4.454	0.834	0.786	(-5.995, -2.913)	—
$\gamma_{11}$	3.124	0.753	0.786	(1.582, 4.665)	—
$\gamma_{21}$	0.771	0.282	0.314	(0.155, 1.387)	—
$\gamma_{31}$	-0.446	0.195	0.193	(-0.825, -0.067)	—
$\gamma_{02}$	-4.717	1.050	0.805	(-6.295, -3.139)	—
$\gamma_{12}$	3.270	1.051	1.128	(1.060, 5.480)	—
$\gamma_{22}$	0.808	0.421	1.222	(-1.587, 3.204)	—
$\gamma_{32}$	-0.616	0.391	0.409	(-1.417, 0.186)	—
$\gamma_{03}$	-3.975	0.844	0.839	(-5.620, -2.331)	—
$\gamma_{13}$	2.177	0.381	0.436	(1.322, 3.031)	—
$\gamma_{04}$	-3.990	1.021	1.431	(-6.796, -1.185)	—
$\gamma_{14}$	2.127	0.483	0.754	(0.650, 3.604)	—
$\beta_1$	-0.388	0.302	0.423	(-1.216, 0.441)	0.359
$\beta_2$	0.228	0.081	0.089	(0.053, 0.402)	0.011

tende a provocar uma diminuição do risco.

Relativamente à escala PO, considera-se o mesmo procedimento. Para os modelos FNE-PO ajustados com 0, 1, 2 e 3 nós internos, obtiveram-se os valores do AIC de 878.7, 862.3, 861.1 e 862.6, respetivamente. Entre estes modelos, verifica-se que também o mais apropriado é considerar o modelo FNE-PO com  $m = 2$  nós internos. No caso dos modelos FE-PO, os valores do AIC dos modelos de Royston e Parmar para o primeiro (408.6, 401.5, 396.7 e 398.3), segundo (236.4, 235.8, 234.7 e 235.1), terceiro (139.9, 141.3, 143.3 e 145.3) e quarto (90.1, 92.0, 91.5 e 92.7) estratos revelam que o mais adequado é considerar o modelo FE-PO com  $m_1 = 2$ ,  $m_2 = 2$ ,  $m_3 = 0$  e  $m_4 = 0$  nós internos específicos.

Por conseguinte, é suficiente considerar a distribuição log-logística para modelar os *gap times* relativos ao terceiro e quarto acontecimentos, enquanto para os dois primeiros acontecimentos é necessário considerarmos uma distribuição mais flexível. Após ajustar o referido modelo FE-PO, constatou-se que o seu valor do AIC é de 856.4, o que é inferior ao do modelo FNE-PO com 2 nós internos. Então,

na escala PO o mais adequado é considerar um modelo com estratificação por acontecimento para analisar este conjunto de dados, contrariamente ao que acontece na escala PH. A Tabela 3 apresenta os resultados obtidos no ajustamento do melhor modelo FE-PO. Observa-se novamente que  $\widehat{EP}$  é, em geral, inferior a  $\widehat{EP}_r$ . Em relação às covariáveis, apenas o efeito do número inicial de tumores tem influência significativa no tempo, revelando que ter mais um tumor inicialmente origina um acréscimo estimado de 26% na possibilidade de surgir um novo tumor, para indivíduos no mesmo grupo de tratamento.

A adequabilidade dos modelos pode ser avaliada, de modo informal, através da representação gráfica das estimativas da função de sobrevivência obtidas pelo estimador de Kaplan-Meier e pelo modelo nulo que estiver a ser considerado, tal como retratado na Figura 1. Adicionalmente, estão também representadas as correspondentes estimativas da função de risco de cada modelo. Verifica-se que as estimativas suaves de ambos os modelos flexíveis estão próximas das estimativas de Kaplan-Meier, indicando que estes modelos são alternativas adequadas para modelar o tempo até à recorrência de cancro da bexiga. Na verdade, as estimativas do modelo FE-PO estão bastante mais próximas das estimativas de Kaplan-Meier, apesar de ser o modelo FNE-PH aquele que detém o menor valor do AIC (854.5 vs 856.4). Quanto às estimativas da função de risco, em ambos os modelos estas apresentam uma forma unimodal e, além disso, o risco de recorrência tende a aumentar à medida que os acontecimentos são observados. Note-se que, embora o modelo FNE-PH considere uma função de risco subjacente comum a todos os acontecimentos, a inclusão de uma função que explica o efeito da acumulação de acontecimentos permite acomodar riscos de ocorrência distintos.

## 4 Considerações finais e trabalho futuro

Neste trabalho, desenvolveram-se duas novas classes de modelos paramétricos (FNE e FE) para analisar acontecimentos recorrentes,

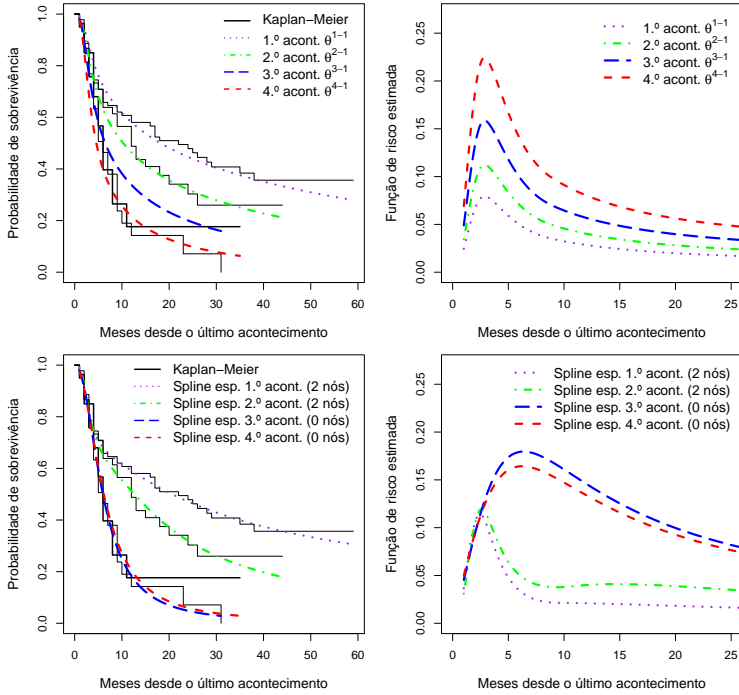


Figura 1: Estimativas da função de sobrevivência de Kaplan-Meier e para: o modelo FNE-PH (superior esquerdo); o modelo FE-PO (inferior esquerdo). Estimativas da função de risco para: o modelo FNE-PH (superior direito); o modelo FE-PO (inferior direito).

tendo em vista abordar dois aspetos: i) a modelação flexível e adequada dos *gap times* entre acontecimentos sucessivos; e ii) a correlação intra-individual causada pela dependência entre acontecimentos. No primeiro caso, propôs-se modelar uma dada transformação da função de sobrevivência como uma função SCR do logaritmo do *gap time*. As funções de ligação consideradas foram: log-log e -logit. Quanto à segunda, considerou-se duas abordagens distintas:



a inclusão de uma função do número acumulado de acontecimentos observados por indivíduo; ou a estratificação por acontecimento.

Na implementação da metodologia proposta, verificou-se que os modelos FNE-PH (com 2 nós internos) e FE-PO (com 2, 2, 0 e 0 nós internos específicos) são adequados para modelar o tempo entre recorrências de cancro da bexiga. Deste modo, não se pode afirmar que existe uma classe de modelos melhor do que a outra pois, para este conjunto de dados, foi selecionado um modelo sem estratificação na escala PH e um modelo com estratificação na escala PO.

Nesta fase da investigação, não se considerou determinante realizar um estudo de simulação para avaliar o desempenho das novas classes de modelos em modelar adequadamente o tempo. O uso de SCR para aproximar funções de risco com formas complexas tem revelado resultados muito promissores. Rutherford *et al.* [7] realizaram um estudo de simulação abrangente sobre o assunto e os seus resultados indicaram que, quando é fornecido um número suficiente de nós internos, o SCR permite obter uma boa aproximação da verdadeira função de risco simulada. Além disso, verificaram que o efeito estimado das covariáveis é robusto a uma incorreta (ou grosseira) especificação da parte *spline*. No entanto, futuramente pretende-se compreender se existem situações em que uma certa classe de modelos é mais apropriada do que outra para lidar com a correlação intra-individual.

Finalmente, reconhece-se que as classes de modelos propostas podem ser estendidas em várias direções. Na análise dos dados sobre a recorrência de cancro da bexiga, obtiveram-se estimativas usuais do erro padrão deflacionadas, apesar da dependência entre acontecimentos ter sido abordada. Este resultado sugere que a correlação intra-individual não está a ser completamente tida em consideração. De facto, em certos cenários importa também ter em conta a heterogeneidade individual não observada. Essa fonte de correlação pode ser captada incorporando um efeito aleatório [1], dando origem a modelos com fragilidade. Outra potencial extensão consiste em usar uma transformação diferente da função de sobrevivência como, por exemplo, a função de ligação –probit.

## Agradecimentos

I. Sousa-Ferreira agradece: à Universidade de Lisboa, pela atribuição da sua bolsa de doutoramento; e à Sociedade Portuguesa de Estatística (SPE), pela bolsa concedida para participar no “XXIV Congresso da SPE”. O presente trabalho foi parcialmente financiado por Fundos Nacionais através da FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, no âmbito dos projetos UIDB/00006/2020 (Centro de Estatística e Aplicações) e UIDB/04674/2020 (Centro de Investigação em Matemática e Aplicações, grupo de Estatística, Processos Estocásticos e Aplicações).

## Referências

- [1] Box-Steffensmeier, J. M., e De Boef, S. (2006). Repeated events survival models: the conditional frailty model. *Statistics in Medicine*, 25(20), 3518–3533.
- [2] Byar, D. (1980). Veterans administration study of chemoprophylaxis for recurrent stage I bladder tumors: comparisons of placebo, pyridoxine and topical thiotepa. *Bladder Tumors and Other Topics in Urological Oncology*, 18, 363–370.
- [3] Lipsitz, S. R., Dear, K. B. G. e Zhao, L. (1994). Jackknife estimators of variance for parameter estimates from estimating equations with applications to clustered survival data. *Biometrics*, 50(3), 842–846.
- [4] Louzada-Neto, F. (2005). A hybrid scale intensity model for recurrent event data. *Communications in Statistics-Theory and Methods*, 33(1), 119–133.
- [5] R Core Team (2020). *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.
- [6] Royston, P. e Parmar, M. K. B. (2002). Flexible parametric proportional-hazards and proportional-odds models for censored survival data, with application to prognostic modelling and estimation of treatment effects. *Statistics in Medicine*, 21(15), 2175–2197.
- [7] Rutherford, M. J., Crowther, M. J., e Lambert, P. C. (2015). The use of restricted cubic splines to approximate complex hazard functions

in the analysis of time-to-event data: a simulation study. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 85(4), 777–793.

- [8] Therneau, T. M. e Grambsch, P. M. (2000). *Modeling Survival Data: Extending the Cox Model*. Springer-Verlag, New York.



# Threshold selection for wave heights: asymptotic methods based on L-moments

Jessica Silva Lomba

CEAUL – Centro de Estatística e Aplicações, Faculdade de Ciências,  
Universidade de Lisboa, Portugal, *jslomba@fc.ul.pt*

Maria Isabel Fraga Alves

CEAUL – Centro de Estatística e Aplicações, Faculdade de Ciências,  
Universidade de Lisboa, Portugal, *isabel.alves@fc.ul.pt*

**Keywords:** Extreme Values; Threshold Selection; L-moments

**Abstract:** Two automatic threshold selection (TS) methods for Extreme Value analysis under a peaks-over-threshold (POT) approach are presented and evaluated, both built on: fitting the Generalized Pareto distribution (GPd) to excesses' samples over candidate levels; the GPd-specific relation between L-skewness and L-kurtosis; the asymptotic behaviour of the matching L-statistics. Performance is illustrated on significant wave heights data sets and compared to the L-moment-based heuristic in [10], which is found to be favorable.

## 1 Introduction

The POT approach in Extreme Value analysis consists in selecting observations that fall above a pre-specified high threshold  $u$  and fitting a GPd to the excesses of this level, under the Pickands-Balkema-de Haan Theorem ([2], [8]). In several applied fields, risk analysis can be built on inference of high quantiles – also known as return levels (RL) – based on this fit, its accuracy thus highly dependent on an adequate choice of  $u$ . The problem of choosing  $u$  is an open topic (see [9] and [6] for recent reviews) and lies on balancing bias *vs.* variance in estimation resulting from thresholds that are too low (poor fit) or too high (few excesses).

Addressing usual issues in selection approaches, [10] suggested the ALRSM, a heuristic automatic selection method based on L-moments and the L-moment Ratio Diagram, shown to eliminate subjectivity while enjoying accuracy and efficiency for small and large samples. However, it provides no theoretical assurance on the quality of the GPD fit above the selected  $u$ : a level is always chosen despite poor fitting. In this work we present two asymptotically supported methodologies that aim to meet the same standards of the ALRSM, while evaluating adequacy of the fit and consequently of the selected level.

## 1.1 L-moments and L-statistics

Hosking [3] introduced the *L-moments* as specific linear combinations of Probability Weighted Moments (PWM) that can be read as measures of location, scale and shape of distributions, allowing for its easy description, identification and estimation of parameters. The full set of L-moments of a random variable  $X$  with distribution function  $F$  exists if  $\mathbb{E}|X| < \infty$ , a broader set-up than that for conventional moments. Given the PWM  $\alpha_r = M_{1,0,r} = \mathbb{E}[X\{1 - F(X)\}^r]$ , the first four L-moments are

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \alpha_0 \text{ (expected value)} \quad , \quad \lambda_2 = \alpha_0 - 2\alpha_1 \text{ (L-scale)}, \\ \lambda_3 &= \alpha_0 - 6\alpha_1 + 6\alpha_2 \quad \text{and} \quad \lambda_4 = \alpha_0 - 12\alpha_1 + 30\alpha_2 - 20\alpha_3. \end{aligned} \quad (1)$$

It is also useful to define scale-independent L-moment ratios, of which we will use  $\tau_3 = \frac{\lambda_3}{\lambda_2}$  and  $\tau_4 = \frac{\lambda_4}{\lambda_2}$ , known resp. as L-skewness and L-kurtosis, globally bounded as

$$\frac{1}{4} (5\tau_3^2 - 1) \leq \tau_4 < 1. \quad (2)$$

In particular for the GPD of scale and shape (tail weight) parameters  $(\sigma_u, \xi) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$  - d.f.  $\left(1 - \left[1 + \frac{\xi}{\sigma_u}x\right]_+^{-1/\xi}\right)$ ,  $x > 0$ ,  $a_+ = \max(a, 0)$  - we have

$$\lambda_1 = \frac{\sigma_u}{1 - \xi}, \quad \lambda_2 = \frac{\sigma_u}{(1 - \xi)(2 - \xi)}, \quad \tau_3 = \frac{1 + \xi}{3 - \xi}, \quad (3)$$

defined for  $\xi < 1$ , along with the following specific relationship between L-skewness and L-kurtosis:

$$\tau_4 = \tau_3 \frac{1 + 5\tau_3}{5 + \tau_3} =: g(\tau_3). \quad (4)$$

Corresponding estimators – *L-statistics* – are simply found as linear combinations of the ordered observations  $x_{1:n} \leq \dots \leq x_{n:n}$ , with several theoretical advantages over conventional sample moments [5]. The unbiased L-statistics of interest  $(\ell_1, \ell_2, \ell_3, \ell_4)$  are found by replacing the PWM  $\alpha_r$  in (1) by their unbiased estimators

$$a_r = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \binom{n-i}{r} x_{i:n} \binom{n-1}{r}^{-1}, \quad r = 0, 1, \dots, n-1. \quad (5)$$

The ratios statistics – here  $t_3 = \frac{\ell_3}{\ell_2}$  and  $t_4 = \frac{\ell_4}{\ell_2}$  – are only asymptotically unbiased.

Useful estimators of the GPd parameters follow from (3) and (5) as

$$\hat{\xi} = 2 - \frac{\ell_1}{\ell_2} = 2 - \frac{a_0}{a_0 - 2a_1}, \quad \hat{\sigma}_u = \ell_1 \left(1 - \hat{\xi}\right) = \frac{2a_0 a_1}{a_0 - 2a_1}. \quad (6)$$

If, additionally,  $\text{var}[X] < \infty$ , it is possible to demonstrate the asymptotic normality of  $a_r$ ,  $\ell_r$  and  $t_r$ , as well as compute the corresponding asymptotic bias and variance. It has been empirically shown that, in small samples, these estimators approximate their asymptotic normality more closely than traditional sample moments, often closely enough for samples as small as  $n = 20$  [3].

Considering again the GPd, with restricted shape  $\xi \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  (finite variance), we have that the  $a_r$  are asymptotically Normal with

$$\mathbf{A}_{r,s} = \lim_{n \rightarrow \infty} n \text{cov}(a_r, a_s) = \frac{\sigma_u^2}{(r+1-\xi)(s+1-\xi)(r+s+1-2\xi)}, \quad (7)$$

$r, s = 0, 1, \dots, n-1$ . These  $A_{r,s}$  give us the asymptotic var-covariances of  $\ell_r$  and  $t_r$ : we compute matrix  $\mathbf{A} := \lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{V}\text{ar}(\ell_1, \ell_2, \ell_3, \ell_4) = M \mathbf{A} M^T$  ( $M$  is a  $4 \times 4$  numeric matrix given in [3]) and matrix  $\mathbf{T} := \lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{V}\text{ar}(t_3, t_4)$  for the asymptotic bi-Normal distribution of  $(t_3, t_4)$ , with entries

$$\mathbf{T}_{33} = \lim_{n \rightarrow \infty} n \text{var}(t_3) = \frac{\Lambda_{33} - 2\tau_3 \Lambda_{23} + \tau_3^2 \Lambda_{22}}{\lambda_2^2}$$

$$\mathbf{T}_{34} = \lim_{n \rightarrow \infty} n \operatorname{cov}(t_3, t_4) = \frac{\Lambda_{34} - \tau_3 \Lambda_{24} - \tau_4 \Lambda_{23} + \tau_3 \tau_4 \Lambda_{22}}{\lambda_2^2} \quad (8)$$

$$\mathbf{T}_{44} = \lim_{n \rightarrow \infty} n \operatorname{var}(t_4) = \frac{\Lambda_{44} - 2 \tau_4 \Lambda_{24} + \tau_4^2 \Lambda_{22}}{\lambda_2^2}.$$

All entries of  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{\Lambda}$  and  $\mathbf{T}$  can be estimated by plugging-in the sample PWM  $a_0$  through  $a_3$ , in order to obtain  $\hat{\xi}$ ,  $\hat{\sigma}_u$ ,  $\hat{\lambda}_2 \equiv \ell_2$ ,  $\hat{\tau}_3 \equiv t_3$ , and  $\hat{\tau}_4 \equiv t_4$ , thus yielding the PWM-based estimates  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\mathbf{\Lambda}}$  and  $\hat{\mathbf{T}}$ .

## 1.2 L-moment Ratio Diagram (LMRD)

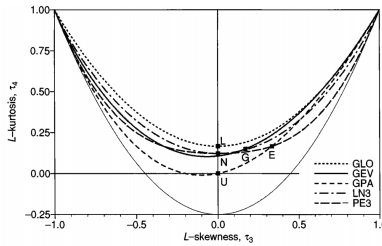


Figure 1: L-moment ratio diagram – Figure 2.5, page 25 of [5].

The LMRD commonly refers to the representation of the ratios  $\tau_3$  and  $\tau_4$  for several distributions, a visualization of L-kurtosis *vs.* L-skewness, used in Regional Frequency Analysis for regional distribution choice [5]. As shown in Figure 1, three-parameter distributions plot as a line, with different values of the shape parameter corresponding to different points on that line; distributions with more than one shape parameter can comprehend a 2-dimensional region. For the GPd, a specific shape- $\xi$  corresponds to a single point  $(\tau_3, \tau_4) = (\tau_3, g(\tau_3))$  on the curve given by (4), with negative values of  $\tau_3$  relating to  $\xi < -1$ , very uncommon extremely light tails.

Agreement of a sample to a distribution can be judged by the proximity between  $(t_3, t_4)$  and the theoretical curve of interest. This is the main concept on which the ALRSM is based, and one we explore in the sequel, now minding the asymptotic considerations above.



## 2 Automatic threshold choice

### 2.1 Automatic L-moment Confidence Band Selection Method (ALCBSM)

The consistent estimators  $(t_3, t_4)$ , under the GPd, asymptotically follow a bi-Normal distribution with var-covar matrix given by  $\mathbf{T}$  in (8):  $\sqrt{n}[(t_3 - \tau_3) \ (t_4 - \tau_4)]^T \xrightarrow{d} \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{T})$  (c.f. [3]). Noting that the conditional distribution of jointly Normal variables is still Gaussian, we can study the asymptotic behaviour of the sample L-kurtosis given an estimate of the L-skewness, and *vice-versa*. As such, we will build our LMRD confidence bands on the fact that

$$t_4 | t_3 = t^* \overset{a}{\sim} \mathcal{N}(\mathbb{E}(t_4 | t_3 = t^*), \text{var}(t_4 | t_3 = t^*)) \quad (9)$$

$$\text{with } \mathbb{E}(t_4 | t_3 = t^*) = \mathbb{E}(t_4) + \frac{\text{cov}(t_3, t_4)}{\text{var}(t_3)} (t^* - \mathbb{E}(t_3)) \sim \tau_4 + \frac{\mathbf{T}_{34}}{\mathbf{T}_{33}} (t^* - \tau_3)$$

$$\text{and } \text{var}(t_4 | t_3 = t^*) = \text{var}(t_4) \cdot (1 - \rho^2) \sim \frac{\mathbf{T}_{44}}{n} \left(1 - \frac{\mathbf{T}_{34}^2}{\mathbf{T}_{33} \mathbf{T}_{44}}\right).$$

In practice, true L-skewness and L-kurtosis are unknown: we plug-in the estimates  $\widehat{\tau}_3 \equiv t_3 = t^*$ , and  $\widehat{\tau}_4 = g(t_3) = g(t^*)$ , with  $g(\cdot)$  in (4). Thus, the expectation of the conditional in (9) is reduced to the parameter of interest,  $\tau_4$ , allowing us to devise confidence intervals (CI's) for its value. As such, given an observed  $t^*$  of  $t_3$ , from a sample of size  $n$ , we estimate with approx.  $(1 - \alpha)\%$  confidence that

$$\tau_4 \in [LCI_{\tau_4}; UCI_{\tau_4}] = \left[ g(t^*) - z_{1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\widehat{\mathbf{T}}_{44}}{n} (1 - \widehat{\rho}_{34}^2)}; g(t^*) + z_{1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\widehat{\mathbf{T}}_{44}}{n} (1 - \widehat{\rho}_{34}^2)} \right] \quad (10)$$

where  $\widehat{\rho}_{34}^2 = \frac{\widehat{\mathbf{T}}_{34}^2}{\widehat{\mathbf{T}}_{33} \widehat{\mathbf{T}}_{44}}$  and  $z_{1-\frac{\alpha}{2}}$  is the  $(1 - \frac{\alpha}{2})$ -probability quantile of the standard Normal.

If we instead consider the distribution of  $t_3 | t_4 = t^*$ , the results are perfectly analogous and therefore their derivation is here overlooked: given an observed  $t^*$  of  $t_4$ , from a sample of size  $n$ , we estimate with approx.  $(1 - \alpha)\%$  confidence that

$$\tau_3 \in [LCI_{\tau_3}; UCI_{\tau_3}] = \left[ g^{-1}(t^*) - z_{1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\widehat{T_{33}}}{n} (1 - \widehat{\rho_{34}}^2)}; g^{-1}(t^*) + z_{1-\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\widehat{T_{33}}}{n} (1 - \widehat{\rho_{34}}^2)} \right] \quad (11)$$

where  $g^{-1}(\tau_4) := \frac{\tau_4 - 1}{10} + \frac{1}{10} \sqrt{\tau_4^2 + 98\tau_4 + 1}$  is the analytical inverse of  $g(\cdot)$ , restricted to the 1<sup>st</sup> quadrant of the LMRD ( $\tau_3, \tau_4 > 0$ ).

These CI's can be used for evaluating the acceptability of the GPD fit to the sample. By estimating the L-kurtosis in (10) as  $g(t_3)$ , rather than its PWM-based estimator  $t_4$ , we get a CI for  $\tau_4$  that is centered around the GPD curve in the LMRD (4), as well as completely independent from the estimate  $t_4$  itself. As such, we can judge a sample to be sufficiently well adjusted by the GPD if, given the estimate  $t_3$ , the sample-computed  $t_4$  falls within the corresponding bounds of the estimated CI (10). A similar reasoning is valid when exchanging  $t_3$  by  $t_4$  and using the interval in (11).

Return to the threshold selection setting: in the POT-GP approach, given i.i.d. data from an unknown distribution (assumed to belong to some max-domain of attraction – c.f. [2], [8]), we have to choose, from a reasonable set of candidates, a level  $u^*$  after which the GP approximation to the sample of excesses is judged to hold sufficiently well. In the present framework,  $u^*$  will be **automatically** chosen as the lowest candidate for which  $(t_3, t_4)$ , computed from the  $n_{u^*}$  excesses, simultaneously fall inside the respective CI (10) and (11), computed in turn by fixing first the value of  $t_3$  and then that of  $t_4$ .

→ Given a sample  $x_1, \dots, x_n$  of size  $n$  and  $\{u_i\}_{i=1}^I$  a reasonable set of candidate thresholds (we suggest  $I = 10$  or  $I = 20$  equal-step sample quantiles, starting at 25%), the ALCBSM works as follows:

1. For each candidate threshold  $u_i$ ,  $i = 1, \dots, I$ :
  - a) Compute the sample L-skewness and L-kurtosis for the excesses over each candidate  $(t_{3,u_i}, t_{4,u_i})$ , as well as the GPD-specific functions  $g(t_{3,u_i})$  and  $g^{-1}(t_{4,u_i})$ ;
  - b) Compute the estimates of the parameters  $\xi$  and  $\sigma_u$  in (6) and plug them into (7) to obtain  $\hat{\mathbf{A}}$  and  $\hat{\mathbf{\Lambda}}$ ;

- c) Compute the bounds  $LIC_{\tau_4}^i$  and  $UIC_{\tau_4}^i$  in (10) by plugging  $\ell_2$ ,  $\hat{\Lambda}$ ,  $\hat{\tau}_3 \equiv t_{3,u_i}$  and  $\hat{\tau}_4 = g(t_{3,u_i})$  into (8);
  - d) If  $t_{4,u_i}$  falls within the values of  $LIC_{\tau_4}^i$  and  $UIC_{\tau_4}^i$ , proceed to step 1.e); otherwise, update the candidate threshold to  $u_{i+1}$  and return to step 1.a);
  - e) Compute the bounds  $LIC_{\tau_3}^i$  and  $UIC_{\tau_3}^i$  in (11) by plugging  $\ell_2$ ,  $\hat{\Lambda}$ ,  $\hat{\tau}_4 \equiv t_{4,u_i}$  and  $\hat{\tau}_3 = g^{-1}(t_{4,u_i})$  into (8);
  - d) If  $t_{3,u_i}$  falls within the values of  $LIC_{\tau_3}^i$  and  $UIC_{\tau_3}^i$ , proceed to step 2; otherwise, update the candidate threshold to  $u_{i+1}$  and return to step 1.a);
2. The lowest threshold above which the underlying distribution's tail behaviour can be considered approximately GPd is automatically selected as  $u^* = u_i$  – the first level above which the corresponding L-statistics fall close enough to the curve, inside the  $(1 - \alpha)\%$  confidence bands. No threshold is selected if no pair  $(t_{3,u_i}, t_{4,u_i})$  simultaneously falls inside both CI's.

## 2.2 Automatic L-moment Goodness-of-Fit Selection Method (ALGFSM)

For the development of the alternative methodology we now present, two main techniques were combined: computation of the *goodness-of-fit* (GoF) *measure* suggested in Chapter 5 of [5], together with the *ForwardStop* stopping rule used for automatic selection by [1]. Not unlike our previous framework, the way to test the quality of the GPd fit to a given sample of excesses will be based on the behaviour of  $(t_3, t_4)$  in regard to  $(\tau_3, \tau_4)$ . We will again make use of the asymptotic Normality of these estimators, but another approach is taken for estimation of the corresponding variability – simulation.

Let us introduce the four-parameter Kappa distribution (c.f. [4]), given as function of  $\mu \in \mathbb{R}$ ,  $\sigma > 0$ ,  $\xi \in \mathbb{R}$  and  $h \in \mathbb{R}$ , respectively location, scale and two shape parameters. The Kappa family counts as special cases the GPd ( $h = 1$ ), the Generalized Extreme Value distribution (GEVd,  $h = 0$ ) and other distributions of interest in

various fields. Hence, it is convenient when commitment to one such specific behaviour is not desired, or when a simpler two/three-parameter distribution does not provide a sufficiently accurate fit. The cumulative distribution function is given as

$$\text{Kappa}(x|\mu, \sigma, \xi, h) := \begin{cases} \left(1 - h \left[1 + \xi \frac{x - \mu}{\sigma}\right]^{-\frac{1}{\xi}}\right)^{\frac{1}{h}}, & h, \xi \neq 0 \\ \text{GEV}(x|\mu, \sigma, \xi), & h = 0, \xi \neq 0 \\ \left(1 - h \exp\left[-\frac{x - \mu}{\sigma}\right]\right)^{\frac{1}{h}}, & h \neq 0, \xi = 0 \\ \text{Gumbel}(x|\mu, \sigma), & h, \xi = 0 \end{cases} \quad (12)$$

with the variable support being bounded above by  $\mu - \frac{\sigma}{\xi}$  if  $\xi < 0$ , and bounded below by  $\mu + \frac{\sigma}{\xi} (1 - h\xi)$  if  $h > 0$ , or by  $\mu + \frac{\sigma}{\xi}$  if  $h \leq 0$  and  $\xi > 0$  (with otherwise infinite right/left endpoints).

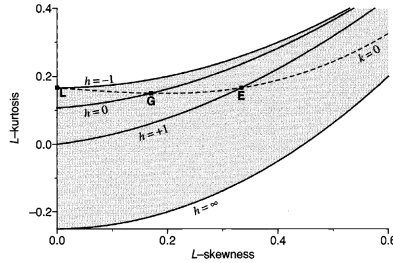


Figure 2: LMRD for the Kappa distr. – Figure A.1, page 204 of [5].

For this distribution, the L-skewness and L-kurtosis are dependent on  $\xi$  and  $h$ , and as such, in the LMRD, the possible  $(\tau_3, \tau_4)$  pairs appear as a 2-dimensional sub-area of this plot, shown in Figure 2. The most useful range of parameters ( $h \geq -1$ ) corresponds to the region between the line corresponding to the Generalized Logistic distribution ( $h = -1$ ) and the general lower bound for all distributions (2) – the shaded area in Figure 2. Although analytical expressions for the parameters in terms of the L-moments do not exist, this problem can be circumvented using Newton-Raphson numerical methods.

The versatility of the Kappa distribution makes it suitable for checking robustness of statistical procedures under distributional assumptions that may not be verified – this is the principle on which [5] based their GoF test, evaluating the quality of adjustment to several candidate distributions. In our setting, the interest is in deciding after which candidate level are the excesses in a sample sufficiently well modeled by the GPd. Since this is a special case of the Kappa – meaning that the simpler distribution can be used if appropriate – we follow the process of artificial data generation in [5], to compare the observed and expected behaviours of the L-statistics.

For a sample of  $n_u$  excesses of a threshold  $u$ , compute the corresponding GPd-L-moment based GoF statistic  $Z_u^{GP}$  as follows:

- Fit a GPd to the data using the method of L-moments – since it is a three-parameter distribution (with null location), it is fitted with resource to  $\ell_{1,u}$ ,  $\ell_{2,u}$  and  $t_{3,u}$ , and as such the fitted distribution has L-skewness equal to the estimated  $t_{3,u}$ ;
- Compute the theoretical L-kurtosis of the fitted GPd  $\tau_{4,u}^{GP}$  – the point in the LMRD curve (4) corresponding to the abscissa  $t_{3,u}$ ;
- Fit a Kappa distribution using the method of L-moments – since it is a four-parameter distribution, it is fitted with resource to  $\ell_{1,u}$ ,  $\ell_{2,u}$ ,  $t_{3,u}$  and  $t_{4,u}$ ;
- Simulate a large number  $N$  of samples of size  $n_u$  from the fitted Kappa ([5] suggest  $N = 500$ ) – these provide estimates of bias  $B_{4,u}$  and variability  $\sigma_{4,u}$  of the  $t_4$  for samples from this model;
- Compute the goodness-of-fit measure as

$$z_u^{GP} = \frac{\tau_{4,u}^{GP} - t_{4,u} + B_{4,u}}{\sigma_{4,u}}. \quad (13)$$

The  $Z_u^{GP}$  can be considered approximately standard Normal. Thus, we judge the GPd fit to the excesses' sample sufficiently accurate if  $|z_u^{GP}| \leq z_{1-\frac{\alpha}{2}}$  (with  $z_{1-\frac{\alpha}{2}}$  the standard normal  $(1 - \frac{\alpha}{2})$ -probability quantile,  $\alpha$  the significance level – [5] suggest  $\alpha = 0.1$ ). However, with the aim of choosing from an ordered set of candidate levels  $\{u_i\}_{i=1}^I$ , it is best to quantify acceptability of the adjustment through the  $p$ -value of the corresponding double-sided Normality test

$$p_u = 2 - 2\Phi\left(|z_u^{GP}|\right), \quad (14)$$

with  $\Phi(\cdot)$  the the standard Gaussian distribution function.

Repeating this process for all candidate thresholds, we obtain the set of  $p$ -values corresponding to the set of ordered hypothesis

$H_0^i$ : the distribution of the  $n_i$  excesses above  $u_i$  follows the GPD, for  $i = 1, \dots, I$ , the same context under which [1] establish their automatic selection procedure. So we make use of the same rejection rule as in the reference, the *ForwardStop*, which under the (here violated) assumption of independence of the multiple tests, allows for control of the False Discovery Rate at a pre-set level  $\alpha$ . Based on the transformed sequence of  $p$ -values obtained from the GoF measure  $Z^{GP}$ , the *ForwardStop* consists of finding

$$\hat{k}_F = \max \left\{ k \in \{1, \dots, I\} : -\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \log(1 - p_i) \leq \alpha \right\} \quad (15)$$

where  $\{p_i\}_{i=1}^I$  is the sequence of raw  $p$ -values of the ordered hypotheses. The cutoff  $\hat{k}_F$  indicates rejection of all hypotheses  $H_0^1, \dots, H_0^{\hat{k}_F}$ .

→ In summary, given a sample  $x_1, \dots, x_n$  of size  $n$  and  $\{u_i\}_{i=1}^I$  a reasonable set of candidate thresholds (as before), the ALGFSM works as follows:

1. For each candidate threshold  $u_i$ ,  $i = 1, \dots, I$ :
  - a) Compute the GoF measure  $z_i^{GP}$  in (13) according to the described fitting process;
  - b) Compute the corresponding  $p$ -value  $p_i$  in (14);
2. Apply the *ForwardStop* stopping rule in (15) to the set of  $I$   $p$ -values of the ordered hypotheses, retrieving the cutoff  $\hat{k}_F$ ;
3. The lowest threshold after which the tail behaviour of the underlying distribution can be considered approx. GPD is automatically selected as  $u^* = u_{\hat{k}_F+1}$  – the first level above which the corresponding  $t_4$  behaves sufficiently closely to the expected behaviour of the GPD's  $\tau_4$ . No threshold is selected if all  $|z_i^{GP}|$  are too large (equivalently, all  $p$ -values too small).

Performance of this method is, as expected, closer to that of the ALCBSM than of the heuristic ALRSM, since the former was constructed on the same theoretical, asymptotic ground which does not play an explicit part in the latter.

OBS: Simulation studies (here omitted) regrettably show significant efficiency and accuracy loss of the suggested methodologies, compared to the ALRSM and other state-of-the-art methods, regarding TS and parameter and RL estimation. Thresholds selected tend to be smaller than the appropriate level, and estimation suffers from both considerable bias and uncertainty. Also, computational intensity of both processes makes them unsuitable for large scale data batches requiring simultaneous analysis. As such, the asymptotically justified ALCBSM and ALGFSM cede superiority to the heuristic ALRSM.

### 3 Significant wave heights data sets

The hindcasts of storm peak significant wave heights (SWH) data sets used to illustrate the proposed methodologies are available and were previously studied in [10] and [7] – refer to these works for a full description of the data: 315 SWH registered in the Gulf of Mexico (GoM) from September 1900 to September 2005, averaging 3 yearly obs., and 628 SWH registered in October through March, from 1964 to 1995 in the North Sea (NS), averaging  $\approx 20.26$  yearly records. These previous studies suggest adequacy of a heavy tailed GPd fit to the GoM data, unlike the bounded tailed GPd judged more suitable for the NS data. Also, there was strong indication that a threshold above the 70% sample quantile would be most appropriate for both sets, giving shape parameter estimates coherent with the expected tail weights from the preliminary analysis. The ALRSM results in [10] were concordant with this assessment.

Table 1 summarizes the GPd-POT analysis performed, aiming at comparison of threshold selection by the three mentioned methods, and drawing inference regarding 100 and 10 000 year RL (in meters). Selections through the ALCBSM and ALGFSM follow the

procedures in Section 2, while results for the competing methodology ALRSM were drawn from [10] (where results from other literature suggestions are also shown for these series).

Table 1: TS and inference for the GoM and NS series by three TS methods; PWM estimates in italic, ML estimates in straight font (for the ALRSM, plugging in the PWM estimates yields similar results).

<i>Data</i>	<i>Method</i>	<i>I</i>	<i>Sample quantile-%</i>	<i>u*</i>	<i>n*</i>	$\hat{\xi}$	$\widehat{RL}_{100}$	$\widehat{RL}_{10000}$
<i>Gulf of Me- xico</i>	<b>ALCBSM</b>	<b>I=10</b>	47.5	2.578	165	-0.195	11.11	14.88
		<b>I=20</b>	50.9	2.859	155	-0.064	12.29	21.25
	<b>ALGFSM</b>	<b>I=10</b>	25	1.660	236	-0.183	11.14	15.15
		<b>I=20</b>	25	1.660	236	-0.183	11.14	15.15
	<b>ALRSM</b>	<b>I=10</b>	70	3.976	95	0.146	14.40	35.18
		<b>I=20</b>	73.1	4.182	85	0.173	14.65	38.58
	<b>ALCBSM</b>	<b>I=10</b>	25	2.204	470	-0.244	11.19	12.41
		<b>I=20</b>	25	2.204	470	-0.244	11.19	12.41
<i>North Sea</i>	<b>ALGFSM</b>	<b>I=10</b>	25	2.204	470	-0.244	11.19	12.41
		<b>I=20</b>	25	2.204	470	-0.244	11.19	12.41
	<b>ALRSM</b>	<b>I=10</b>	77.5	4.809	142	-0.346	10.72	11.37
		<b>I=20</b>	80.5	5.113	123	-0.355	10.71	11.33

There are clear discrepancies between results from the asymptotically-based methods and the ALRSM:

- Selected levels are considerably lower than those from the ALRSM (which was expected given the simulation studies conducted) – the lowest candidate is frequently selected;
- PWM estimates of  $\xi$  yielded by the ALCBSM and ALGFSM for the GoM data are unsatisfactory, as positive estimates were expected from sensible analysis of preliminary plots; this directly translates into very low estimated RL, which is problematic for risk analysis;
- For the NS, both methodologies produce equal results – larger  $\hat{\xi}$  and consequent RL also a little higher than those of the ALRSM (not as significant as for the GoM data given lightness of the tail).



The ALCBSM and ALGFSM take around 1 or 2 seconds to produce the full inference, which is not prohibiting of their use here, as happens for simultaneous analysis of large sample batches. As foreseen, results from the newly introduced methods are not satisfactory for these sets, compared to the also L-moment based ALRSM.

For illustration, we show for the NS data and  $I = 10$ : the GPd LMRD with  $(t_{3,u_i}, t_{4,u_i})$ , with 95% CI computed as (10) and (11), for application of the ALCBSM – Figure 3; the  $Z_i^{GP}$  GoF measure in (13), corresponding raw  $p$ -values (14) and adjusted *ForwardStop* values for (15), for application of the ALGFSM – Table 2.

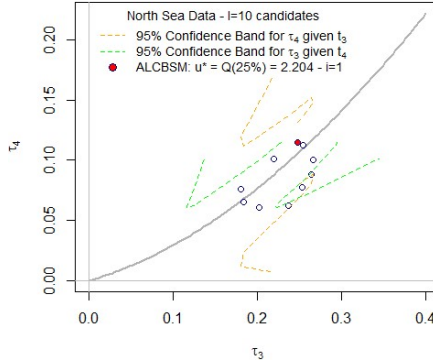


Figure 3: ALCBSM: NS data, I=10 candidates

This closer analysis shows the automatic procedures ignore some issues, such as the possibility of threshold acceptance conditions, while satisfied at lower levels, being violated for somewhat higher candidates – subjective analysis of Figure 3 and Table 2 can suggest the alternative choice  $u^* = u_7$ , closer to the ALRSM’s selection.

General Conclusions: These poor results compared to ALRSM (under suitability of the POT-GPd), are due to two main factors: less strict selection criteria naturally lead to lower chosen levels, and more complex procedures (e.g. simulation of samples from fitted

Table 2: ALGFSM: NS data, I=10 candidates

$i$	$u_i$	$Z_i^{GP}$	$raw$ $p_i$	$Forward$ $Stop$
1	2.204	-0.559	0.576	0.858
2	2.444	-0.219	0.826	1.304
3	2.800	0.992	0.321	0.999
4	3.193	1.596	0.110	0.778
5	<b>3.490</b>	<b>1.663</b>	<b>0.096</b>	<b>0.643</b>
6	<b>3.822</b>	<b>2.057</b>	<b>0.040</b>	<b>0.542</b>
7	4.246	0.936	0.349	0.526
8	4.809	0.143	0.887	0.733
9	5.697	-0.341	0.733	0.798
10	7.019	-0.306	0.759	0.861

Kappa) are typically more computationally demanding. We conclude that the proposed ALCBSM and ALGFSM, while having some usefulness as validation techniques for detection of deviations from expected GPd behaviour of excesses' samples, are not appropriate as stand-alone threshold selection methods for Extreme Value Analysis.

## Acknowledgments

This work is partially financed by national funds through FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia under project UIDB/00006/2020 (JSL & MIFA) and PhD grant SFRH/BD/130764/2017 (JSL).

## References

- [1] Bader, B., Yan, J., Zhang, X. (2018). Automated threshold selection for extreme value analysis via ordered goodness-of-fit tests with adjustment for false discovery rate. *Ann Statist* 12, 310–329.
- [2] Balkema, A., de Haan, L. (1974). Residual life time at great age. *Ann Probab* 2, 792–804.

- [3] Hosking, J.R.M. (1986). *The theory of probability weighted moments*. Research Report RC12210, IBM Corporation, New York.
- [4] Hosking, J. R. M. (1994). The four-parameter kappa distribution. *IBM J Res Dev* 38(3), 251–258.
- [5] Hosking, J.R.M., Wallis, J.R. (1997). *Regional Frequency Analysis – An Approach Based on L-moments*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [6] Langousis, A., Mamalakis, A., Puliga, M., Deidda, R. (2016). Threshold detection for the generalized Pareto distribution: Review of representative methods and application to the NOAA NCDC daily rainfall database. *Water Resour Res* 52, 2659–2681.
- [7] Northrop, P. J., Attalides, N., Jonathan, P. (2017). Cross-validatory extreme value threshold selection and uncertainty with application to ocean storm severity. *J R Stat Soc C* 66, 93–120.
- [8] Pickands, J. (1975). Statistical inference using extreme order statistics. *Ann Statist* 3, 119–131.
- [9] Scarrott, C., MacDonald, A. (2012). A review of extreme value threshold estimation and uncertainty quantification. *REVSTAT – STAT J* 10, 33–60.
- [10] Silva Lomba, J., Fraga Alves, M. I. (2020). L-moments for automatic threshold selection in extreme value analysis. *Stoch Environ Res Risk Assess* 34, 465–491.



# Statistical challenges of investigating a disease with a complex diagnosis

João Malato

Instituto de Medicina Molecular, Faculdade de Medicina & Centro de Estatística e Aplicações da Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal, *jmalato@medicina.ulisboa.pt*

Luís Graça

Instituto de Medicina Molecular, Faculdade de Medicina, Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal, *lgraca@medicina.ulisboa.pt*

Nuno Sepúlveda

Department of Infection Biology, Faculty of Infectious and Tropical Diseases, London School of Hygiene and Tropical Medicine, United Kingdom & Centro de Estatística e Aplicações da Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal, *nuno.sepulveda@lshtm.ac.uk*

**Keywords:** Multidimensional scaling; Cluster analysis; Misclassification; Cohen's  $\kappa$  coefficient; Jacard's similarity index

**Abstract:** Given the absence of a disease-specific biomarker, there are more than 20 symptoms-based case definitions of myalgic encephalomyelitis/chronic fatigue syndrome. As a consequence, the diagnosis for a given patient could vary from one case definition to another. In this context, we analyse data from a biobank dedicated to this disease in order to study the agreement between different case definitions, the similarity between symptom's profile among all participants including healthy controls and patients with multiple sclerosis. We also investigate the impact of patients' misclassification on a hypothetical association analysis using data simulation.

## 1 Introduction

Myalgic encephalomyelitis/chronic fatigue syndrome (ME/CFS) is a complex disease whose patients manifest unexplained fatigue lasting for more than six months [1] or suffer from post-exertional malaise that is not alleviated by rest [2]. Disease prevalence has been estimated between 0.4% and 1.0% affecting six women to one man [3]. The underlying pathological mechanisms remain poorly understood, but they are often associated with environmental stressors, including severe viral infections [4].

Until now there is no accurate biomarker for disease diagnosis. To overcome this problem, researchers and clinicians altogether have proposed more than 20 different case definitions based on patients' symptomatology while excluding known diseases that could explain the fatigue reported by suspected cases [5]. As a consequence, the diagnosis for a given patient can vary from one case definition to another. Therefore, research from ME/CFS could be affected by the inclusion of false positive cases in the respective data.

In the present paper, we discuss the problem of diagnosing ME/CFS using data from the United Kingdom ME/CFS Biobank (UKMEB). With this purpose, we first introduce the biobank and its data. We then assess the agreement between 4 common case definitions of ME/CFS in 275 suspected cases belonging to the UKMEB. We then estimate the similarity between symptom's severity profiles from suspected cases, patients with multiple sclerosis, and healthy controls. We also study the impact of patients' misclassification on the statistical power of a hypothetical association analysis. Finally, we conclude this paper with some final remarks.

## 2 The UKMEB

The UKMEB refers to a large data set of suspected cases of ME/CFS, healthy controls, and patients with multiple sclerosis included as an additional control group [6]. In terms of recruitment, suspected ca-

ses were identified in different institutions across the National Health Service from the United Kingdom and then referred to the CureMe group, a dedicated clinical research team based in the London School of Hygiene & Tropical Medicine and responsible for recruiting, managing, and curating the biobank. For this paper, the data set under analysis consists of a total of 523 participants divided into 275 suspected cases of ME/CFS, 136 healthy controls, and 112 patients with multiple sclerosis.

### 3 Diagnostic agreement analysis

After patients' referral for a possible integration in the biobank, suspected cases were comprehensively evaluated according to four case definitions of ME/CFS: Centre for Disease Control criteria (CDC-1994) [1], Canadian Consensus Criteria (CCC-2003) [2], Institute of Medicine Criteria (IOM-2005) [7], and International Consensus Criteria (ICC-2011) [8]. The CDC-1994 requires the patients to have unexplained fatigue for at least 6 months and at least four out of eight fatigue-related symptoms. The IOM-2005 is typically used by general practitioners and it requires the patients to show at least three main symptoms such as profound fatigue, post-exertional malaise, and unrefreshing sleep. The CCC-2003 requires the patients to manifest four or more fatigue specific symptoms, at least two neurological or cognitive ones, and at least one autoimmune, neuroendocrine, or immune symptom. Finally, the ICC-2011 is more focused on neuro-immune and cognitive symptoms, and on the inability to produce sufficient energy on demand (post-exertional neuroimmune exhaustion).

There were 269 (97.8%), 233 (84.7%), 229 (83.3%) and 213 (77.5%) out of 275 suspected cases whose symptoms agreed with CDC-1994, IOM-2005, CCC-2003, and ICC-2011, respectively (Table 1). This finding suggests that the general practitioners who referred the suspected cases to a possible integration in the biobank made their diagnosis based on the CDC-1994. Unsurprisingly, only 62.9% of

the suspected cases ( $n = 173$ ) had a positive diagnosis across all the four case definitions. Therefore, the remaining suspected cases had at least one negative diagnosis.

Table 1: Frequency of suspected cases of ME/CFS according to their diagnostic outcomes using different case definitions. Percentages in the last row indicate the proportion of diagnosed cases by each case definition.

Case definition				N	% of total suspected cases
CDC-1994	IOM-2005	CCC-2003	ICC-2011		
+	+	+	+	173	62.9
+	+	+	−	32	11.6
+	−	+	+	16	5.8
+	+	−	+	16	5.8
+	−	−	−	14	5.1
+	+	−	−	10	3.6
+	−	+	−	5	1.8
+	−	−	+	3	1.1
−	−	+	+	3	1.1
−	−	−	+	1	0.4
−	+	−	−	1	0.4
−	+	−	+	1	0.4
97.8%	84.7%	83.3%	77.5%	275	100%

It is worth noting that there were no suspected cases who had a negative diagnosis across all case definitions. There were also three individuals whose symptoms agreed with ICC-2011 only, IOM-2005 only, or both criteria. These individuals were considered to be fatigued but non-ME/CFS patients given that they did not agree with either the CDC-1994 or the CCC-2003 as recommended for ME/CFS research [9].

To better understand the agreement between diagnostic outcomes obtained from different case definitions, we used the Jaccard's similarity index,  $J$  [10]. Note that this index is usually a measure used to compare objects with shared attributes. Here we instead applied this index to compare attributes themselves. For a pair of



case definitions  $(C_i, C_j)$ , this index was estimated as

$$J(C_i, C_j) = \frac{S}{S_i + S_j - S}, \quad i, j = 1, \dots, 4, \quad (1)$$

where  $S_i$  and  $S_j$  are the number of suspected cases with a positive diagnosis by  $C_i$  and  $C_j$ , respectively, and  $S$  is the number of suspected cases with a positive diagnosis by both criteria. In theory, the index is defined between 0 and 1 (i.e., no and full agreement between  $C_i$  and  $C_j$  across all individuals, respectively).

The estimates of this index ranged from 0.752 (IOM-2005 versus ICC-2011) to 0.876 (CDC-1994 versus IOM-2005; CDC-1994 versus CCC-2003) (Table 2). The estimates showed the stringency and differences in scope of each case definition. In addition, these estimates showed that, even if the general practitioners applied two different case definitions of ME/CFS in their diagnosis, there could still be a fraction of suspected cases where the respective diagnostic outcomes might not agree with each other.

Table 2: Estimates of the Jaccard's similarity index for the four case definitions of ME/CFS using data from the UKMEB.

	CDC-1994	IOM-2005	CCC-2003	ICC-2011
CDC-1994	1.000	0.876	0.876	0.760
IOM-2005	0.876	1.000	0.840	0.752
CCC-2003	0.876	0.840	1.000	0.753
ICC-2011	0.760	0.752	0.753	1.000

## 4 Symptoms' similarity analysis

A major advantage of using data from the UKMEB is the comprehensive symptom's characterisation of all study participants. In particular, each participant had to report the severity of 57 symptoms occurred a month before data collection. Severity of each symptom was categorised into absence, mild, moderate, and severe. These invaluable data were then analysed to assess the similarity of

all participants in terms of their symptom's severity profile. With this purpose, we first computed all possible  $4 \times 4$  contingency tables resulting from cross-tabulating the symptom's severity data for any given pair of participants  $(i, j)$ ,  $i, j = 1, \dots, 523$ . We then calculated a similarity matrix between any given pair of individuals by estimating the Cohen's  $\kappa$  coefficient [11] in the corresponding  $4 \times 4$  contingency tables, that is,

$$\kappa_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^4 p_{ij,kk} - \sum_{k=1}^4 p_{ij,k} p_{ij,\cdot k}}{1 - \sum_{k=1}^4 p_{ij,k} p_{ij,\cdot k}}, \quad (2)$$

where  $k = 1, \dots, 4$ ,  $p_{ij,kk}$  is the proportion of symptoms with severity  $k$  reported by both individuals  $i$  and  $j$ ,  $p_{ij,k}$  is the proportion of symptoms with severity  $k$  reported by individual  $i$ , and  $p_{ij,\cdot k}$  is the proportion of symptoms with severity  $k$  reported by individual  $j$ . The resulting similarity matrix was then analysed by classical multidimensional scaling (MDS; Figure 1A) and hierarchical cluster analysis using complete linkage (Figure 1B).

With respect to the classical MDS, the first two components could explain 33.1% of the total inertia (Figure 1A). More importantly, the first component clearly discriminated healthy controls from suspected cases of ME/CFS. In the same component, patients with multiple sclerosis and the three fatigued non-ME/CFS cases were located between these two groups with some overlap. As expected, healthy participants were the most homogeneous cohort due to an absence or, at most, mild severity of the different symptoms. In contrast, the suspected cases of ME/CFS consisted of a diverse group as evidenced by their wide spread in the plot. Interestingly, a few suspected cases of ME/CFS had symptom's severity profiles similar to the ones from healthy controls. In agreement with these observations, the hierarchical cluster analysis revealed that some suspected cases of ME/CFS could be placed in clusters together with healthy controls and patients with multiple sclerosis (Figure 1B); a detailed analysis on the optimal number of clusters will be done elsewhere. Therefore, it was reasonable to assume that some of the suspected

cases of ME/CFS, although agreeing with CDC-1994 or CCC-2003, could be in fact true cases of another disease, as discussed by Nacul et al. [12].

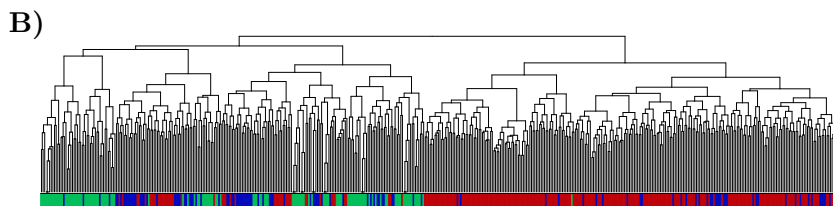
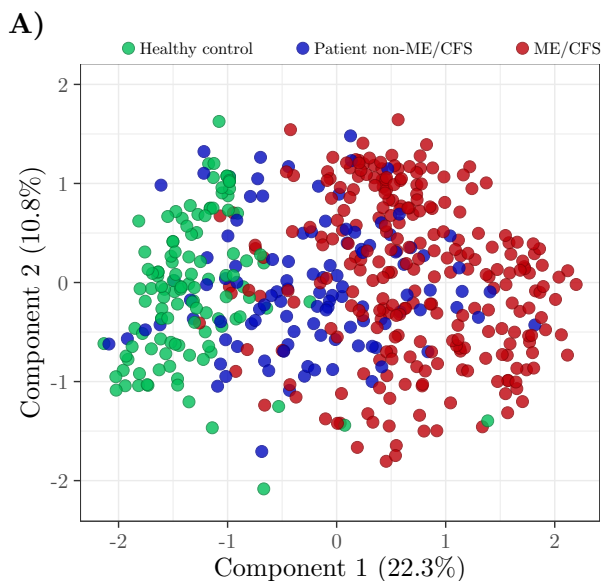


Figure 1: Symptom's similarity analysis based on the Cohen's  $\kappa$  coefficient: classical multidimensional scaling (A); dendrogram of hierarchical clustering analysis based on complete linkage (B) where the colour coding at the bottom is the same shown in A.

## 5 Impact of misclassification on an association analysis

Given the possibility of patients' misclassification, we performed a small simulation study to assess the reduction of statistical power attributed to this issue in the context of an association analysis. With this purpose, we simulated data from a case-control study with the aim to investigate a hypothetical association of a binary exposure variable (exposed versus not exposed) with ME/CFS. In this scenario, the observable data could be summarised by a  $2 \times 2$  frequency table whose sampling distribution was given by the following product of two Binomial distributions,

$$f(x_0, x_1 | n_0, n_1; \theta_0, \theta_1) = \prod_{i=0,1} \binom{n_i}{x_i} \theta_i^{x_i} (1 - \theta_i)^{n_i - x_i}, \quad (3)$$

where  $x_0$  and  $x_1$  are the frequencies of exposed healthy controls and suspected cases, respectively,  $n_0$  and  $n_1$  are the associated sample sizes, and  $\theta_0$  and  $\theta_1$  are the corresponding probabilities of exposure in healthy controls and suspected cases.

To study the impact of a potential misclassification of suspected cases on the detection of a possible association, four main assumptions were considered for the simulated data: (i) suspected cases could be divided into apparent (or false positive) cases and true positive cases of ME/CFS; (ii) the apparent cases were deemed equivalent to healthy controls in terms of degree of exposure, i.e., the probability of exposure in these individuals was given by  $\theta_0$ ; (iii) there was an overall misclassification rate,  $\gamma$ , for the suspected cases; and (iv) misclassification was only dependent on the true clinical status of each suspected case. Under the assumption (ii) and the law of total probability, the probability of exposure associated with suspected cases could be written as

$$\theta_1 = \gamma\theta_0 + (1 - \gamma)\theta_1^*, \quad (4)$$

where  $\theta_1^*$  is the probability of exposed true cases.

We then studied the power of rejecting the null hypothesis of lack of association (i.e.,  $H_0$ : odds ratio = 1) by the Pearson's  $\chi^2$  test for independence, when considering this simple misclassification scenario. Similar investigation could have been done using Fisher's exact test instead. With this purpose, we used simulation to estimate the number of times that  $H_0$  could be rejected at a significance level of 5%.

We augmented the observable  $2 \times 2$  frequency table where the suspected cases were subdivided into apparent and true positive cases (Table 3). In this case, we simulated data from healthy controls according to the Binomial distribution with a sample size of  $n_0$  individuals and probability of success  $\theta_0$ . With respect to the suspected cases, we simulated data from a Multinomial distribution with a sample size of  $n_1$  individuals and probability vector given by the probabilities shown in Table 3. Note that, given assumption (iv), the associated Multinomial distribution could be decomposed into the following Binomial distribution

$$n_{1,m}|n_1; \gamma \rightsquigarrow \text{Bin}(n_1, \gamma) , \quad (5)$$

referring to how many individuals were hypothetically misclassified as true positive cases, and two Binomial distributions conditional to  $n_{1,m}$

$$X_{1,F}|n_{1,m}; \theta_0 \rightsquigarrow \text{Bin}(n_{1,m}, \theta_0) , \quad (6)$$

and

$$X_{1,T}|n_1 - n_{1,m}; \theta_1^* \rightsquigarrow \text{Bin}(n_1 - n_{1,m}, \theta_1^*) , \quad (7)$$

where  $X_{1,F}$  and  $X_{1,T}$  were the random variables referring to the number of exposed false positive and true positive cases, respectively. For illustrative purposes, we performed our simulation study with  $n_0 = n_1 = 100$ ,  $\theta_0 = 0.25$ , and  $\theta_1^* = 0.35$ . According to this parameter specification, the odds ratio of true positive cases versus healthy controls was 1.62, a low but reasonable value for a putative association with ME/CFS, given that there is no disease-specific biomarker. To estimate the power of rejecting  $H_0$ , we generated 10,000 data sets

for each value of  $\gamma$ , ranging from 0 (no misclassification) to 1 (full misclassification) with a lag of 0.01. In each data set,  $H_0$  was rejected if the p-value of the Pearson's  $\chi^2$  test was less than 0.05. For a given parameter set, power was finally estimated as the proportion of simulated data sets in which  $H_0$  was rejected.

Table 3: Augmented version of the observable  $2 \times 2$  frequency table and the respective probabilities under a Binomial and a Multinomial distribution for healthy controls and suspected cases, respectively.

Exposure	Healthy Controls	Suspected Cases	
		False positive cases	True positive cases
1	$\theta_0$	$\theta_0\gamma$	$\theta_1^*(1 - \gamma)$
0	$1 - \theta_0$	$(1 - \theta_0)\gamma$	$(1 - \theta_1^*)(1 - \gamma)$

As expected, the estimated power decreased with the misclassification rate  $\gamma$  (Figure 2). As a control scenario, when all suspected cases were considered to be false positives ( $\gamma = 1$ ) and therefore the data sets were simulated from  $H_0$ , the corresponding power was estimated at 5%, the significance level specified for the Pearson's  $\chi^2$  test. In opposition, when the suspected cases were all considered true positive cases ( $\gamma = 0$ ), the power to detect a hypothetical association was estimated at 34%. This low power simply reflected the limited sample size to detect a weak association between exposure and the disease. In a less extreme case of misclassification,  $\gamma = 10\%$  implied an estimated power of 29%, which reflected a decrease in 14.7% of the power estimated for the scenario with no misclassification.

## 6 Concluding remarks

In summary, our analysis showed that suspected cases of ME/CFS from the UKMEB did not fully agree with four main case definitions of the disease. In addition, some of these suspected cases showed

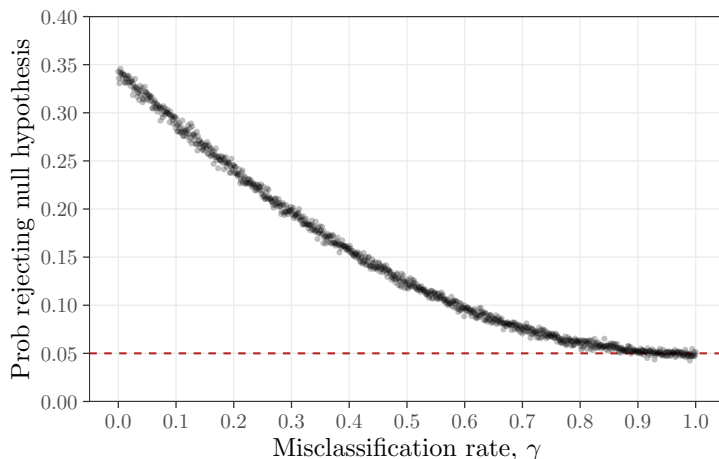


Figure 2: Estimated probability of rejecting  $H_0$  (i.e., lack of association) as function of the misclassification rate  $\gamma$ .

symptom's severity profiles similar to healthy controls and patients with multiple sclerosis. These findings demonstrated the difficulty of diagnosing ME/CFS based on symptoms' assessment alone. To overcome this and other difficulties, there are currently efforts for a stronger collaboration among European researchers for accelerating the discovery of an objective disease-specific biomarker [13]. However, joint efforts for biomarker discovery are very likely to suffer from limited statistical power due to a possible misclassification of the suspected cases. A possible solution to this problem is to take into account for misclassification in the respective statistical analysis. Such a solution is also problematic because modelling misclassification leads to an eventual problem of overparameterisation. From a frequentist standpoint, overparameterization could be avoided by fixing the misclassification rate in a reasonable estimate for the sensitivity of the diagnostic test. A more elegant way of doing so is to use Bayesian analysis where the prior information about

the misclassification rate takes the form of a probability distribution. However, both frequentist and Bayesian solutions show a main hurdle for their implementation in the research of ME/CFS. Given the lack of a disease biomarker, it is unclear which reasonable value or probability distribution to choose for the sensitivity of current diagnostic tools of ME/CFS.

As a final remark, our formulation of the misclassification problem assumed that misclassification is only dependent on the true clinical status of the suspected cases. In practice, it is very likely that misclassification is dependent on the symptoms' severity profile of a given individual, or at least dependent on a given set of covariates. If so, Paulino et al. [14] provided a Bayesian solution for modelling misclassification in this scenario. Given its technical complexity, we envision some difficulties in a wide application of this statistical solution by researchers of ME/CFS who are typically not trained in such advanced statistical methodology. To overcome this potential problem, we recommend a strong collaboration between these researchers and biostatisticians who have in principle the technical skills needed.

## Acknowledgements

We thank Eliana Lacerda and Luís Nacul from the CureME group for providing the data from the UKMEB. JM acknowledges a PhD fellowship by the Fundação para a Ciência e Tecnologia, Portugal (ref. SFRH/BD/149758/2019) and a travel grant awarded by the SPE to attend the XXIV SPE Congress in November 2019.

## References

- [1] Fukuda, K., Straus, S.E., Hickie, I., Sharpe, M.C., Dobbins, J.G., Komaroff, A., Schluederberg, A., Jones, J.F., Lloyd, A.R., Wessely, S., Gantz, N.M., Holmes, G.P., Buchwald, D., Abbey,



- S., Rest, J., Levy, J.A., Jolson, H., Peterson, D.L., Vercoulen, J., Tirelli, U., Evengård, B., Natelson, B.H., Steele, L., Reyes, M., Reeves, W.C. (1994). The Chronic Fatigue Syndrome: A Comprehensive Approach to Its Definition and Study. *Annals of Internal Medicine*, 121(12), 953–959.
- [2] Carruthers, B.M., Jain, A.K., Meirleir, K.L., Peterson, D.L., Klimas, N.G., Lerner, A.M., Bested, A.C., Flor-Henry, P., Joshi, P., Powles, A.C., Sherkey, J.A., van de Sande, M.I. (2003). Myalgic Encephalomyelitis/Chronic Fatigue Syndrome. *Journal of Chronic Fatigue Syndrome*, 11, 7–115.
- [3] Morris, G., Maes, M. (2013). Myalgic encephalomyelitis/chronic fatigue syndrome and encephalomyelitis disseminata/multiple sclerosis show remarkable levels of similarity in phenomenology and neuroimmune characteristics. *BMC Medicine*, 11, 205.
- [4] Rasa, S., Nora-Krukke, Z., Henning, N., Eliassen, E., Shikova, E., Harrer, T., Scheibenbogen, C., Murovska, M., Prusty, B.K. (2018). Chronic viral infections in myalgic encephalomyelitis/chronic fatigue syndrome (ME/CFS) *Journal of Translational Medicine*, 16, 268.
- [5] Brurberg, K.G., Fønhus, M.S., Larun, L., Flottorp, S., Malterud, K. (2014). Case definitions for chronic fatigue syndrome/myalgic encephalomyelitis (CFS/ME): a systematic review. *BMJ Open* 4(2), e003973.
- [6] Lacerda, E.M., Mudie, K., Kingdon, C.C., Butterworth, J.D., O’Boyle, S., Nacul, L. (2018). The UK ME/CFS Biobank: A Disease-Specific Biobank for Advancing Clinical Research Into Myalgic Encephalomyelitis/Chronic Fatigue Syndrome. *Frontiers in Neurology*, 9, 1026.
- [7] Committee on the Diagnostic Criteria for Myalgic Encephalomyelitis/Chronic Fatigue Syndrome, Board on the Health of Select Populations, Institute of Medicine (2015). *Beyond*

*Myalgic Encephalomyelitis/Chronic Fatigue Syndrome*. National Academies Press, Washington (DC).

- [8] Carruthers, B.M., van de Sande, M.I., Meirleir, K.L., Klimas, N.G., Broderick, G., Mitchell, T., Staines, D., Powles, A.C., Speight, N., Vallings, R., Bateman, L., Baumgarten-Austrheim, B., Bell, D.S., Carlo-Stella, N., Chia, J., Darragh, A., Jo, D., Lewis, D., Light, A.R., Marshall-Gradisbik, S., Mena, I., Mikovits, J.A., Miwa, K., Murovska, M., Pall, M.L., Stevens, S. (2011). Myalgic encephalomyelitis: International Consensus Criteria. *Journal of Internal Medicine*, 270, 327–338.
- [9] Pheby, D.F., Araja, D., Berkis, U., Brenna, E., Cullinan, J., de Korwin, J.D., Gitto, L., Hughes, D.A., Hunter, R.M., Trepel, D., Wang-Steverding, X. (2020). The Development of a Consistent Europe-Wide Approach to Investigating the Economic Impact of Myalgic Encephalomyelitis (ME/CFS): A Report from the European Network on ME/CFS (EUROMENE). *Healthcare*, 8, 88.
- [10] Gower, J.C., Warrens, M.J. (2014). Similarity, dissimilarity, and distance, measures of. *Wiley StatsRef: Statistics Reference Online*, 1–11.
- [11] Agresti, A. (2002). *Categorical data analysis*. John Wiley & Sons, New Jersey.
- [12] Nacul, L., Lacerda, E.M., Kingdon, C.C., Curran, H., Bowman, E.W. (2017). How have selection bias and disease misclassification undermined the validity of myalgic encephalomyelitis/chronic fatigue syndrome studies? *Journal of Health Psychology*, 24, 1765–1769.
- [13] Scheibenbogen, C., Freitag, H., Blanco, J., Capelli, E., Lacerda E, Authier, J., Meeus, M., Castro-Marrero, J., Nora-Krukke, Z., Oltra, E., Bolle Strand, Elin, Shikova, E., Sekulic, S., Murovska,

- M. (2017). The European ME/CFS Biomarker Landscape project: an initiative of the European network EUROMENE. *Journal of Translational Medicine*, 15, 162.
- [14] Paulino, C.D., Soares, P., Neuhaus, J. (2003). Binomial Regression with Misclassification. *Biometrics*, 59, 670–675.



# Ensino da Estatística e *software*: experiências, interrogações e preocupações

Jorge Cadima

Secção de Matemática (DCEB), Instituto Superior de Agronomia, ULisboa, e Centro de Estatística e Aplicações da Universidade de Lisboa (CEAUL), Portugal, [jcadima@isa.ulisboa.pt](mailto:jcadima@isa.ulisboa.pt)

**Palavras-chave:** *Big data*; Ensino da estatística; Programa R; Reforma de Bolonha

**Resumo:** O ensino da Estatística enfrenta desafios complexos. A revolução informática trouxe consigo uma explosão de técnicas e métodos estatísticos. O tempo disponível para o ensino é cada vez mais disputado e a preparação com que os alunos chegam ao Ensino Superior tende a cair. São insistentes os apelos para ‘aligeirar’ os cursos. Como ensinar estatística nesta conjuntura? Deve-se privilegiar a formação de base ou a extensão da matéria coberta? Deve-se trocar teoria por aplicações? O *software* livre R, criação notável da comunidade estatística, é um exemplo do potencial de interligação entre ensino de conceitos teóricos e a sua concretização e aplicação. Eis algumas reflexões sobre o ensino de Estatística no Ensino Superior, resultantes de quatro décadas de experiência.

## 1 Introdução

A revolução informática das últimas décadas teve efeitos sísmicos, também na Estatística. As novas capacidades de recolha, armazenamento e computação provocaram um salto qualitativo na metodologia de análise estatística. Hoje em dia, qualquer um de nós tem à sua disposição mais capacidade de cálculo e de armazenamento do que dispunham os grandes centros informáticos em 1973, quando o autor começou o seu curso no Ensino Superior.

Tornou-se viável a aplicação em larga escala de metodologias conceptualmente pré-existentes como as regressões lineares múltiplas, as análises em componentes principais ou os modelos que mais tarde viriam a ser agrupados sob a designação de lineares generalizados. Surgiram novas classes de modelos, como os modelos mistos generalizados, e novas áreas de estudo como a estatística espacial. Metodologias até então impensáveis dada a sua natureza eminentemente computacional viram a luz do dia: reamostragens, redes neuronais, algoritmos de arrefecimento controlado (*simulated annealing*) e os algoritmos associados ao que se convencionou chamar *big data*, entre muitos outros. Esta transformação qualitativa representa um enorme desafio para o ensino da Estatística entendida em sentido lato, ou seja, incluindo o que por vezes se designa *análise de dados* ou *ciência dos dados*.

Poucos questionam hoje a importância da Estatística, cada vez mais omnipresente (para o bem e para o mal) nas nossas vidas. Ninguém questiona que a informática seja uma ferramenta indispensável na Estatística. Mas por detrás dum aparente consenso há muita diversidade – e mesmo divergência – de opiniões sobre os reflexos que tal importância deve ter nos programas e conteúdos do ensino. Paradoxalmente, existe uma resistência crescente ao ensino *dos conhecimentos de base* matemáticos, probabilísticos, algorítmicos e informáticos necessários à Estatística e análise de dados. Há apelos constantes a aligeirar o conteúdo teórico, reforçar o lado prático e aplicado das disciplinas e optar por receituários do tipo pronto-a-usar. As omeletes são muito cobiçadas, mas assegurar os ovos que as permitem confeccionar torna-se cada vez mais difícil, com os resultados previsíveis.

Naturalmente, cada contexto educativo é diferente. Os problemas e desafios colocados não são iguais para quem lecciona em cursos de Estatística, para quem lecciona disciplinas de Estatística em cursos com forte base matemática e/ou informática, ou para quem lecciona em cursos onde a quantificação e as metodologias com fundo matemático são encaradas com suspeição. Mas, apesar das diferenças, há questões e problemas comuns. Aqui ficam algumas reflexões sem

grandes pretensões, resultantes de quatro décadas de ensino numa escola superior de engenharias e ciências biológicas.

## **2 A dificuldade objectiva**

Há uma dificuldade objectiva no ensino da Estatística que é comum a outros campos do conhecimento. Trata-se da dificuldade de conciliar:

- o crescimento exponencial de conhecimentos (ou seja, de potencial matéria a leccionar);
- os níveis comparativamente constantes das nossas capacidades cognitivas e do nosso tempo de vida útil; e
- a tendência para a diminuição do tempo de leccionação que nos é disponibilizado, bem como da preparação com que os alunos chegam ao Ensino Superior.

As actuais metodologias estatísticas assentam sobre conhecimentos de base muito mais extensos do que há apenas alguns anos. A diversificação que acompanhou a explosão de técnicas estatísticas não deixa de exigir uma boa formação matemática de base, sobretudo em teoria das probabilidades, álgebra linear, teoria de matrizes e análise matemática. A estas, acrescenta-se a necessidade da algoritmia, de bases de dados, de bases informáticas sólidas, incluindo a programação. Simultaneamente, há cada vez mais metodologias e técnicas estatísticas para conhecer e aprofundar.

Acompanhamos com dificuldade esta explosão de conhecimentos. Se é verdade que do ponto de vista da evolução humana se pode falar num progresso das nossas capacidades cognitivas, é igualmente verdade que os tempos dessa evolução no plano individual não têm comparação com a rapidez do progresso científico colectivo, mesmo tendo em conta que a nossa esperança de vida quase duplicou no decurso do último século. O ensino da Estatística é, objectivamente, cada vez mais difícil.

A dificuldade é ainda maior se se tiver em conta que a formação prévia de muitos alunos que hoje chegam ao Ensino Superior apresenta lacunas e deficiências maiores do que há alguns anos atrás. Uma realidade universalmente constatada, apesar das resistências à sua explicitação (para uma discussão da situação em França, veja-se [1]).

### 3 O programa R e experiências de ensino

Remando em sentido contrário ao das dificuldades acima referidas, a revolução informática trouxe também enormes possibilidades ao ensino. Ao libertar-nos de pesados fardos computacionais, liberta tempo para a leccionação de conceitos de base. Dá vida e permite visualizar os resultados das análises e dos ajustamentos de modelos. Permite romper com a aridez de resultados conceptuais cuja tradução prática não era possível, e que em determinado momento se arriscavam a canalizar a Estatística para becos sem grande ligação à vida.

A comunidade estatística foi capaz de transformar esse potencial numa criação magnífica: o *software* livre R [6], assente na linguagem de programação estatística S [2]. Desafiando muitos lugares comuns, um programa não comercial, livre e gratuito, assente na colaboração mútua da comunidade estatística, transformou-se em poucos anos numa espécie de *lingua franca* e numa ferramenta indispensável ao ensino e aplicação da Estatística.

O grupo de Matemática do Instituto Superior de Agronomia (da actual Universidade de Lisboa) tem um longo historial de uso da linguagem S e do programa R no ensino, quase seguramente pioneiro no nosso país. Logo em 1995-96 o *software* comercial *S-Plus* foi introduzido em disciplinas do Mestrado em Matemática Aplicada às Ciências Biológicas (MMACB, entretanto extinto) e a partir de 1997 foram utilizadas versões pré-1.0.0 do programa R. No início deste século generalizou-se o uso do R em todas as disciplinas de Estatística no ISA. No MMACB também se utilizou o *XLisp-Stat* [7], outro programa livre estatístico com enormes potencialidades,



nomeadamente no campo dos gráficos dinâmicos (no século XX era uma novidade de peso ter janelas de diálogo que permitiam alterar em tempo real um gráfico), mas que infelizmente sucumbiu em 2005 à concorrência do R [3].

A introdução do R no ensino do ISA não foi indolor, nem a nível institucional, nem entre os alunos. Criticado por muitos colegas exteriores à comunidade estatística por ser um *software* “complicado”, “que está bem para matemáticos, mas não é adequado aos utilizadores”, o R é ainda hoje sujeito a críticas por parte de alguns alunos nos inquéritos pedagógicos. Essas críticas já não questionam tanto a importância da ferramenta, quanto o facto de esta não ser considerada parte da matéria a avaliar (“*ensinam R mas não avaliam se sabemos trabalhar com o R*”; “*muito do tempo em aula é ocupado com o programa R, também importante, que não é avaliado*”). A questão suscitada é relevante: o R é *matéria* ou apenas uma *ferramenta*? Se é matéria, o ensino de programação em R não deveria fazer parte do programa das disciplinas? Mas, nesse caso, as críticas à utilização do R não subirão de tom?

## 4 *Big data über alles?*

Em 1962, Tukey [8] escrevia um importante artigo de fundo (*The Future of Data Analysis*) que identificava problemas hoje evidentes e que era também um grito de revolta contra o excesso de teoria e formalismo na estatística. De forma premonitória, escrevia Tukey: “*Quatro influências principais operam sobre a análise de dados nos nossos dias: (i) as teorias formais da estatística; (ii) os cada vez mais rápidos desenvolvimentos dos computadores e dos dispositivos de visualização; (iii) o desafio que, em muitas áreas, representam os conjuntos de dados cada vez maiores e mais numerosos; (iv) a ênfase na quantificação, numa cada vez maior gama de disciplinas*”. A discussão sobre o papel e natureza da Estatística abrange a sua própria designação. Foram propostas as expressões *Análise de Dados* e *Ciência de Dados*. Mas estas discussões semânticas por vezes escondem

dem a essência do que está em causa. Como escreve Donoho [4] num número especial da revista *Journal of Computational and Graphical Statistics*, “*Para os estatísticos, este fenómeno [da Data Science Initiative] pode parecer intrigante. Os estatísticos vêem gestores a promover, como se fossem novidade, actividades que os estatísticos têm levado a cabo, diariamente, ao longo de toda a sua carreira e que eram consideradas correntes já nos tempos em que frequentavam os seus cursos avançados. A profissão estatística enfrenta um momento confuso: as actividades com que se preocuparam ao longo de séculos estão hoje na ribalta, embora se alegue que essas actividades são novinhas em folha, e sejam levadas a cabo (não tendo, na realidade, sido inventadas) por arrivistas e desconhecidos*”.

Por vezes a crítica ao ensino dos conceitos de base aparece sob a capa do apelo a ensinar Estatística “através de casos concretos”. Não é raro depararmo-nos com a tentativa de dar estatuto a essa abordagem através das novas designações como Ciência dos Dados. Mas como escreve Peng [5], “*o maior desafio ao ensino nas áreas da Ciência dos Dados é a sua dificuldade e potencialmente grande ineficiência [...] reduzindo o ensino a um desfile de casos particulares. Embora cada caso possa ser do interesse de alguns, é improvável que um qualquer caso seja de utilidade para todos. Em qualquer instituição de ensino superior, com recursos finitos, é impossível dar uma instrução formal sobre todos os casos particulares a todos quantos dela necessitem. É muito mais eficiente ensinar o modelo linear generalizado e o teorema limite central*”.

A necessidade dum novo quadro conceptual para a Estatística é muitas vezes ligada à generalização dos grandes conjuntos de dados (*big data*). O surto de grandes volumes de dados é reflexo da explosão das capacidades de recolha de dados através das omnipresentes redes informáticas, de sensores, *drones* ou computadores de pequeno porte e extremamente baratos, como os *Raspberry Pi*. Do ponto de vista estatístico a existência destes grandes volumes de dados, muitas vezes censitários, representa uma espécie de vingança da estatística descritiva, tantas vezes injustamente encarada como parente pobre. Mas Donoho [4] escreve: “*Podemos rejeitar de imediato o big data*

como critério significativo de distinção entre a estatística e a ciência de dados. [...] A própria designação 'estatística' foi inventada com o início dos esforços modernos de recolha de dados censitários, ou seja, dados completos sobre todos os habitantes de um país, por exemplo a França ou os Estados Unidos. Os dados dos censos são aproximadamente da escala dos actuais big data, mas existem há mais de 200 anos!'. Curiosamente, hoje discute-se intensamente a possibilidade de pôr fim aos censos populacionais, em parte pela existência de formas alternativas de recolha de dados, mas também em parte devido a considerações orçamentais e dificuldades logísticas, que revelam existirem outros factores em jogo.

A generalização de grandes conjuntos de dados, sendo incontestável, não é universal. Em muitas áreas de estudo o tempo e custos associados à recolha de dados são demasiado elevados para que seja realista encarar a existência de grandes amostras. Noutros contextos, a recolha de dados é uma operação destrutiva (pensemos na necessidade de abrir uma lata de conserva ou garrafa de vinho para efeitos de controlo de qualidade, ou ainda em medições que envolvam a destruição física ou mutilação de animais). Há também contextos em que, sendo possível recolher enormes massas de dados, a natureza ou importância da decisão a tomar com base nesses dados não justifica o investimento de recursos e tempo que essa recolha exige. Ou seja, haverá sempre a necessidade de amostragem, e portanto de técnicas de inferência estatística associadas à amostragem. Até mesmo em contextos de *big data*, há exemplos do recurso à selecção de amostras devido ao volume excessivo de dados disponível. Por vezes o *big* é *too big*.

Outro aspecto deve ser tido em conta quando se fala de *big data*: a sua frequente associação a áreas ou aplicações opacas, de origem comercial ou securitária/militar. A natureza não transparente de muitas das formas de recolha e análise de dados a partir das redes informáticas torna reais os perigos de manipulação e controlo, como é do conhecimento público no que respeita aos algoritmos de selecção, direccionamento ou mesmo censura de conteúdos de pesquisas. Esta opacidade, que é contrária ao espírito aberto e colaborativo

que presidiu ao desenvolvimento do programa R, convive mal com a transparência que é necessário assegurar nas actividades científicas e na sociedade em geral.

## 5 Ensino para quê?

Nos últimos anos, as dificuldades objectivas são acompanhadas por uma dificuldade crescente em encontrar vontade, horas e espaço curricular para ensinar os conceitos de base necessários.

No início deste milénio a reforma do ensino associada à Declaração de Bolonha de 1999 veio acompanhada de floreios verbais sobre “novos paradigmas de ensino” em que se daria a “substituição da transmissão de conhecimentos” pela “aquisição de competências” (como se fosse possível existirem competências sem conhecimentos). O ensino passaria a ser “centrado no aluno” (e pelos vistos já não no conhecimento). A concretização em Portugal da reforma de Bolonha traduziu-se no desaparecimento dum ciclo inteiro de ensino, os antigos Mestrados (que se seguiam às Licenciaturas de 5 anos), ou seja, a formação de especialização que era também utilizada por alunos com cursos iniciais noutras áreas para aprofundar os seus conhecimentos matemáticos e estatísticos. Do dia para a noite muitas disciplinas de especialidade e formação complementar desapareceram sem deixar rasto. Houve estabelecimentos do Ensino Superior em que a reforma de Bolonha foi mesmo aproveitada para reduzir horas lectivas ou extinguir disciplinas de Matemática, e até de Informática, nos novos 1ºs e 2ºs ciclos de ensino.

Rapidamente se comprovou que essas opções não asseguravam uma formação adequada, nomeadamente aos alunos que seguiam para Doutoramento. Foram sendo criadas, em substituição, componentes lectivas dos Doutoramentos. Mas propinas exorbitantes, novas regras impondo barreiras ao funcionamento de disciplinas com poucos alunos e o menor interesse dos alunos por disciplinas isoladas, não conducentes a habilitações literárias, inviabilizaram o funcionamento de muitas dessas novas componentes lectivas dos Doutoramentos. O

saldo foi seguramente prejudicial para o país.

A brutalidade dos cortes orçamentais que atingiu o Ensino Superior público em Portugal nesses mesmos anos tornou as coisas ainda mais complicadas. Chavões supostamente “modernos” (“promover o auto-estudo”; “reduzir as horas de contacto”; “hoje está tudo na *internet*, não vale a pena ensinar essas coisas”) reflectem muitas vezes pressões que não são essencialmente pedagógicas, mas sim de índole orçamental. Por detrás da grandiloquência dos chavões esconde-se, muitas vezes, o vazio.

Existem factores poderosos por detrás destas tendências destrutivas. Por um lado, a crescente comercialização do ensino, com a sua tendência inerente para desvalorizar a função que justifica a própria existência do ensino (ensinar), em detrimento de mais uma ‘oportunidade de negócio’ onde, a troco de propinas de milhares de euros, se ‘vendem’ certificados de habilitações, mesmo que estas habilitem realmente pouco. Uma lógica comercial em que ‘o cliente tem sempre razão’ e se o cliente não quer coisas difíceis, assim seja.

Existe também aquilo que podemos designar pelo paradoxo da tecnologia: se é verdade que o *desenvolvimento* tecnológico exige cada vez mais conhecimentos, é igualmente verdade que a *aplicação* da tecnologia e da inteligência artificial leva a que em muitos postos de trabalho (humanos) sejam necessárias cada vez menos qualificações. Os avanços tecnológicos tornam possível, embora não necessário nem inevitável, que cada vez menos pessoas, com formações cada vez mais baixas, desempenhem uma proporção crescente das necessidades laborais, reservando a formação de alto nível para um número muito reduzido de pessoas. O ensino *de massas* de alta qualidade deixa de ser uma necessidade, no sistema em que vivemos. E, no caso concreto de Portugal, corremos o risco de ver o ensino de alta qualidade ser essencialmente transferido para países menos periféricos do que o nosso, deixando-nos na posição de formadores de trabalhadores com baixas qualificações.

Jean-Paul Brighelli [1] escrevia em 2005: “*Nestes últimos anos, e pela primeira vez após três décadas, a procura de trabalhadores não qualificados aumentou de forma assinalável em França. E quanto*

*menos souberem, mais facilmente serão moldáveis e manobráveis à discrição*”. No seu polémico livro sobre a evolução do Ensino Secundário em França, Brighelli considera que as tendências de desvalorização do ensino são assumidas: “*Hoje, a escola morreu [...]. Mas a constatação desta morte programada, anunciada, uma constatação que é partilhada por todos — pais, alunos e professores — não é suficiente. É preciso compreender porque se destrói conscientemente a escola. [...] Quem não consegue ver que a ‘modernidade’ é, na realidade, um regresso ao obscurantismo? [...] Quem não consegue ver que a ‘formação’ que se obtém na escola moderna equivale a uma desqualificação massiva? [...] O neo-liberalismo fez regressar a miséria; é lógico que ao mesmo tempo reabilite a ignorância. Mas uma ignorância com diploma*”.

## 6 Em jeito de conclusão

A discussão sobre o ensino da Estatística no Ensino Superior não tem fim, até porque a realidade está em evolução permanente. Mas algumas ideias são intemporais.

- *O objectivo do ensino é, e será sempre, transmitir conhecimento*. Um bom sistema de ensino é aquele que *ensina*. A tentativa de opor “transmissão de conhecimentos” a “aquisição de competências” é não apenas uma falsa oposição. É perigosa, porque alimenta a ideia de que os conhecimentos são, em si mesmos, algo datado, ultrapassado, desnecessário e mesmo pernicioso. Esta espécie de niilismo educacional é contrário à ciência e ao progresso. O ensino não deve ter vergonha de ensinar, ou seja de transmitir conhecimentos, bases, resultados fundamentais em cada área. Pelo contrário, deve recuperar o orgulho de o fazer, mesmo que isso signifique não acompanhar certas modas (de duvidoso interesse e seguramente passageiras) e mesmo sabendo que isso exige esforço e trabalho, da parte de alunos e professores.

- *A transmissão de conhecimentos é, objectivamente, cada vez mais difícil*, dada a explosão de conhecimentos e o tempo essencialmente constante, ou em decréscimo, disponível para esse fim. Torna-se fundamental definir correctamente as prioridades. A ideia hoje em voga de que “não vale a pena ensinar tanta coisa” porque “está tudo na *internet*” não difere, na sua essência, de afirmar em 1950 que “não vale a pena porque está tudo nos livros” ou de afirmar há 2000 anos que “não vale a pena porque está tudo nos papiros”. É incontestável e altamente positivo que exista hoje uma imensidão de conhecimentos à distância de um *clic*. Mas a questão de fundo é que *o aproveitamento útil da informação disponível só é possível se o potencial receptor tiver a capacidade de compreender, assimilar e filtrar* a autêntica *overdose* de informação à sua disposição. E essa capacidade adquire-se com uma sólida formação de base, que é assegurada pelo ensino que recebemos.
- Deve evitar-se colocar como alternativas irredutíveis o ensino dos conhecimentos de base (ensino em profundidade) e o ensino, necessariamente mais superficial, de uma vasta gama de temas (ensino em extensão). O ensino em extensão tem a virtude de alargar horizontes, mas necessariamente em detrimento da compreensão mais profunda das ferramentas utilizadas. Por sua vez, o ensino em profundidade (necessariamente mais afunilado), ao fomentar a compreensão e ajudar a dominar a metodologia, autonomiza o aluno. Se formos forçados a optar por uma dessas alternativas, *é preferível ensinar as bases do conhecimento*. E isso é ainda mais importante nas fases iniciais dos percursos escolares, nomeadamente nos primeiros ciclos do Ensino Superior. É essa ‘transferência de tecnologia’ que permite ao estudante pensar pela sua cabeça. Sacrificar os resultados fundamentais de cada área do conhecimento no altar duma alegada “adaptação aos tempos” ou “ao mercado de trabalho” significa, perversamente, privar o aluno da capacidade de se adaptar às recorrentes, e cada vez mais rápidas,

evoluções tecnológicas e metodológicas.

- A *integração de conhecimentos*, que é cada vez mais importante para enfrentar as complexidades crescentes dos nossos dias, *não se faz com base em generalidades* ou “especialistas da integração”, mas com base na compreensão profunda de determinadas áreas, ao mesmo tempo que se têm conhecimentos suficientes para dialogar com pessoas de outras áreas. Abdicar dum ensino sólido e de qualidade condenaria o nosso país a uma posição cada vez mais periférica e subalterna.

De uma coisa podemos estar certos: daqui a muitos anos continuará a haver necessidade de analisar, modelar e extrair informação de dados. A Estatística (seja qual for a sua designação) não vai desaparecer. E será necessário continuar a ensiná-la.

## Agradecimentos

Financiamento FCT - UID/MAT/00006/2019.

## Referências

- [1] Brighelli, J.-P. (2005). *La Fabrique du crétin. La mort programmée de l'école*. Gallimard.
- [2] Chambers, J.M. & Hastie, T.J. (1991) *Statistical Models in S*. Chapman & Hall.
- [3] de Leeuw, Jan (2005). On Abandoning XLISP-STAT. *Journal of Statistical Software*. 13 (7). ISSN 1548-7660
- [4] Donoho, D. (2017). 50 Years of Data Science, *Journal of Computational and Graphical Statistics* 26(4), 745-766.



- [5] Peng, R.D. (2017). Comment on “50 Years of Data Science”, *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 26(4), p.767.
- [6] R Core Team (2019). R: A language and environment for statistical computing. *R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria*. URL <https://www.R-project.org/>
- [7] Tierney, L. (1990). *LISP-STAT: An Object-Oriented Environment for Statistical Computing and Dynamic Graphics*. John Wiley & Sons. ISBN 978-0-470-31756-3.
- [8] Tukey, J.W. (1962) The Future of Data Analysis. *The Annals of Mathematical Statistics*, 33, 1-67.



# An identity between Welch's approximate and Scheffé's exact $t$ solutions to the Behrens-Fisher problem

Luís Oliveira

Fontwell - Import & Export, Funchal, Portugal, *jlnoliveira@outlook.com*

Sílvia Velosa

Department of Mathematics - University of Madeira; Centre of Statistics and its Applications - University of Lisbon, *sfilipe@uma.pt*

**Keywords:** Behrens-Fisher problem; Welch  $t$  test; Scheffé's test; Resampling; Permutation tests

**Abstract:** We show a connection between B.L. Welch's approximate two-sample  $t$ -test and the exact  $t$  solution to the Behrens-Fisher problem developed by Henry Scheffé: the Welch test statistic is the result of averaging the variance estimators in the denominator of the Scheffé test statistic for all pairings of the two samples.

## 1 Introduction

The Behrens-Fisher problem is that of making inferences about the difference between two population means, when the associated population variances are unknown and possibly different. It is an old and very well-known problem in statistical inference, and it remains a relevant problem in daily applications of statistics, from the most trivial to the very sophisticated. In this paper we present and prove a connection between two old solutions of this problem: B.L. Welch's solution, which is approximate, and Henry Scheffé's solution, which is exact (in the sense that the distribution of the test statistic under  $H_0$  is completely specified irrespective of the unknown population variances), but involves a randomization procedure.

Let  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_{n_x})$  and  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_{n_y})$ , where  $n_x \leq n_y$ , be independent random samples of  $X \sim N(\mu_X, \sigma_X^2)$  and  $Y \sim N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$ , respectively. The familiar Welch approximate  $t$ -test [13] is based on referring the test statistic

$$T = \frac{\bar{X} - \bar{Y}}{\sqrt{\frac{S_X^2}{n_x} + \frac{S_Y^2}{n_y}}}, \quad (1)$$

under  $H_0 : \mu_X - \mu_Y = 0$ , to an approximating  $t$  distribution with variable degrees of freedom determined from the sample values by the method of moments. Another early solution to the Behrens-Fisher problem, developed by Scheffé [10, 11], is based on a statistic

$$T_j = \frac{\bar{X} - \bar{Y}}{\sqrt{\frac{S_{U_j}^2}{n_x}}}, \quad (2)$$

where the variance estimator  $S_{U_j}^2$  in the denominator is obtained as follows:

- (i) Arbitrarily match the two samples into  $n_x$  pairs  $(X_1, Y_{1j}), (X_2, Y_{2j}), \dots, (X_{n_x}, Y_{n_x j})$ , where the second subscript  $j$  stands for the particular pairing of the two samples; and
- (ii) Calculate the sample of weighted differences  $U_{ij} = X_i - cY_{ij}$  ( $i = 1, \dots, n_x$ ), where  $c = \sqrt{n_x/n_y}$ , and their variance  $S_{U_j}^2$ .

Welch's test has sometimes been criticized for not being exact. Indeed it requires two levels of approximation:

- (a) The distribution of the statistic  $T$ , which is cumbersome and at any rate depends on the unknown population variances  $\sigma_X^2$  and  $\sigma_Y^2$  in general, is approximated by a simpler  $t$ -distribution via moment matching [14].
- (b) The degrees of freedom of the approximate  $t$ -distributions, which are a function of the population variances, must be estimated by the method of moments, replacing  $\sigma_X^2$  and  $\sigma_Y^2$  with  $S_X^2$  and  $S_Y^2$ .

Nonetheless, Welch's test is the frequentist alternative to Student's two sample  $t$ -test most commonly given by textbooks and software for the case when homogeneity of the population variances cannot be assumed. And in fact, whenever it has been compared to other alternatives, it has usually shown to be an adequate compromise between ease of calculation, size stability, and good statistical power [5, 7, 8].

Scheffé's statistic  $T_j$  is remarkable for being a pivot with an *exact*  $t_{n_x-1}$  distribution under  $H_0$  regardless of the values of the variances of the two normal populations, and having some optimal properties within the class of exact solutions based on the  $t$ -distribution [6, 10]. Yet, in a later review of proposed solutions to the Behrens-Fisher problem [12], Scheffé himself advised against the use of his solution, due to two serious shortcomings:

- (a) It has lower power than other simple solutions, such as Welch's approximate  $t$ ; and
- (b) As it involves an arbitrary pairing of the  $\mathbf{X}$  and  $\mathbf{Y}$  samples, it might invite unscrupulous analysts to pick and choose the pairs. In his own words:

*"But what if the user of my confidence interval does not like the width he obtained and decides to randomize again?"*

For an example with small samples and simple values, set  $\mathbf{X} = (4,3)$  and  $\mathbf{Y} = (1,2,5)$ . Then  $n_x = 2$ ,  $n_y = 3$ ,  $\bar{X} = 3.5$ ,  $\bar{Y} = 2.67$ , and  $c = 0.816497$ . The following table shows the possible ways to pair the two samples, and the means of the subsamples  $\mathbf{Y}_j$  of  $\mathbf{Y}$ .

$\mathbf{X}$	$\mathbf{Y}_j$					
4	1	1	2	2	5	5
3	2	5	1	5	1	2
$\bar{Y}_j$	1.5	3	1.5	3.5	3	3.5

The next table displays the values of the weighted differences, their variances, and the Scheffé statistics for all pairings.

$j$	1	2	3	4	5	6
$U_{1j}$	3.184	3.184	2.367	2.367	-0.082	-0.082
$U_{2j}$	1.367	-1.082	2.184	-1.082	2.184	1.367
$S_{U_j}^2$	1.6507	9.0994	0.0167	5.9478	2.5674	1.0498
$T_j$	0.914	0.389	9.083	0.481	0.733	1.146

For instance, for the test  $H_0 : \mu_X = \mu_Y$  vs.  $H_1 : \mu_X \neq \mu_Y$  at the liberal significance level  $\alpha = 0.20$  (since the samples are so small), Scheffé's statistic has 1 degree of freedom and the critical values  $\pm 3.078$ . If we choose the test statistic  $T_1 = 0.914$  then the difference between the means is not significant, but if we picked  $T_3 = 9.083$  we would reach the opposite conclusion.

The present work grew from the idea that one way to overcome concerns about the arbitrariness of the sample pairs would be to average them out. It turns out that averaging the Scheffé's variances leads back to Welch's statistic. This equivalence had been noted computationally by Ames [1], who remarked that it "can be verified exactly in permutation resampling", but to our knowledge no general proof is available in the literature. We give a formal proof of the identity, obtained as part of J. L. N. Oliveira's master's dissertation [9].

## 2 Main result

**Theorem 2.1** *Suppose that Scheffé's statistic  $T_j$ , given in (2), is modified by replacing the variance of the weighted differences  $S_{U_j}^2$ , in an arbitrary pairing of the samples  $\mathbf{X}$  and  $\mathbf{Y}$ , by the arithmetic average of all  $p = n_y!/(n_y - n_x)!$  possible pairings of the two samples:*

$$\bar{S}_U^2 = \frac{S_{U_1}^2 + S_{U_2}^2 + \cdots + S_{U_p}^2}{p}.$$

Then Welch's  $t$  statistic, given in (1), is obtained as result, i.e.:

$$T = \frac{\bar{X} - \bar{Y}}{\sqrt{\frac{\bar{S}_U^2}{n_x}}}. \quad (3)$$

**Proof: Outline:** We split the proof into four parts: in Step I we expand  $\bar{S}_U^2$  in terms of the empirical variances and covariances of the original variables  $X$  and  $Y$  as  $\bar{S}_U^2 = S_X^2 + c^2 \bar{S}_Y^2 - 2c \bar{S}_{XY}$ ; in Step II we identify the number of possible pairings  $p$ ; and in Step III and Step IV we show that  $\bar{S}_Y^2 = S_Y^2$  and  $\bar{S}_{XY} = 0$  for arbitrary samples  $\mathbf{X}$  and  $\mathbf{Y}$ , from which it follows  $\bar{S}_U^2 = S_X^2 + c^2 S_Y^2$  and

$$\frac{\bar{S}_U^2}{n_x} = \frac{S_X^2 + c^2 S_Y^2}{n_x} = \frac{S_X^2}{n_x} + \frac{S_Y^2}{n_y},$$

which proves the theorem.

**Step I – Analysis of variance:** Let  $\mathbf{Y}_j = (Y_{1j}, \dots, Y_{n_{xj}})$  be the subsample defined by pairing  $n_x$  arbitrary observations of the full sample  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_{n_x}, \dots, Y_{n_y})$  with those of the smaller sample  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_{n_x})$ , and let  $\mathbf{U}_j = (U_{1j}, \dots, U_{n_{xj}})$  be the respective sample of Scheffé weighted differences, where  $j = 1, \dots, p$  and  $p$  is the number of possible pairings. Since  $U_{ij} = X_i - cY_{ij}$  for  $i = 1, \dots, n_x$ , the average of each  $\mathbf{U}_j$  can be written as

$$\bar{U}_j = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} U_{ij} = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} X_i - \frac{c}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} Y_{ij} = \bar{X} - c\bar{Y}_j.$$

Adding the sums of squares for all  $\mathbf{U}_j$  samples, a simple analysis of

variance-type decomposition shows that

$$\begin{aligned} (n_x - 1)p\bar{S}_U^2 &= (n_x - 1) \sum_j S_{U_j}^2 = \sum_j \sum_i (U_{ij} - \bar{U}_j)^2 \\ &= p(n_x - 1)S_X^2 + c^2 \sum_j (n_x - 1) S_{Y_j}^2 \\ &\quad - 2c \sum_j \sum_i (X_i - \bar{X}) (Y_{ij} - \bar{Y}_j), \end{aligned}$$

or  $\bar{S}_U^2 = S_X^2 + c^2 \bar{S}_Y^2 - 2c \bar{S}_{XY}$ , where

$$\bar{S}_Y^2 = \frac{S_{Y_1}^2 + S_{Y_2}^2 + \cdots + S_{Y_p}^2}{p}$$

is the average of the variances of all subsamples  $\mathbf{Y}_j$ , and

$$\bar{S}_{XY} = \frac{1}{p(n_x - 1)} \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^{n_x} (X_i - \bar{X})(Y_{ij} - \bar{Y}_j). \quad (4)$$

is the average of the covariances between  $\mathbf{X}$  and  $\mathbf{Y}_j$  for all pairs.

**Step II – Number of sample pairs:** The possible ways to pair the samples  $\mathbf{X}$  and  $\mathbf{Y}$  can be represented by the two matrices

$$\begin{array}{c} \left[ \begin{array}{c|cccc} X_1 & Y_{11} & Y_{12} & \cdots & Y_{1p} \\ X_2 & Y_{21} & Y_{22} & \cdots & Y_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n_x} & Y_{n_x 1} & Y_{n_x 2} & \cdots & Y_{n_x p} \end{array} \right] \\ \begin{array}{ccccccc} & \uparrow & \uparrow & \uparrow & & \uparrow \\ \text{sample} & & & & & \\ \text{variances} & = & S_X^2 & S_{Y_1}^2 & S_{Y_2}^2 & \cdots & S_{Y_p}^2 \end{array} \end{array}$$

In the  $n_x \times p$  matrix  $\mathbf{A}$ , each column represents one of the subsamples of  $\mathbf{Y}$  obtained from pairing  $n_x$  of its observations with those of  $\mathbf{X}$



and discarding the remaining  $n_y - n_x$ . Since all observations in the smaller sample  $\mathbf{X}$  are used in every pairing, the order of the elements of  $\mathbf{X}$  can be treated as fixed with no loss of generality. The possible pairings of the two samples can thus be identified with the partial permutations of the  $n_y$  observations in the larger sample  $\mathbf{Y}$  into  $n_x$ -sized sequences, whose number is well-known to be

$$p = \frac{n_y!}{(n_y - n_x)!}. \quad (5)$$

**Step III – Average of the sample means and covariances:**

We denote by  $Y_k$  a generic observation from the full sample  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_{n_y})$ , whose mean and variance are defined as

$$\bar{Y} = \frac{1}{n_y} \sum_{k=1}^{n_y} Y_k \quad \text{and} \quad S_Y^2 = \frac{1}{n_y - 1} \sum_{k=1}^{n_y} (Y_k - \bar{Y})^2.$$

In each row of the permutation matrix  $\mathbf{A}$ , the original observations  $Y_k$  occur the same number of times,  $p/n_y$ , so the sum of the means of all subsamples (columns in  $\mathbf{A}$ ) equals

$$\sum_{j=1}^p \bar{Y}_j = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} \left( \sum_{j=1}^p Y_{ij} \right) = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} \left( \frac{p}{n_y} \sum_{k=1}^{n_y} Y_k \right) = p\bar{Y},$$

which is equivalent to

$$\frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \bar{Y}_j = \bar{Y}. \quad (6)$$

In addition we have

$$\sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^{n_x} (X_i - \bar{X})(Y_{ij} - \bar{Y}_j) = \sum_{i=1}^{n_x} (X_i - \bar{X}) \sum_{j=1}^p (Y_{ij} - \bar{Y}_j) = 0,$$

or  $\bar{S}_{XY} = 0$ , view of (4).

**Step IV – Average of sample variances:** The identity  $\overline{S}_Y^2 = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p S_{Y_j}^2 = S_Y^2$ , or equivalently

$$\sum_{j=1}^p S_{Y_j}^2 = pS_Y^2, \quad (7)$$

is trivial if  $n_x = n_y$ , since then all variances  $S_{Y_j}^2$  have the same terms as  $S_Y^2$ .

For  $n_x = 2, \dots, n_y - 1$ , the equality (7), i.e.  $\overline{S}_Y^2 = S_Y^2$ , can be established by induction in  $n_x$  as follows. If  $n_x = 2$ , then for any  $n_y \geq 2$  the matrix  $\mathbf{A}$  will have an even number  $p = n_y(n_y - 1)$  of columns, which can be grouped into inverse permutations  $(Y_k, Y_{k'})$  and  $(Y_{k'}, Y_k)$ , which contribute to the sum of squared deviations with

$$\left[ \left( Y_k - \frac{Y_k + Y_{k'}}{2} \right)^2 + \left( Y_{k'} - \frac{Y_k + Y_{k'}}{2} \right)^2 \right] \times 2 = (Y_k - Y_{k'})^2.$$

Adding for all columns we obtain an expression for the sample variance, ([3], pp. 237–238, ex. 5.9)

$$\sum_{k' < k} (Y_k - Y_{k'})^2 = n_y(n_y - 1)S_Y^2 = pS_Y^2,$$

from which (7) follows.

Considering now  $2 \leq n_x < n_y$ , let us write  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_{n_x}$  for the matrix with the  $p = p_{n_x}$  partial permutations of  $\mathbf{Y}$  into  $n_x$ -sized sequences, and  $\overline{Y}_{j, n_x}$  and  $S_{j, n_x}^2$  ( $j = 1, \dots, p_{n_x}$ ) for the means and variances of the columns of  $\mathbf{A}_{n_x}$ . Let also  $\mathbf{A}_{n_x+1}$  be a matrix with the  $p_{n_x+1}$  partial permutations of  $\mathbf{Y}$  into  $(n_x + 1)$ -sized sequences, and  $\overline{Y}_{j, n_x+1}$  and  $S_{j, n_x+1}^2$  ( $j = 1, \dots, p_{n_x+1}$ ) be the means and variances of the columns of  $\mathbf{A}_{n_x+1}$ . From (5) we know that  $p_{n_x} = p = n_y!/(n_y - n_x)!$ , so the number of columns in  $\mathbf{A}_{n_x+1}$  is

$$p_{n_x+1} = \frac{n_y!}{(n_y - n_x - 1)!} = (n_y - n_x)p.$$

Suppose now that for a given  $n_x \in \{2, 3, \dots, n_y - 1\}$  we have the identity

$$\sum_{j=1}^{p_{n_x}} S_{j,n_x}^2 = p_{n_x} S_Y^2. \quad (8)$$

Next recall the following recurrence relation for the sample variance: if a new observation  $Y_{n+1}$  is added to a sample  $\mathbf{Y}_n = (Y_1, \dots, Y_n)$  with mean  $\bar{Y}_n$  and variance  $S_n^2$ , then the mean  $\bar{Y}_{n+1}$  and the variance  $S_{n+1}^2$  of the new sample  $\mathbf{Y}_{n+1} = (Y_1, \dots, Y_n, Y_{n+1})$  can be obtained from the original ones as (see, e.g., [3], p. 238, ex. 5.16):

$$\bar{Y}_{n+1} = \frac{n\bar{Y}_n + Y_{n+1}}{n+1},$$

$$nS_{n+1}^2 = (n-1)S_n^2 + \frac{n+1}{n} (Y_{n+1} - \bar{Y}_{n+1})^2.$$

Applying the former to each column of  $\mathbf{A}_{n_x+1}$  and then adding for all columns yields

$$\sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} \sum_{i=1}^{n_x+1} (Y_{ij} - \bar{Y}_{j,n_x+1})^2 = \sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} n_x S_{j,n_x+1}^2 \quad (9)$$

$$= (n_x - 1) \sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} S_{j,n_x}^2 + \frac{n_x + 1}{n_x} \sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} (Y_{n_x+1,j} - \bar{Y}_{j,n_x+1})^2. \quad (10)$$

With respect to the first term on the right hand side of the previous equation, notice that each column of the matrix  $\mathbf{A}_{n_x+1}$  is formed by appending to a column of  $\mathbf{A}_{n_x}$  one of the  $n_y - n_x$  elements of  $\mathbf{Y}$  which was missing from the column. Thus, adding the variances  $S_{j,n_x}^2$  for all columns of  $\mathbf{A}_{n_x+1}$  gives the sum of the variances  $S_{j,n_x}^2$  for all columns of  $\mathbf{A}_{n_x}$  multiplied by  $n_y - n_x$ . Considering this fact and using the induction hypothesis (8), we get

$$\sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} S_{j,n_x}^2 = (n_y - n_x) \sum_{j=1}^{p_{n_x}} S_{j,n_x}^2 = (n_y - n_x) p S_Y^2.$$

As for the second term on right hand side of equation (10), given the symmetry of the problem – every row of  $\mathbf{A}_{n_x+1}$  is a permutation of every other – and recalling (9), the sum is identical for all  $n_x + 1$  rows, and therefore

$$\sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} (Y_{n_x+1,j} - \bar{Y}_{j,n_x+1})^2 = \frac{1}{n_x + 1} \sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} n_x S_{j,n_x+1}^2.$$

Substituting the last two expressions derived into (10) and solving for  $\sum S_{j,n_x+1}^2$ , we conclude that

$$\sum_{j=1}^{p_{n_x+1}} S_{j,n_x+1}^2 = (n_y - n_x) p S_Y^2 = p_{n_x+1} S_Y^2. \quad \text{q.e.d.}$$

**Steps III–IV bis – Alternate proof:** The proof can be shortened if we regard the modified Scheffé statistic defined in Theorem 1 as the result of a two-stage sampling. Given the original samples  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_{n_x})$  and  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_{n_y})$ , with  $n_x \leq n_y$ , the partial permutations  $\mathbf{Y}_j = (Y_{1j}, \dots, Y_{n_x j})$  of the larger sample correspond to the samples of size  $n_x$  that can be drawn, in a simple random sampling plan (without replacement), from the finite *population*  $\mathbf{Y}$ . Under this interpretation, the means  $\bar{Y}_j$  and the variances  $S_{Y_j}^2$  of the permutations are nothing more than the possible realizations of the usual estimators of the population mean  $\bar{Y}$  and variance  $S_Y^2$ . Thus the identities (6) and (7) simply express the well-known fact [see for instance ([2], pp. 24-28) or ([4], pp. 20-27)] that these estimators are unbiased in the finite population sampling sense, that is

$$E(\bar{\bar{Y}}) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \bar{Y}_j = \bar{Y} \quad \text{and} \quad E(\bar{\bar{S}}^2) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p S_{Y_j}^2 = S_Y^2.$$

### 3 Concluding remarks

Given that  $X \sim N(\mu_X, \sigma_X^2)$  and  $Y \sim N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$  are independent by assumption, we have  $\sigma_U^2 = \text{var}(U) = \text{var}(X - cY) = \sigma_X^2 + c^2 \sigma_Y^2$ .

We remark that in the definition of  $\bar{S}_U^2$ ,

$$\bar{S}_U^2 = \frac{S_{U_1}^2 + S_{U_2}^2 + \cdots + S_{U_p}^2}{p},$$

each term  $S_{U_j}^2$  is an unbiased estimator of  $\sigma_U^2$ , since it is the empirical variance of a random sample  $(U_{1j}, \dots, U_{n_x j})$  of the variable  $U$ . Hence their arithmetic average  $\bar{S}_U^2$  is also an unbiased estimator of  $\sigma_U^2$  (even though the terms are correlated in general).

The transformation from Scheffé's statistics  $T_j$  to Welch's  $T$ , and more specifically the statistic  $\bar{S}_U^2$ , can thus be viewed as a kind of *jackknife*:  $n_x$  elements of the larger sample are randomly chosen to be paired with those of the smaller sample while the remaining  $n_y - n_x$  are deleted; then the partial variances  $S_{U_j}^2$  are calculated for each permutation, and these estimates are averaged.

It seems worthy of note that, as was acknowledged by Henry Scheffé, each instance of his test has poor statistical power but Welch's  $t$ , which aggregates them all, has been consistently shown to have satisfactory power [12]. Thus a simple randomization procedure, in this case permutation followed by averaging, can significantly enhance the performance of a statistical test. It is our view that this further legitimizes the use of Welch's test, sometimes disregarded because of not being exact.

## Acknowledgements

This work is partially financed by national funds through FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia under the project UIDB/00006/2020. We thank the referees for their helpful corrections and suggestions.

## References

- [1] Ames, M. H. (1996). More on the means comparison with unequal variances problem, *Journal of Biopharmaceutical Statistics* 6, 177–183.
- [2] Barnett, V. (1991). *Sample Survey: Principles and Methods*. Edward Arnold.
- [3] Casella, G., Berger, R. L. (2002). *Statistical Inference*, 2nd Edition. Duxbury.
- [4] Cochran, W. G. (2007). *Sampling Techniques*. John Wiley & Sons.
- [5] Davenport, J., Webster, J. (1975). The Behrens-Fisher problem, an old solution revisited. *Metrika* 22. 1, 47–54.
- [6] Kendall, M. G., Stuart, A. (1961). *The Advanced Theory of Statistics, II: Inference and Relationship*. Griffin.
- [7] Lee, A. F., Gurland, J. (1975). Size and power of tests for equality of means of two normal populations with unequal variances. *Journal of the American Statistical Association* 70. 352, 933–941.
- [8] Moser, B. K., Stevens, G. R., Watts, C. L. (1989). The two sample t test versus Satterthwaite's approximate F test. *Communications in Statistics — Theory and Methods* 11, 3963–3975.
- [9] Oliveira, J. L. N. (2018). *Variantes da solução de Scheffé para o problema de Behrens-Fisher baseadas em amostragem*, Master's Thesis, University of Madeira, Portugal.
- [10] Scheffé, H. (1943). On solutions of the Behrens-Fisher problem, based on the t-distribution. *The Annals of Mathematical Statistics* 14, 35–44.

- [11] Scheffé, H. (1944). A note on the Behrens-Fisher problem. *The Annals of Mathematical Statistics* 15, 430–432.
- [12] Scheffé, H. (1970). Practical solutions of the Behrens-Fisher problem. *Journal of The American Statistical Association* 65, 1501–1508.
- [13] Welch, B. L. (1938). The significance of the difference between two means when the population variances are unequal. *Biometrika* 29, 350–362.
- [14] Welch, B. L. (1956). Note on some criticisms made by Sir Ronald Fisher. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* 18, 297–302.





# Combining various dissimilarity measures for clustering electricity market prices

Margarida G. M. S. Cardoso

Instituto Universitário de Lisboa (ISCTE-IUL), Business Research Unit (BRU-IUL), *margarida.cardoso@iscte-iul.pt*

Ana Martins

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (ISEL),  
*ana.martins@isel.pt*

João Lagarto

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (ISEL), INESC-ID,  
*joao.lagarto@isel.pt*

**Keywords:** Electricity markets; Time series; Clustering validation

**Abstract:** The analysis of electricity markets of the European countries aims to better understand their degree of integration, which is relevant for the development of an internal market of electricity in the European Union.

This study resorts to clustering of time series of hourly prices of electricity (in €/MWh) observed in the day-ahead market in 2018. The proposed approach relies on the combination of different dissimilarity measures which can capture differences in time series trends, (prices) values, cyclical behaviors and autocorrelation patterns. The results obtained, enable to provide some insights on the role of the different dissimilarity measures in the clustering process. Furthermore, they provide a clustering solution with coherent substantive interpretation and, interestingly, one that reveals the natural patterns of geographic proximity.

# 1 Introduction

The development of an internal market of electricity has long been a goal of the European Union, since it enables European citizens and businesses to choose their supplier, creates new business opportunities and enhances cross-border trade with the purpose of ensuring efficiency gains and competitive prices, and contributes to security of supply and sustainability.

In electricity markets, power producers offer their electricity production at a given price. Producers' offers are ordered by economic merit order, i.e., from the lowest to the highest price, and this gives rise to the supply curve. Buyers (retailers and big consumers) bid for the electricity they want to acquire at a given price. Buyers' bids are also ordered by economic merit order, which in this case is from the highest to the lowest price, thus generating the demand curve. The market price is defined as the price for which the supplied quantity is equal to the bought quantity, i.e., market price and quantity are set at the intersection of the supply and demand curves. Shifts in demand and in supply induce different hourly prices, i.e., price variability during the day.

In order to better understand the degree of integration of the electricity markets of different European countries, we cluster time series regarding each country's day-ahead electricity market prices.

The electricity markets under study are the MIBEL, the Italian, the Nord Pool, the French and the German markets. The MIBEL is the Iberian electricity market and has two price regions: Portugal and Spain, MLPT and MLES, respectively. Italy is divided into six price regions: IT\_CNOR, IT\_CSUD, IT\_NORD, IT\_SARD, IT\_SICI and IT\_SUD. The Nord Pool market incorporates seven countries: Sweden (with four areas Np\_SE1, Np\_SE2, Np\_SE3 and Np\_SE4), Denmark (with two areas Np\_DK1 and Np\_DK2), Norway (with six areas Np\_Oslo, Np\_Kr.sand, Np\_Bergen, Np\_Molde, Np\_Tr.heim, Np\_Tromsø), Latvia, Lithuania, Finland and Estonia.

Clustering base data are hourly prices of electricity (in €/MWh) for 26 regions of Europe, observed in the day-ahead market in 2018.

This paper is organized as follows. Section 2 presents a brief literature review. In Section 3 the methodological approach is introduced. Section 4 presents the experiments results and the selected clustering solution. Finally, in Section 5, the main conclusions of this work are presented.

## 2 Literature review

Clustering methods aim to organize a data set into well separated groups, where similar items are within the same group and dissimilar items are in different groups. Since time series data are common in diverse scientific domains, the clustering of time series has been a topic of interest in the literature (e.g.[1]). Several alternative approaches have been proposed for grouping time series, namely concerning the clustering method and the adopted proximity measure between two time series - e.g.[1],[2]. The choice of a dissimilarity or a distance measure is a critical issue in clustering time series and it can be defined by considering the raw time series data, some features vector extracted from data or by comparing the parameters of underlying time series models [3]. Many works have applied clustering methods to extract useful information from the electricity price time series. In [4], different clustering algorithms were applied, in particular Ward hierarchical method and a Self-Organizing Map, to obtain diverse daily profiles of consumption, wind generation and electricity spot prices. These profiles were then used to simulate residential demand response programs and small-scale distributed energy storage systems.

Cluster analysis has also been used as a way of pre-processing the input data for the forecasting of the demand or of the electricity price. The goal is to identify homogeneous groups which later can be used to improve the forecasts and eventually to detect outliers (e.g.[5],[6],[7]).

### 3 Methodology

The proposed approach relies on the use of different distance measures between time series that will enable to capture diverse aspects of the differences between them. Several experiments are conducted to combine these distances. A clustering method able to deal with the integration of the various dissimilarities measures is presented and a process of evaluating the alternative solutions obtained is addressed. The analysis regards hourly day-ahead electricity prices' time series data referring in 26 European electricity market zones.

#### 3.1 Distance measures

Alternative distance measures between two time series  $x_t$  and  $y_t$ , ( $t = 1, \dots, T$ ) provide different insights regarding the differences between them, which can be combined to provide a better clustering solution. Namely, we consider the following distance measures: Euclidean ( $d_{Euclid}$ ), a Pearson correlation based measure ( $d_{Pearson}$ ), a Periodogram based measure ( $d_{Period}$ ) and an Autocorrelation based measure ( $d_{Autocorr}$ ).

The Euclidean distance, ( $d_{Euclid}$ ), yields the sum of Euclidean distances corresponding to each pair  $(x_t, y_t)$  which captures differences in scale.

The Pearson correlation based measure takes into account linear increasing and decreasing trends over time. In this work we resort to a measure suggested in [9]

$$d_{Pearson} = \sqrt{\frac{1 - r_{x_t, y_t}}{2}}, \quad (1)$$

where  $r_{x_t, y_t}$  represents the Pearson correlation.

Let  $P_x(w_j)$  be the periodogram of time series  $x_t$  at frequencies  $w_j = 2\pi j/n$ ,  $j = 1, \dots, [n/2]$  in the range 0 to  $\pi$ , being  $[n/2]$  the largest

integer less or equal to  $n/2$ ,

$$P_x(w_j) = \left( \frac{1}{n} \right) \left| \sum_{t=1}^T x_t e^{-itw_j} \right|^2. \quad (2)$$

The Periodogram based measure [10] considers the Euclidean distances between the Periodograms  $P_x(w_j)$  and  $P_y(w_j)$  of time series  $x_t$  and  $y_t$ , respectively. It expresses the contribution of the various frequencies or cyclical components to the variability of the series,

$$d_{Period} = \left( \sum_{j=1}^{\left\lfloor \frac{T}{2} \right\rfloor} (P_x(w_j) - P_y(w_j))^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3)$$

Finally, the Autocorrelation based distance [3] calculates Euclidean distances between autocorrelation structures, comparing the series in terms of their dependence on past observations

$$d_{Autocorr} = \left( \sum_{l=1}^L (r_l(x_t) - r_l(y_t))^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

where  $r_l(x_t)$  and  $r_l(y_t)$  represent the estimated autocorrelations of lag  $l$  of  $(x_t)$  and  $(y_t)$ , respectively. The four referred distances are implemented in the R package "TSclust" [3]. In order to combine all the distances, each one is firstly normalized using a min-max transformation,

$$norm(d(x_{t_i}, x_{t_j})) = \frac{d(x_{t_i}, x_{t_j}) - \min\{d(x_t, x_t)\}}{\max\{d(x_t, x_t)\} - \min\{d(x_t, x_t)\}}. \quad (5)$$

Then, a convex combination of the four (normalized) distances is considered in the clustering process, aiming to incorporate the different perspectives that each distance measure provides to the clustering solution.

### 3.2 Clustering algorithm

The K-Medoids algorithm is adopted for clustering (we use R package "cluster"). It aims at the minimization of the distance of objects belonging to a cluster from the cluster's medoid, for all clusters. It generalizes K-Means using arbitrary-defined distance measures and it is somewhat more flexible in terms of cluster shapes and more robust to outliers and noise than K-Means. In what concerns time-series clustering, the fact that a medoid (a member of the data set) is considered, overcomes the need to determine a centroid (based on an averaging of different series) which can be a problematic issue [8].

### 3.3 Number of clusters

To determine the number of clusters ( $K$ ) we resort to several cohesion-separation measures - namely Average Silhouette (Silh) [8], Calinski and Harabasz (CH) [11] and Dunn modified index (Dunn2) [12] (implemented in the "fpc" R package [13]). We also consider the relative improvement or rate of change in within clusters' variation (Winprov), i.e., the total distances between each observation and the corresponding medoid, between two successive solutions (with  $k - 1$  and  $k$  clusters). The first three indices present a variant of a between-within clusters distance and the fourth considers within clusters' distances only.

A summated indicator of all indices is considered. First, each index,  $ind_k$ , is transformed by a max-min function, i.e. we use  $1 - norm(ind_k)$ , with  $norm(ind_k)$  defined as in (5). Note that, after transformation, all indices can be viewed as preference values and the lower their values, the better the clustering solution they correspond to. Then, the sum of all the (transformed) indices values referring to the candidates numbers of clusters is considered for selecting the number of clusters. The results obtained are finally evaluated from a substantive point of view.

### 3.4 Experiments

We consider a convex combination of Euclidean distance, Pearson correlation based distance, Periodogram based distance and Auto-correlation based distance using corresponding weights  $\underline{w} = (w_1, w_2, w_3, w_4)$ . Several experiments are considered allocating different weights to the alternative distance measures used in the clustering algorithm. The experiments can be described as follows:

1. Calculate and normalize the distances between the time series and define a convex combination of the same distances, using  $\underline{w}$ ;
2. Run K-Medoids for  $k = 2, \dots, 10$ , using the combined distance;
3. Calculate clustering evaluation indices and obtain the summated indicator of clustering quality, based on the rescaled clustering evaluation indices (for  $k = 2, \dots, 10$ );
4. Decide on K based on 3.;
5. Graphically represent the obtained solution, interpret it, compare it to other solutions and resort to substantive insights to decide on the "best" solution.

In order to obtain a graphic representation of each clustering solution we use classical Mutidimensional Scaling. A goodness of fit measure (GOF) enables to evaluate the quality of the MDS maps

$$GOF = \frac{\sum_{i=1}^p \lambda_i}{\sum_{i=1}^{n-1} |\lambda_i|}, \quad (6)$$

where  $\lambda_i$  are the eigenvalues of  $B = X^T X$  and  $X_{n \times p}$  represents the  $p$  coordinates of the  $n$  points to be represented. As in this case we use two dimensions,  $p = 2$ , in the numerator we have the two largest eigenvalues. The GOF varies between 0 and 1 and the higher the GOF the better the MDS map ([14]).

## 4 Results obtained

We consider the hourly day-ahead market prices (in €/MWh) observed in 26 european electricity markets zones in 2018. Data were obtained through the respective market operators' website. Due to different winter and summer times in some countries, the raw data have one missing hour, that was fulfilled with the average price of the two nearest hour prices, and a redundant hour data, that was removed.

Several experiments allocating different weights/relevance to the alternative distance measures in the clustering algorithm are reported in Table 1. For each solution some insights are provided.

Table 1: Some results of experiments conducted where  $\underline{w} = (w_1, w_2, w_3, w_4)$  stands for weights that correspond to Euclidean distance (1), Pearson correlation based distance (2), Periodograms based distance (3) and Autocorrelation based distance (4) in a convex combination of distances.

$\underline{w}$	K	Comments
(1,0,0,0)	2	Italy and MIBEL markets are gathered into one cluster; the remaining regions are clustered together.
(0,1,0,0)	2	Nord Pool is separated from other regions.
(0,0,1,0)	4	IT_SICI constitutes a single cluster; NP_LV and NP_LT constitute a clearly separated cluster.
(0,0,0,1)	3	IT_SICI is included in a six regions cluster.
(0,1/3, 1/3, 1/3)	6	See "The selected clustering solution".
(1/3,0, 1/3, 1/3)	9	The exclusion of Pearson based distance brings a relevant increase to the solutions' entropy.
(1/3, 1/3, 0, 1/3)	6	See "The selected clustering solution".
(1/3, 1/3, 1/3, 0)	6	The exclusion of Autocorrelation based distance increases the isolation of the single cluster IT_SICI.
(1/4, 1/4, 1/4, 1/4)	6	See "The selected clustering solution".



4.1 The selected clustering solution - The experiment with all distances equally weighted

After conducting the proposed experiments, we arrived at a solution that considers all distances equally weighted, in the convex combination distance used in K-Medoids, and yields 6 clusters - see the indicator based on the sum of the normalized validation indices illustrated in Table 2. To adopt this solution we firstly take into account a consistency criterion: this solution exhibits perfect consistency with solutions (0,1/3,1/3,1/3) - exclusion of Euclidean distance only - and (1/3,1/3,0,1/3) - exclusion of Peridogram based distance only (see index of agreement values in Table 3 and Table 4). In addition to exhibiting consistency, this solution also proves to be a good solution from the point of view of the intra-clusters and inter-clusters variation relationship: the results referring to each clustering validation index are presented in Figure 1. In particular, the Silhouette index exhibits a value over 0.5 which indicates a reasonable partitioning of data (values less than 0.2 means that the data do not exhibit cluster structure) [8]. Finally, this partition of European regions is coherent with their geography - Figure 2 and Figure 3 - and clusters are compatible with domain knowledge. The representants of clusters - the medoids - are illustrated in Figure 4, using the corresponding cronograms.

Table 2: Summated indicator for clustering evaluation for alternative numbers of clusters.

K - number of clusters	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Summated indicator	2.26	2.04	2.89	1.76	0.87	2.03	1.85	1.39	1.85

4.2 The clusters

The solution obtained, besides capturing the natural geographic relationship which is intrinsically related with the price regions, also

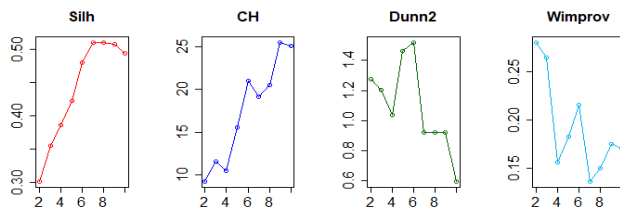


Figure 1: Clustering validation indices for K-Medoids solutions ( $K = 2, \dots, 10$ ) derived from the convex combination of all distances uniformly weighted.

Table 3: Adjusted Rand between clustering solutions (I).

	(0,1,0,0)	(0,0,1,0)	(0,0,0,1)	(0,1/3,1/3,1/3)
(1,0,0,0)	0.704	0.049	0.047	0.269
(0,1,0,0)	1	0.148	0.186	0.348
(0,0,1,0)		1	0.636	0.478
(0,0,0,1)			1	0.626

provides substantive coherent interpretation - see map in Figure 3 and clusters' medoids in Figure 4.

**Cluster C1:** The cluster that joins mainland Italy and France (with medoid IT\_CSUD) was somewhat unexpected. If, on the one hand, France has its electricity grid interconnected with Italy, on the other hand, it is also interconnected with Spain. In fact, after checking all inter-medoids distances between C1 and C6 (including Spain), we concluded their separation is weak and mainly due to Pearson and Autocorrelation based distances.

**Cluster C2:** A Danish region Np\_DK1, is the cluster medoid. Although Denmark is known to have a lot of wind (renewable) energy, it also uses coal and natural gas to produce electricity, which also occurs in Germany. Sweden's NP\_SE4 is very close to Denmark.

Table 4: Adjusted Rand between clustering solutions (II).

	(1/3,0,1/3,1/3)	(1/3,1/3,0,1/3)	(1/3,1/3,1/3,0)	(1/4,1/4,1/4,1/4)
(1,0,0,0)	0.206	0.269	0.301	0.269
(0,1,0,0)	0.209	0.348	0.396	0.348
(0,0,1,0)	0.342	0.478	0.570	0.478
(0,0,0,1)	0.410	0.626	0.555	0.626
(0,1/3,1/3,1/3)	0.741	1.000	0.887	1.000
(1/3,0,1/3,1/3)	1	0.741	0.625	0.741
(1/3,1/3,0,1/3)		1	0.887	1.000
(1/3,1/3,1/3,0)			1	0.887

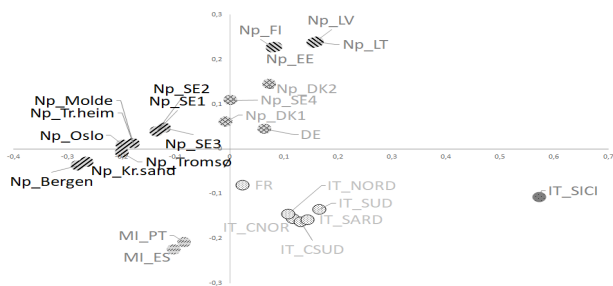


Figure 2: MDS map of equally weighted combination of distances (between price regions) with clusters.

Therefore, to meet all demand of NP\_SE4 area, it is necessary to use Danish production which makes prices in NP\_SE4 area similar to prices in Denmark and Germany. Interestingly, all distance measures tend to put together the NP\_SE4 area and Denmark. The small inter-medoids differences between this cluster and C3 (including other Swedish regions) are due to the autocorrelation based distance.

**Cluster C3:** This cluster includes Sweden (with the exception of NP\_SE4) and Norway geographically close countries using low cost production technologies (renewable and nuclear). Its medoid

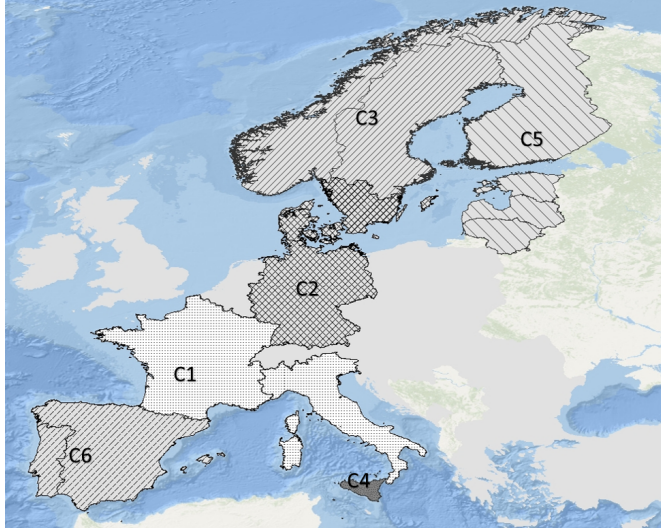


Figure 3: Map of final clusters with medoids.

(Np\_Tr.heim ) clearly distinguishes itself from C5 medoid (referring to a geographically adjacent cluster) due to large autocorrelation based distance.

**Cluster C4:** Sicily appears isolated since its interconnection to continental Italy is often limited by the capacity of power lines (an issue already referred). In fact, according to the distances computed it exhibits a large Periodogram based distance to the medoid of C1 cluster (including Italy). It also exhibits maximum Pearson based distances to C5 (emphasizing differences in tendency) and generally differs from all remaining clusters considering all distances.

**Cluster C5:** Finland and the Baltic countries are geographically close and use fossil technologies (coal and natural gas), although Finland has a lot of nuclear. This clusters' medoid is Np\_LV. Besides differences to C3 medoid already mentioned, it shows moderate

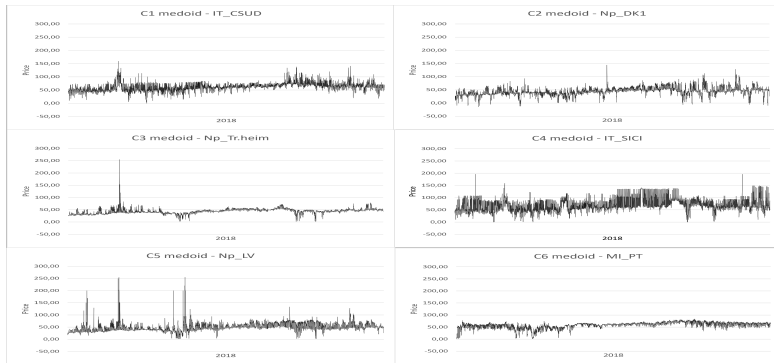


Figure 4: Cronograms of final clusters' medoids.

autocorrelation and Pearson based distances to C1 medoid.

**Cluster C6:** The grouping of Portugal (the medoid) and Spain is quite natural: geography, interconnection capacity that accommodates flows for most hours and electricity production from the similar technologies - major renewable production (hydro, wind and solar in the case of Spain) and fossils (coal and natural gas). In 2018, in almost 95% of the hours, the prices were the same in Portugal and Spain. The Portuguese time series clearly differs from C3 medoid (due to large Pearson based distance) and from C5 medoid (due to large autocorrelations based distance).

## 5 Conclusions

The use of K-Medoids algorithm for clustering allowed to overcome the limitations of K-Means that resorts to averages of time series to build centroids and uses squared Euclidean distances. In K-Medoids the representatives of clusters are members of the same clusters and

it enabled exploring the contributions of alternative and combined distance measures. We found that the alternative distance measures played complementary roles by emphasizing differences in trends (Pearson), differences in prices' values (Euclidean), differences in cyclical behaviours (Periodogram) and differences in autocorrelation patterns (Autocorrelation). The combination of all these aspects, ultimately, allowed us to obtain some insights on the sensitivity of the clustering procedure to the role of the distance measures considered and to obtain a good clustering solution. Interestingly, using all distances combined, the clusters obtained reflect not only different prices patterns, but also geographic proximity, which may underline these same patterns. Future work intend to further explore on the tuning of the weights for combining distances, on the decision process concerning the selection of the number of clusters resorting to multiple criteria and on the profiling of clusters obtained using external variables.

## Acknowledgements

This work was supported by Fundação para a Ciência e a Tecnologia, grants UIDB /00315/2020 and UIDB/50021/2020.

## References

- [1] Aghabozorgi, S., Shirkhorshidi, A. S., Wah, T. Y. (2015). Time-series clustering—a decade review. *Information Systems*, vol. 53, pp. 16–38.
- [2] Maharaj, E. A., D’Urso, P., Caiado, J. (2019), *Time series clustering and classification*, CRC Press.
- [3] Montero, P., Vilar, J. (2014). TSclust: An R package for time series clustering. *Journal of Statistical Software*, 62(1), pp. 1–43.

- [4] Miguel, P., Gonçalves, P., Neves, L. , Martins, A. G. (2016). Using clustering techniques to provide simulation scenarios for the smart grid. *Sustainable Cities and Society* 26, pp. 447–455.
- [5] Martínez-Álvarez, F., Troncoso, A., Asencio-Cortés, G., Riquelme, J. (2015). A survey on data mining techniques applied to electricity-related time series forecasting. *Energies*, vol.8, 11, 13162–13193.
- [6] Jin, C. H., Pok, G., Lee, Y., Park, H. W., Kim, K. D., Yun, U., Ryu, K. H., (2015). A SOM clustering pattern sequence-based next symbol prediction method for day-ahead direct electricity load and price forecasting. *Energy Convers. Manag.*, vol. 90, pp. 84–92.
- [7] Panapakidis, I. P., Dagoumas, A. S. (2016). Day-ahead electricity price forecasting via the application of artificial neural network based models, *Applied Energy*, 172, pp. 132–151.
- [8] Kaufman, L., Rousseeuw, P. J. (2009). *Finding groups in data: an introduction to cluster analysis*. John Wiley & Sons.
- [9] Rodrigues, P. (2008). Hierarchical clustering of time-series data streams. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineer*, vol. 20, 5, pp. 1–13.
- [10] Caiado, J., Crato, N., Peña, D. (2006). A periodogram-based metric for time series classification. *Computational Statistics & Data Analysis*, vol. 50, 10, pp. 2668–2684.
- [11] Caliński, T., Harabasz, J. (1974). A dendrite method for cluster analysis. *Communications in Statistics-theory and Methods*, vol.3, 1, pp. 1–27.
- [12] Bezdek, J. C., Pal, N. R. (1998). Some new indexes of cluster validity. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics*, vol. 28, 3, pp. 301–315.

- [13] Hennig, C. (2015). Package fpc. URL: <http://cran.r-project.org/web/packages/fpc/fpc.pdf> (available 08.07. 2017).
- [14] Cox, T., Cox, M. (2001). *Multidimensional Scaling*, 2nd Ed., Chapman & Hall/CRC.
- [15] *GME, Annual Report 2018*. Available Italian Electricity Market Operator web site: [http://www.mercatoelettrico.org/En/MenuBiblioteca/documenti/20190731\\_GME\\_RELAZIONE\\_ANNUALE\\_EN.pdf](http://www.mercatoelettrico.org/En/MenuBiblioteca/documenti/20190731_GME_RELAZIONE_ANNUALE_EN.pdf).



# Estimação de um índice de valores extremos positivo através de médias generalizadas e em ambiente de não-regularidade

M. Ivette Gomes

Centro de Estatística e Aplicações (CEAUL), Faculdade de Ciências,  
Universidade de Lisboa, Portugal, *ivette.gomes@fc.ul.pt*

Lígia Henriques-Rodrigues

Centro de Investigação em Matemática e Aplicações (CIMA), Universidade de Évora, Portugal, *ligiahr@uevora.pt*

Dinis Pestana

CEAUL, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Portugal,  
*dinis.pestana@fc.ul.pt*

**Palavras-chave:** Caudas pesadas; Estimação semi-paramétrica; Leis estáveis para extremos e somas; Soma de Paretos

**Resumo:** O estimador de Hill é o estimador mais popular de um *índice de valores extremos* (EVI, do inglês ‘*extreme value index*’) positivo, denotado por  $\xi$ . Trata-se de uma média aritmética, sendo consequentemente o logaritmo da média geométrica, i.e. da média-de-ordem-0, de estatísticas adequadas, função das estatísticas ordinais de topo associadas a uma amostra aleatória. Podemos mais geralmente considerar a *média-de-ordem-p* ( $MO_p$ ) dessas estatísticas para  $p \in \mathbb{R}$ , e construir uma classe de estimadores- $MO_p$  do EVI. Sob condições de regularidade adequadas, o comportamento assintoticamente normal dos estimadores  $MO_p$  foi obtido para  $p < 1/(2\xi)$ , tendo-se consistência para  $p < 1/\xi$ . Discutiremos aqui o comportamento teórico degenerado destes estimadores na região  $p \geq 1/\xi$ , sugerido por estudos de simulação, parcialmente apresentados.

# 1 Introdução e preliminares

O *índice de valores extremos* (EVI, do inglês ‘*extreme value index*’), denotado por  $\xi$ , é um dos parâmetros fundamentais em *teoria de valores extremos* (EVT, do inglês ‘*extreme value theory*’), e mede o peso da cauda-direita de  $F$ ,  $\bar{F}(x) := 1 - F(x)$ , quando  $x \rightarrow +\infty$ , peso esse que aumenta com o crescimento de  $\xi$ .

Face a uma amostra aleatória,  $(X_1, \dots, X_n)$ , proveniente de uma *função de distribuição* (f.d.)  $F$ , designemos por  $(X_{1:n}, \dots, X_{n:n})$  a amostra de estatísticas ordinais ascendentes associada. Estamos interessados em valores elevados, ou mais especificamente, no comportamento da sucessão de máximos,  $\{X_{n:n}\}_{n \geq 1}$ . A f.d. de  $X_{n:n}$  é  $\mathbb{P}(X_{n:n} \leq x) = F^n(x)$ , expressão esta de pouca utilidade caso  $F$  seja desconhecida, e com um comportamento degenerado quando  $n \rightarrow \infty$ . Como estamos frequentemente interessados no máximo de um grande número de variáveis aleatórias (v.a.’s), modelamos esse máximo usando um argumento assintótico, que recorre a uma normalização linear desse máximo, de forma semelhante ao que se passa no caso da teoria assintótica para somas e no *teorema limite central* (TLC). É pois sensato colocar a pergunta: será possível encontrar constantes reais  $\{a_n\}_{n \geq 1}$  ( $a_n > 0$ ) e  $\{b_n\}_{n \geq 1}$  tais que

$$\frac{X_{n:n} - b_n}{a_n} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{d} Y \iff F^n(a_n x + b_n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} G(x),$$

com  $G(x)$  f.d. não degenerada? Se existirem tais sucessões de constantes, elas são designadas por coeficientes de atracção de  $F$  para  $G$ , e dizemos que  $F$  pertence ao max-domínio de atracção da lei  $G$ . O *teorema dos tipos extremais* (Gnedenko, [4]) permite-nos garantir que  $G$  é do tipo da distribuição geral de valores extremos

$$G(x) \equiv G_\xi(x) \equiv \text{EV}_\xi(x) = \exp \left\{ -[1 + \xi x]_+^{-1/\xi} \right\}, \quad (1)$$

com  $x_+ := \max(0, x)$ , sendo  $\xi \in \mathbb{R}$  o EVI.

Para modelos de tipo-Pareto, i.e. modelos com uma cauda-direita de tipo polinomial negativo, e consequentemente, com um EVI positivo,

os estimadores clássicos do EVI são os estimadores de Hill (Hill, [9]). O estimador de Hill (H) é a média dos excessos das log-observações, i.e. de

$$V_{ik} := \ln X_{n-i+1:n} - \ln X_{n-k:n}, \quad 1 \leq i \leq k < n.$$

O viés do estimador de Hill pode ser muito pequeno, moderado ou grande, e aumenta quando  $k$  aumenta. O problema de *trade-off* viés-variância existente na escolha do nível  $k$  motivou a necessidade de procurar estimadores alternativos para o índice de valores extremos. Note-se que podemos escrever

$$H(k) := \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k V_{ik} =: \sum_{i=1}^k \ln U_{ik}^{1/k} = \ln \left( \prod_{i=1}^k U_{ik} \right)^{1/k},$$

$$U_{ik} = \frac{X_{n-i+1:n}}{X_{n-k:n}}, \quad 1 \leq i \leq k < n. \quad (2)$$

Este estimador  $H(k)$  pode pois ser encarado como o logaritmo da média geométrica, i.e. da média-de-ordem-0, das estatísticas  $U_{ik}$ ,  $1 \leq i \leq k < n$ , em (2). Podemos pois mais geralmente considerar a *média-de-ordem- $p$*  ( $MO_p$ ) dessas estatísticas para  $p \in \mathbb{R}$ , e construir uma classe de estimadores- $MO_p$  do EVI. A classe de funcionais em jogo é então

$$H_p(k) \equiv MO_p(k)$$

$$:= \begin{cases} \left( 1 - \left( \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k U_{ik}^p \right)^{-1} \right) / p, & \text{se } p \neq 0 \\ H(k), & \text{se } p = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Esta classe de funcionais  $MO_p$ , em (3), depende deste *parâmetro de controlo*  $p$ . A escolha adequada de  $p$  permite obter uma nova classe de estimadores do EVI com viés e erro quadrático médio (MSE, do inglês ‘*mean square error*’) inferiores aos do estimador de Hill, tornando esta classe extraordinariamente flexível, tal como se pode ver

em Brilhante, Gomes e Pestana [2], Paulauskas e Vaičiulis [10, 11], Beran, Schell e Stehlik [1], Gomes e Caeiro [6], Caeiro, Gomes, Beirlant e de Wet [3], entre outros. Sob condições de regularidade adequadas, o comportamento assintoticamente normal de  $MO_p(k)$  foi demonstrado para  $p < 1/(2\xi)$ , tendo-se obtido consistência para  $p < 1/\xi$ . O comportamento simulado destes estimadores na região  $1/(2\xi) \leq p \leq 1/\xi$ , parcialmente considerado em [2], leva-nos à consideração, na **Secção 2**, de um estudo simulação dos estimadores  $MO_p$  na região  $p \geq 1/(2\xi)$ , incluindo também a região  $0 \leq p < 1/(2\xi)$ . Na **Secção 3** demonstramos a consistência do estimador  $MO_p(k)$  para  $p = 1/\xi$ , e finalizamos o artigo com alguns comentários, na **Secção 4**.

## 2 O método de Monte-Carlo como laboratório em Estatística

### 2.1 Simulação do estimador em situações de regularidade e de não regularidade

Foram implementadas simulações de Monte-Carlo multi-amostra, com dimensões  $5000 \times 20$ , para amostras de dimensão  $n$ , com  $n$  a variar desde 100 até 5000, provenientes de diversos modelos de cauda-direita pesada, com  $\xi > 0$ , de entre os quais destacamos o modelo de valores extremos, com f.d.  $F(x) = G_\xi(x) \equiv EV_\xi(x)$ , definida em (1), o modelo generalizado de Pareto, com f.d.  $F(x) \equiv GP_\xi(x) = 1 + \ln EV_\xi(x) = 1 - (1 + \xi x)^{-1/\xi}$  e o modelo  $t$ -de-Student com  $\nu$  graus de liberdade ( $\xi = 1/\nu$ ). Para detalhes sobre simulação multi-amostra, veja-se Gomes e Oliveira [7], entre outros.

#### 2.1.1 Valores médios e MSE simulados, em função de $k$

Com base na primeira réplica de 5000 amostras de um modelo  $EV_{0.25}$ , começamos por ilustrar, na Figura 1, o comportamento do valor

médio ( $E$ ) e do *root* MSE (RMSE) de  $H(k) \equiv H_0(k)$  e de  $H_p(k)$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 9, 10$ .

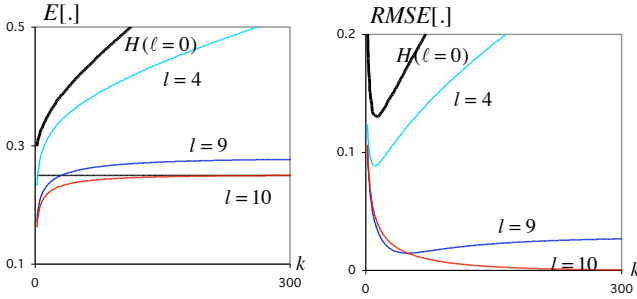


Figura 1: Valores médios (*esquerda*) e RMSEs simulados (*direita*), como função de  $k$  para modelos  $EV_{0.25}$ ,  $n = 1000$  e de  $H_p(k)$  para  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 0, 4, 9, 10$  ( $p = 0, 1.6, 3.6, 4$ ).

Para todos os outros modelos simulados, obtiveram-se figuras semelhantes à Figura 1.

### 2.1.2 Valores médios simulados em níveis ótimos

Apresentamos em seguida os valores médios simulados em níveis ótimos, no sentido de MSE mínimo, dos estimadores  $H(k) \equiv H_0(k)$  e  $H_p(k)$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$ , bem como indicação sobre esses níveis ótimos. Não foram aqui incluídos valores negativos de  $p$ , que, em níveis ótimos, conduzem a MSE's mais elevados do que o MSE do estimador de Hill, mas que podem levar a estimadores mais robustos, como se pode ver em [1]. Esta questão levanta a necessidade de encontrar um indicador, que permita abordar de forma adequada o dilema eficiência versus robustez, tópico ainda em aberto. Fornecemos, nas tabelas 1, 2 e 3 esses valores médios simulados, respectivamente para modelo subjacente  $EV_\xi$ ,  $\xi = 0.1, 0.25, 0.5$ ,  $GP_\xi$ ,  $\xi = 0.1, 0.25, 0.5$  e  $Student-t_\nu$ ,  $\nu = 4, 2$  ( $\xi = 1/\nu = 0.25, 0.5$ ).

Assinalamos a **cheio** os valores médios simulados que conduzem a um viés mínimo, em valor absoluto.

De forma algo surpreendente,  $p = 1/\xi$  ( $\ell = 10$ ) conduz-nos a resultados muito interessantes. Mas se escolhermos  $p > 1/\xi$ , somos levados a valores médios perto de  $1/p < \xi$ , resultados que carecem de explicação, parcialmente fornecida na **Secção 3**. Previamente, apresentamos na Figura 2, uma ilustração gráfica dos valores simulados associados à Tabela 2,  $\xi = 0.5$ .

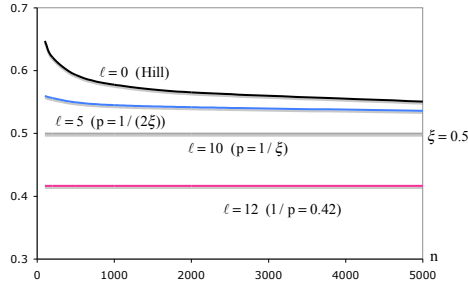


Figura 2: Valores médios simulados em níveis ótimos de  $H_p(k)$  para  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 0, 5, 10, 12$  ( $p = 0, 1, 2, 2.4$ ), em modelos  $GP_{0.5}$ .

### 2.1.3 Eficiência relativa simulada

Apresentamos ainda, nas tabelas 3–4–5, e de forma equivalente ao que fizemos nas tabelas 1–2–3 para valores médios simulados, um indicador de eficiência relativa: Face ao cálculo de  $H_{p0}$ , o estimador  $H_p(k)$  calculado no valor estimado de  $k_{0|p} := \arg \min_k \text{MSE}(H_p(k))$ , o indicador em jogo é definido por

$$\text{REFE}_{p|0} = \frac{\text{RMSE}(H_{00})}{\text{RMSE}(H_{p0})} := \sqrt{\frac{\text{MSE}(H_{00})}{\text{MSE}(H_{p0})}} =: \frac{\text{RMSE}_{00}}{\text{RMSE}_{p0}}.$$

Sempre que este indicador for superior a 100, usamos a notação  $\infty$ .

Tabela 1: Valores médios simulados em níveis ótimos (com intervalos de confiança a 95% associados), e parte inteira dos valores médios simulados desses níveis ótimos, colocados entre parêntesis na segunda linha, dos estimadores  $H(k) \equiv H_0(k)$  e  $H_p(k)$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$ , para modelos  $EV_\xi$ ,  $\xi = 0.1, 0.25, 0.5$ .

$n$	100	1000	5000
Modelo $EV_\xi$ , $\xi = 0.1$			
$H (\ell = p = 0)$	$0.334 \pm 0.0009$ (5)	$0.223 \pm 0.0016$ (5)	$0.195 \pm 0.0011$ (9)
$\ell = 4$	$0.197 \pm 0.0002$ (5)	$0.160 \pm 0.0003$ (5)	$0.144 \pm 0.0003$ (5)
$\ell = 5 (p = 1/(2\xi))$	$0.171 \pm 0.0002$ (5)	$0.145 \pm 0.0002$ (5)	$0.132 \pm 0.0002$ (5)
$\ell = 9$	$0.108 \pm 0.0001$ (6)	$0.107 \pm 0.0001$ (11)	$0.106 \pm 0.0001$ (17)
$\ell = 10 (p = 1/\xi)$	<b>0.100</b> $\pm 0.0001$ (44)	<b>0.100</b> $\pm 0.0001$ (420)	<b>0.100</b> $\pm 0.0001$ (1756)
$\ell = 12$	$0.083 \pm 0.0000$ (42)	$0.083 \pm 0.0000$ (240)	$0.083 \pm 0.0000$ (890)
Modelo $EV_\xi$ , $\xi = 0.25$			
$H (\ell = p = 0)$	$0.427 \pm 0.0012$ (5)	$0.348 \pm 0.0012$ (13)	$0.321 \pm 0.0010$ (27)
$\ell = 4$	$0.336 \pm 0.0007$ (5)	$0.301 \pm 0.0013$ (11)	$0.294 \pm 0.0008$ (22)
$\ell = 5 (p = 1/(2\xi))$	$0.312 \pm 0.0006$ (5)	$0.289 \pm 0.0011$ (11)	$0.285 \pm 0.0007$ (23)
$\ell = 9$	$0.263 \pm 0.0001$ (14)	$0.258 \pm 0.0002$ (48)	$0.256 \pm 0.0001$ (115)
$\ell = 10 (p = 1/\xi)$	<b>0.250</b> $\pm 0.0001$ (44)	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (574)	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (3035)
$\ell = 12$	$0.208 \pm 0.0000$ (44)	$0.208 \pm 0.0000$ (561)	$0.208 \pm 0.0000$ (2827)
Modelo $EV_\xi$ , $\xi = 0.5$			
$H (\ell = p = 0)$	$0.654 \pm 0.0032$ (9)	$0.579 \pm 0.0016$ (35)	$0.551 \pm 0.0010$ (86)
$\ell = 4$	$0.578 \pm 0.0022$ (9)	$0.556 \pm 0.0014$ (41)	$0.541 \pm 0.0005$ (108)
$\ell = 5 (p = 1/(2\xi))$	$0.559 \pm 0.0017$ (10)	$0.546 \pm 0.0011$ (44)	$0.536 \pm 0.0008$ (118)
$\ell = 9$	$0.515 \pm 0.0004$ (29)	$0.509 \pm 0.0001$ (172)	$0.506 \pm 0.0001$ (601)
$\ell = 10 (p = 1/\xi)$	<b>0.492</b> $\pm 0.0008$ (44)	<b>0.500</b> $\pm 0.0000$ (574)	<b>0.500</b> $\pm 0.0000$ (3035)
$\ell = 12$	$0.414 \pm 0.0003$ (44)	$0.417 \pm 0.0001$ (574)	$0.417 \pm 0.0000$ (3035)

Tabela 2: Valores médios simulados em níveis ótimos (com intervalos de confiança a 95% associados), e parte inteira dos valores médios simulados desses níveis ótimos, colocados entre parêntesis na segunda linha, dos estimadores  $H(k) \equiv H_0(k)$  e  $H_p(k)$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$ , para modelos  $GP_\xi$ ,  $\xi = 0.1, 0.25, 0.5$ .

$n$	100	1000	5000
Modelo $GP_\xi$ , $\xi = 0.1$			
$H (\ell = p = 0)$	$0.326 \pm 0.0009$ (5)	$0.224 \pm 0.0015$ (5)	$0.195 \pm 0.0010$ (9)
$\ell = 4$	$0.195 \pm 0.0003$ (5)	$0.160 \pm 0.0004$ (5)	$0.144 \pm 0.0003$ (5)
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$0.170 \pm 0.0002$ (5)	$0.145 \pm 0.0003$ (5)	$0.132 \pm 0.0002$ (5)
$\ell = 9$	$0.108 \pm 0.0002$ (7)	$0.107 \pm 0.0001$ (11)	$0.106 \pm 0.0001$ (17)
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	<b>0.100</b> $\pm 0.0000$ (75)	<b>0.100</b> $\pm 0.0000$ (534)	<b>0.100</b> $\pm 0.0000$ (2179)
$\ell = 12$	$0.083 \pm 0.0000$ (51)	$0.083 \pm 0.0000$ (277)	$0.083 \pm 0.0000$ (978)
Modelo $GP_\xi$ , $\xi = 0.25$			
$H (\ell = p = 0)$	$0.419 \pm 0.0024$ (5)	$0.347 \pm 0.0016$ (14)	$0.320 \pm 0.0011$ (27)
$\ell = 4$	$0.331 \pm 0.0007$ (5)	$0.302 \pm 0.0012$ (11)	$0.295 \pm 0.0010$ (23)
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$0.308 \pm 0.0006$ (5)	$0.290 \pm 0.0012$ (11)	$0.285 \pm 0.0007$ (23)
$\ell = 9$	$0.262 \pm 0.0003$ (16)	$0.258 \pm 0.0002$ (50)	$0.256 \pm 0.0001$ (119)
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (99)	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (974)	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (4781)
$\ell = 12$	$0.208 \pm 0.0000$ (93)	$0.208 \pm 0.0000$ (868)	$0.208 \pm 0.0000$ (4223)
Modelo $GP_\xi$ , $\xi = 0.5$			
$H (\ell = p = 0)$	$0.647 \pm 0.0043$ (10)	$0.578 \pm 0.0012$ (39)	$0.551 \pm 0.0011$ (93)
$\ell = 4$	$0.578 \pm 0.0023$ (11)	$0.556 \pm 0.0010$ (45)	$0.542 \pm 0.0009$ (118)
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$0.560 \pm 0.0020$ (12)	$0.545 \pm 0.0009$ (48)	$0.536 \pm 0.0005$ (130)
$\ell = 9$	$0.514 \pm 0.0004$ (37)	$0.508 \pm 0.0002$ (205)	$0.506 \pm 0.0001$ (702)
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	<b>0.500</b> $\pm 0.0000$ (99)	<b>0.500</b> $\pm 0.0000$ (999)	<b>0.500</b> $\pm 0.0000$ (4998)
$\ell = 12$	$0.417 \pm 0.0001$ (99)	$0.417 \pm 0.0000$ (996)	$0.417 \pm 0.0000$ (4975)



Tabela 3: Valores médios simulados em níveis ótimos (com intervalos de confiança a 95% associados), e parte inteira dos valores médios simulados desses níveis ótimos, colocados entre parêntesis na segunda linha, dos estimadores  $H(k) \equiv H_0(k)$  e  $H_p(k)$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$ , para modelos Student- $t_\nu$ ,  $\nu = 4, 2$ .

$n$	100	1000	5000
Modelo Student- $t_4$ , $\xi = 1/4 = 0.25$			
H ( $\ell = p = 0$ )	$0.361 \pm 0.0009$ (5)	$0.306 \pm 0.0013$ (20)	$0.286 \pm 0.0007$ (48)
$\ell = 4$	$0.296 \pm 0.0005$ (5)	$0.284 \pm 0.0007$ (21)	$0.277 \pm 0.0004$ (56)
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$0.285 \pm 0.0026$ (6)	$0.277 \pm 0.0006$ (23)	$0.272 \pm 0.0005$ (59)
$\ell = 9$	$0.260 \pm 0.0004$ (16)	$0.255 \pm 0.0001$ (85)	$0.254 \pm 0.0000$ (279)
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	<b>0.249</b> $\pm 0.0002$ (31)	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (442)	<b>0.250</b> $\pm 0.0000$ (2366)
$\ell = 12$	$0.208 \pm 0.0001$ (31)	$0.208 \pm 0.0000$ (442)	$0.208 \pm 0.0000$ (2344)
Modelo Student- $t_2$ , $\xi = 1/2 = 0.5$			
H ( $\ell = p = 0$ )	$0.602 \pm 0.0039$ (10)	$0.544 \pm 0.0008$ (54)	$0.526 \pm 0.0005$ (166)
$\ell = 4$	$0.555 \pm 0.0014$ (12)	$0.533 \pm 0.0005$ (67)	$0.518 \pm 0.0004$ (206)
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$0.543 \pm 0.0008$ (13)	$0.528 \pm 0.0007$ (75)	$0.515 \pm 0.0004$ (234)
$\ell = 9$	<b>0.511</b> $\pm 0.0013$ (30)	$0.506 \pm 0.0001$ (229)	$0.503 \pm 0.0001$ (954)
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$0.474 \pm 0.0018$ (31)	<b>0.498</b> $\pm 0.0002$ (440)	<b>0.500</b> $\pm 0.0001$ (2367)
$\ell = 12$	$0.406 \pm 0.0009$ (31)	$0.416 \pm 0.0001$ (440)	$0.417 \pm 0.0000$ (2367)

### 3 Uma breve justificação teórica

O modelo Pareto com parâmetro de forma unitário, ou seja, uma v.a.  $Y$  com f.d. dada por  $F_Y(y) = 1 - y^{-1}$ ,  $y \geq 1$ , goza de papel fundamental em *estatística de extremos*, em situações muito variadas, mas também aquando da obtenção das propriedades de estimadores de parâmetros de acontecimentos raros, em contexto semi-paramétrico. Pensemos no funcional  $MO_p(k)$ , definido em (2).

Com a notação  $F^{\leftarrow}(t) := \inf\{x : F(x) \geq t\}$  para a inversa generali-

Tabela 4: RMSEs simulados de  $H_{00}/\xi$  (primeira linha) e indicadores REFF de  $H_p$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$  (com intervalos de confiança a 95%), para modelos  $EV_\xi$ ,  $\xi = 0.1, 0.25, 0.5$

$n$	100	1000	5000
Modelo $EV_\xi$ , $\xi = 0.1$			
RMSE <sub>00</sub>	$0.268 \pm 0.1738$	$0.151 \pm 0.1581$	$0.114 \pm 0.1465$
$\ell = 4$	$2.581 \pm 0.0062$	$2.052 \pm 0.0045$	$1.856 \pm 0.0062$
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$3.536 \pm 0.0093$	$2.700 \pm 0.0064$	$2.390 \pm 0.0079$
$\ell = 9$	$26.790 \pm 0.1198$	$17.123 \pm 0.0798$	$14.030 \pm 0.0641$
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	$16.054 \pm 0.0586$	$9.065 \pm 0.0367$	$6.816 \pm 0.0306$
Modelo $EV_\xi$ , $\xi = 0.25$			
RMSE <sub>00</sub>	$0.246 \pm 0.1698$	$0.133 \pm 0.1527$	$0.092 \pm 0.1379$
$\ell = 4$	$1.879 \pm 0.0048$	$1.463 \pm 0.0066$	$1.300 \pm 0.0040$
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$2.381 \pm 0.0071$	$1.757 \pm 0.0077$	$1.509 \pm 0.0052$
$\ell = 9$	$12.793 \pm 0.0681$	$8.989 \pm 0.0493$	$7.331 \pm 0.0242$
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	$5.906 \pm 0.0313$	$3.183 \pm 0.0157$	$2.213 \pm 0.0086$
Modelo $EV_\xi$ , $\xi = 0.5$			
RMSE <sub>00</sub>	$0.256 \pm 0.1622$	$0.122 \pm 0.1481$	$0.077 \pm 0.1301$
$\ell = 4$	$1.530 \pm 0.0044$	$1.221 \pm 0.0054$	$1.123 \pm 0.0048$
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$1.825 \pm 0.0057$	$1.362 \pm 0.0071$	$1.189 \pm 0.0062$
$\ell = 9$	$8.554 \pm 0.037$	$5.732 \pm 0.0267$	$4.330 \pm 0.0278$
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$25.403 \pm 2.2199$	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	$2.991 \pm 0.0202$	$1.463 \pm 0.0059$	$0.923 \pm 0.0036$

zada de  $F$  e  $U(t) := F^{\leftarrow}(1 - 1/t)$ , podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \left( \frac{X_{n-i+1:n}}{X_{n-k:n}} \right)^p &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \left( \frac{U(Y_{n-i+1:n})}{U(Y_{n-k:n})} \right)^p \\
 &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_{k-i+1:k}^{\xi p} (1 + o_{\mathbb{P}}(1)),
 \end{aligned}$$

com o termo  $o_{\mathbb{P}}(1)$  uniforme em  $i$ ,  $1 \leq i \leq k$  (veja-se [3]).

Tabela 5: RMSEs simulados de  $H_{00}/\xi$  (primeira linha) e indicadores REFF de  $H_p$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$  (com intervalos de confiança a 95%), para modelos  $GP_\xi$ ,  $\xi = 0.1, 0.25, 0.5$

$n$	100	1000	5000
Modelo $GP_\xi$ , $\xi = 0.1$			
RMSE <sub>00</sub>	$0.259 \pm 0.1790$	$0.151 \pm 0.1580$	$0.113 \pm 0.1464$
$\ell = 4$	$2.535 \pm 0.0065$	$2.046 \pm 0.0058$	$1.855 \pm 0.0058$
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$3.467 \pm 0.0097$	$2.691 \pm 0.0085$	$2.390 \pm 0.0078$
$\ell = 9$	$26.030 \pm 0.1134$	$17.04 \pm 0.1031$	$14.011 \pm 0.0708$
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	$15.553 \pm 0.0560$	$9.022 \pm 0.0506$	$6.801 \pm 0.0247$
Modelo $GP_\xi$ , $\xi = 0.25$			
RMSE <sub>00</sub>	$0.237 \pm 0.1756$	$0.131 \pm 0.1525$	$0.092 \pm 0.1377$
$\ell = 4$	$1.850 \pm 0.0046$	$1.455 \pm 0.0046$	$1.293 \pm 0.0045$
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$2.333 \pm 0.0065$	$1.747 \pm 0.0053$	$1.501 \pm 0.0056$
$\ell = 9$	$12.510 \pm 0.0593$	$8.927 \pm 0.0305$	$7.296 \pm 0.0334$
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	$5.693 \pm 0.0274$	$3.152 \pm 0.0128$	$2.202 \pm 0.0082$
Modelo $GP_\xi$ , $\xi = 0.5$			
RMSE <sub>00</sub>	$0.239 \pm 0.1751$	$0.118 \pm 0.1479$	$0.075 \pm 0.1294$
$\ell = 4$	$1.484 \pm 0.0047$	$1.210 \pm 0.0044$	$1.110 \pm 0.0055$
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	$1.761 \pm 0.0058$	$1.345 \pm 0.0056$	$1.175 \pm 0.0073$
$\ell = 9$	$8.404 \pm 0.0342$	$5.646 \pm 0.0197$	$4.277 \pm 0.0230$
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	$2.865 \pm 0.0123$	$1.415 \pm 0.0072$	$0.902 \pm 0.0045$

Consequentemente,

$$H_p(k) \equiv MO_p(k) \stackrel{d}{=} \frac{1}{p} \left( 1 - \left( \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_i^{\xi p} (1 + o_p(1)) \right)^{-1} \right). \quad (4)$$

Como  $\mathbb{E}(Y^a) = 1/(1-a)$  se  $a < 1$ , a lei dos grandes números permite-nos garantir que se  $p < 1/\xi$ ,  $H_p(k)$  converge fracamente para  $\xi$ , quando  $n \rightarrow \infty$ . Para  $p = 1/\xi$ , temos pois em (4) uma soma de Paretos unitárias, como termo dominante. Com base no TLC generalizado ([5, 12]), podemos garantir que  $\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_i - \ln k$  converge para uma estável para somas com um coeficiente de estabilidade

Tabela 6: RMSEs simulados de  $H_{00}/\xi$  (primeira linha) e indicadores REFF de  $H_p$ ,  $p = \ell/(10\xi)$ ,  $\ell = 4, 5, 9, 10, 12$  (com intervalos de confiança a 95%), para modelos Student- $t_\nu$ ,  $\nu = 4, 2$

Modelo Student - $t_4$ , $\xi = 1/4 = 0.25$			
$n$	100	1000	5000
RMSE <sub>00</sub>	0.183 $\pm$ 0.1537	0.085 $\pm$ 0.1340	0.054 $\pm$ 0.1157
$\ell = 4$	1.750 $\pm$ 0.0065	1.329 $\pm$ 0.0050	1.182 $\pm$ 0.0045
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	2.133 $\pm$ 0.0089	1.534 $\pm$ 0.0060	1.300 $\pm$ 0.0057
$\ell = 9$	10.390 $\pm$ 0.0650	7.023 $\pm$ 0.0207	5.344 $\pm$ 0.0294
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	77.870 $\pm$ 8.4682	$\infty$	$\infty$
$\ell = 12$	4.349 $\pm$ 0.0277	2.050 $\pm$ 0.0071	1.285 $\pm$ 0.0043
Modelo Student - $t_2$ , $\xi = 1/2 = 0.5$			
RMSE <sub>00</sub>	0.203 $\pm$ 0.5207	0.084 $\pm$ 0.1295	0.047 $\pm$ 0.1093
$\ell = 4$	1.433 $\pm$ 0.0052	1.196 $\pm$ 0.0032	1.184 $\pm$ 0.0038
$\ell = 5$ ( $p = 1/(2\xi)$ )	1.669 $\pm$ 0.0068	1.295 $\pm$ 0.0044	1.276 $\pm$ 0.0046
$\ell = 9$	6.734 $\pm$ 0.0836	4.441 $\pm$ 0.0197	3.725 $\pm$ 0.0185
$\ell = 10$ ( $p = 1/\xi$ )	6.339 $\pm$ 0.3947	35.243 $\pm$ 2.5342	$\infty$
$\ell = 12$	2.149 $\pm$ 0.0285	0.997 $\pm$ 0.0050	0.564 $\pm$ 0.0023

$\alpha = 1$ , ou seja uma v.a. de tipo Cauchy. Podemos pois escrever  $H_p(k) = \xi(1 + O_p(1/\ln k))$ , e consequentemente  $H_p(k)$  continua a ser consistente para a estimação de  $\xi$ , quando  $p = 1/\xi$ .

Mas se  $p > 1/\xi$  ( $p\xi > 1$ ), como  $\sum_{i=1}^k Y_i^{p\xi}/k = O_p(k^{p\xi-1}) \rightarrow \infty$ , quando  $k \rightarrow \infty$ ,  $MO_p(k)$  converge para  $1/p < \xi$ , i.e.  $MO_p(k)$  deixa de ser consistente para a estimação de  $\xi$ . Para detalhes sobre o comportamento não degenerado de  $MO_p(k)$  na zona de não regularidade, i.e. quando  $1/(2\xi) < p \leq 1/\xi$ , veja-se [8].

## 4 Alguns comentários finais

É bem conhecido o facto de o estimador de Hill conduzir frequentemente a uma supra-estimação de  $\xi$ , mesmo quando se considera a escolha de  $k$  em níveis ótimos, no sentido de erro quadrático médio mínimo. A utilização de um parâmetro de controlo adicional,  $p \in \mathbb{R}$  e da metodologia- $MO_p$  leva-nos a uma mais fiável estimação

do EVI, através de estimadores assintoticamente normais, sempre que  $p < 1/(2\xi)$ . Sabemos agora que podemos avançar até  $p = 1/\xi$ , mas com um comportamento estável para somas e não normal, sempre que  $1/(2\xi) < p \leq 1/\xi$ , com índice de estabilidade  $\alpha = 1/(p\xi)$ . Vários métodos alternativos para a escolha de  $(p, k)$  têm sido delineados. Mas o tópico continua ainda parcialmente em aberto, devido ao perigo de a escolha de  $p$  poder ultrapassar  $1/\xi$ , o que levaria a situações de inconsistência.

## Agradecimentos

Investigação financiada por Fundos Nacionais através da **FCT** – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, projecto UIDB /MAT /00006 /2020 (CEA/UL) e UIDB/MAT/04674/2020 (CIMA).

## Referências

- [1] Beran, J., Schell, D., Stehlik, M. (2014). The harmonic moment tail index estimator: asymptotic distribution and robustness. *Ann. Inst. Statist. Math.* 66, 193–220.
- [2] Brilhante, F., Gomes, M.I., Pestana, D. (2013). A simple generalization of the Hill estimator. *Computational Statistics and Data Analysis* 57:1, 518–535.
- [3] Caeiro, F., Gomes, M.I., Beirlant, J., de Wet, T. (2016). Mean-of-order- $p$  reduced-bias extreme value index estimation under a third-order framework. *Extremes* 19:4, 561–589.
- [4] Gnedenko, B.V. (1943). Sur la distribution limite du terme maximum d’une série aléatoire. *Annals of Mathematics* 44:6, 423–453.
- [5] Gnedenko, B.V., Kolmogorov, A.N. (1954). *Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables*, Addison-Wesley, Reading, MA.

- [6] Gomes, M.I., Caeiro, F. (2014). Efficiency of partially reduced-bias mean-of-order- $p$  versus minimum-variance reduced-bias extreme value index estimation. In Gilli, M. *et al.* (eds.). *Proceedings of COMPSTAT 2014*, ISI/IASC, 289–298.
- [7] Gomes, M.I., Oliveira, O. (2001). The bootstrap methodology in Statistics of Extremes: choice of the optimal sample fraction. *Extremes* 4:4, 331–358.
- [8] Gomes, M.I., Henriques-Rodrigues, L., Pestana, D. (2020). *Non-regular Frameworks and the Mean-of-order  $p$  Extreme Value Index Estimation*. Submitted preprint available at: <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.28347.64804>
- [9] Hill, B.M. (1975). A simple general approach to inference about the tail of a distribution. *Ann. Statist.* 3, 1163–1174.
- [10] Paulauskas, V., Vaičiulis, M. (2013). On the improvement of Hill and some others estimators. *Lith. Math. J.* 53, 336–355.
- [11] Paulauskas, V., Vaičiulis, M. (2017). A class of new tail index estimators. *Ann. Instit. Statist. Math.* 69, 661–487.
- [12] Samorodnitsky, G., Taqqu, M. (1994). *Stable Non-Gaussian Random Processes—Stochastic Models with Infinite Variance*, Chapman & Hall, USA.

# Análise de regressão linear com autocorrelação nos erros para dados censurados

Rodney Sousa

Universidade de Aveiro e Centro de Investigação e Desenvolvimento em Matemática e Aplicações (CIDMA), Portugal, *rodney@ua.pt*

Isabel Pereira

Universidade de Aveiro e CIDMA, Portugal, *isabel.pereira@ua.pt*

Maria Eduarda Silva

Faculdade de Economia da Universidade do Porto e CIDMA, Portugal, *mesilva@fep.up.pt*

**Palavras-chave:** Regressão linear; Dados censurados; Ampliação de dados

**Resumo:** Este trabalho aborda, numa perspetiva bayesiana, a análise de modelos de regressão linear com erros autocorrelacionados para dados censurados, recorrendo a métodos Computacionais Bayesianos Aproximados (ABC) e ao amostrador de Gibbs com a Ampliação de Dados (GDA). Considera-se que o termo dos erros segue um processo autorregressivo, AR, e investiga-se o desempenho dos métodos através de dois estudos de simulação com diferentes cenários de censura (5%, 20% e 40%) e dimensão de amostras (50, 100 e 500). Os resultados indicam que o método GDA é consistente Bayesiano, mesmo em cenários em que a proporção de valores censurados é elevada, enquanto que no método ABC, as estimativas dependem fortemente das distribuições *a priori*.

## 1 Introdução

Os modelos de regressão linear (RL) constituem ferramentas bastante úteis na Econometria, quando se pretende analisar a relação entre dois conjuntos de variáveis. Sob os pressupostos do modelo clássico, em que os dados são independentes e identicamente distribuídos (iid), os estimadores dos mínimos quadrados ordinários (OLS) são consistentes e os mais eficientes na classe dos estimadores lineares. No entanto, em muitos problemas reais, os dados apresentam correlação temporal, pelo que se devem considerar modelos RL capazes de acomodar tal correlação e, conseqüentemente, métodos de estimação mais eficientes, tal como os mínimos quadrados generalizados viáveis (FGLS, do inglês: *Feasible Generalized Least Squares*) ([1]).

Além disso, em estudos de fenómenos sociais e ambientais, a variável de interesse pode estar censurada, isto é, só é possível ter acesso aos (reais) valores dessa variável num determinado intervalo. Por exemplo, dados referentes ao nível de poluição na água podem estar censurados devido a limites de deteção inerentes ao aparelho de medição. Ao estimar modelos de RL para este tipo de dados, descartar as observações censuradas, ignorá-las ou fazer algum tipo de imputação com o objetivo de aplicar, diretamente, os métodos usuais de estimação (OLS ou GLS) resulta em estimativas inconsistentes. De facto, estudos de simulação reportados na literatura, [3], revelaram que o viés desses estimadores aumenta de acordo com a proporção de valores censurados.

A primeira referência a uma abordagem metodológica sobre a estimação de modelo de RL com erros autocorrelacionados no contexto de dados censurados data de 1986, com o trabalho de Zeger e Brookmeyer [2], no qual os autores deduziram a verosimilhança exata do modelo. No entanto, em termos práticos, o cálculo desta verosimilhança só é viável em amostras cuja proporção de observações censuradas é desprezável. Por isso, têm surgido na literatura propostas de métodos aproximados para a estimação destes modelos. Por exemplo, [3] propôs uma abordagem baseada no método SAEM



(*Stochastic Approximation of the EM*), enquanto que [4] sugeriu um método de quasi-verosimilhança, baseado num sistema de equações.

Embora existam algumas propostas de soluções na literatura para lidar com este problema, não existem estudos referentes à estimação de modelos de RL com erros autocorrelacionados para dados censurados usando a abordagem Bayesiana. Por isso, neste trabalho consideram-se dois métodos alternativos para a estimação destes modelos, nomeadamente, os métodos Computacionais Bayesianos Aproximados (ABC) e o método Gibbs com a ampliação de dados (GDA). Os métodos ABC referem-se à família de métodos de inferência sem recurso à função de verosimilhança. Por isso, são especialmente úteis para a estimação de modelos complexos cuja função de verosimilhança é difícil de calcular ([5], [6], [7]). Por outro lado, o método GDA caracteriza-se pela utilização de métodos MCMC usando o algoritmo Gibbs onde, em cada iteração, se simulam tanto os parâmetros (das respetivas condicionais completas), como também os valores correspondentes às observações censuradas (da distribuição subjacente à variável latente) [9], [8]. A vantagem desses métodos é que permitem obter também estimativas de distribuições *a posteriori* dos parâmetros.

Para atingir os objetivos propostos, o presente artigo foi organizado da seguinte forma: na secção 2 define-se o modelo de RL com erros autocorrelacionados para dados censurados; na secção 3 introduzem-se os métodos de estimação propostos, nomeadamente, o ABC e o GDA; na secção 4 apresentam-se dois estudos de simulação de modo a investigar o desempenho dos métodos propostos, em diferentes cenários de censura (5%, 20% e 40%) e diferentes dimensões de amostras (50, 100 e 500). Por fim, na secção 5, aplica-se o método GDA a um conjunto de dados reais, com 41% de censura, onde se faz uma seleção entre os modelos de RL com erros AR(1) e erros AR(2).

## 2 Modelo de RL com erros autocorrelacionados para dados censurados

O modelo de RL com erros modelados por um processo autorregressivo, é descrito pelas seguintes equações

$$y_t^* = \mathbf{x}_t \boldsymbol{\beta} + u_t, \quad (1)$$

$$u_t = \rho_1 u_{t-1} + \dots + \rho_p u_{t-p} + \varepsilon_t, \quad t \in \mathbb{N} \quad (2)$$

onde  $y_t^*$  é a variável de interesse observada no tempo  $t$ ,  $\mathbf{x}_t = (1, x_{t2}, \dots, x_{tk})$  é um vetor  $1 \times k$  de variáveis explicativas,  $u_t$  é um processo AR( $p$ ) com erro  $\varepsilon_t \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$ ,  $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_k)$  é o vetor  $k \times 1$  dos coeficientes de regressão e  $\rho_1, \dots, \rho_p$  são os parâmetros autorregressivos. O modelo definido em (1) e (2) diz-se RL censurada (ou *Tobit model*) com erros autocorrelacionados (abreviadamente, RLC-AR( $p$ )) quando a variável dependente,  $y_t^*$ , for censurada.

No contexto deste trabalho considera-se que  $y_t^*$  é uma variável censurada à esquerda do limite de deteção  $L \in \mathbb{R}$ . Isto significa que os seus valores só são acessíveis acima do limite  $L$ , enquanto que os valores menores ou iguais a  $L$  são registados como sendo  $L$ . Neste caso, a variável realmente observada,  $y_t$ , é definida do seguinte modo:

$$y_t = \begin{cases} y_t^* & \text{se } y_t^* > L \\ L & \text{se } y_t^* \leq L \end{cases}, \quad t = 1, \dots, T. \quad (3)$$

Na prática, descartar as observações censuradas ou ignorar a censura nos dados com o objetivo de aplicar métodos de inferência usuais conduz a resultados inconsistentes [3]. No desenvolvimento teórico e no estudo de simulação considera-se apenas e sem perda de generalidade a censura à esquerda. No entanto, a respetiva adaptação para o caso da censura à direita é imediata; pelo que, para ilustrar a versatilidade do procedimento se considera na aplicação a um conjunto de dados reais esta última situação.

### 3 Inferência bayesiana no modelo RLC–AR( $p$ )

Na abordagem Bayesiana as inferências sobre os parâmetros do modelo são realizadas com base na distribuição *a posteriori*, dada por:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \propto L(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}) \times \pi(\boldsymbol{\theta}), \quad (4)$$

em que  $L(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$  é a função de verosimilhança e  $\pi(\boldsymbol{\theta})$  é a distribuição *a priori* dos parâmetros.

No contexto dos modelos de RL com erros AR( $p$ ) para dados censurados, não é possível calcular diretamente a distribuição *a posteriori*, pois a função de verosimilhança tem uma forma bastante complexa, que torna a sua utilização inviável na prática [2]. Em alternativa pode recorrer-se a métodos aproximados que permitam contornar esta dificuldade.

#### 3.1 Método Gibbs com ampliação de dados

O método de ampliação de dados em Estatística Bayesiana foi proposto inicialmente por Tanner & Wong [13] no contexto de dados omissos (*missing data*) e, posteriormente, adaptado por Chib [8] que utilizou este método com o amostrador de Gibbs para estimação de modelos de RL clássica com dados censurados. No método Gibbs com ampliação de dados (GDA), à simulação dos parâmetros dos modelos com base nas respetivas condicionais completas, adiciona-se a simulação das observações censuradas, a partir da correspondente distribuição subjacente ao processo de geração dos dados. Deste modo, é possível utilizar a função de verosimilhança de dados não censurados no cálculo da distribuição *a posteriori*,  $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$ .

##### Ampliação de dados

Seja  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_T)$  o vetor dos dados observados, possivelmente censurado à esquerda de um limite de deteção,  $L \in \mathbb{R}$  e seja  $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_T)$  o vetor de dados aumentados. Cada elemento de  $\mathbf{z}$  é

definido do seguinte modo:

$$z_t = \begin{cases} y_t & \text{se } y_t > L \\ \sim F(z_t | z_t \leq L) & , t = 1, \dots, T, \end{cases} \quad (5)$$

onde  $F(z_t | z_t \leq L)$  é a distribuição truncada correspondente às observações censuradas de  $y_t^*$ . Portanto, hipoteticamente, os dados aumentados  $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_T)$  correspondem às observações da variável censurada,  $y_t^*$ ,  $t = 1, \dots, T$  [8].

### Método GDA em modelos RLC-AR(1)

Para ilustrar o método GDA, considere-se o modelo RLC-AR(1), definido em (1) e (2) para  $p = 1$ .

Neste caso, a função de verosimilhança dos dados aumentados,  $\mathbf{z}$  é dada por

$$L(\mathbf{z} | \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{\frac{T}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^T (z_t^* - \mathbf{x}_t^* \boldsymbol{\beta})^2 \right\}, \quad (6)$$

em que  $z_1^* = z_1 \sqrt{1 - \rho_1}$ ,  $\mathbf{x}_1^* = \mathbf{x}_1 \sqrt{1 - \rho_1}$ ,  $z_t^* = z_t - \rho_1 z_{t-1}$  e  $\mathbf{x}_t^* = \mathbf{x}_t - \rho_1 \mathbf{x}_{t-1}$ ,  $t = 2, \dots, T$  são as diferenças de primeira ordem dos dados [10].

#### Distribuição *a posteriori*

Considerando a distribuição *a priori* não informativa de Jeffreys,  $\pi(\boldsymbol{\theta}) \propto \frac{1}{\sigma^2}$ , justificada pela independência entre os parâmetros, e a função de verosimilhança (6), a distribuição *a posteriori* terá a forma:

$$\pi(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}, \mathbf{z}) \propto \left( \frac{1}{\sigma^2} \right)^{\frac{T}{2}+1} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^T (z_t^* - \mathbf{x}_t^* \boldsymbol{\beta})^2 \right\}. \quad (7)$$

Da equação (7) resulta que as distribuições condicionais completas são dadas por:

$$\pi(\boldsymbol{\beta} | \sigma^2, \rho_1, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})' \frac{1}{\sigma^2} (\mathbf{X}^{*'} \mathbf{X}^*) (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\}, \quad (8)$$

$$\pi(\sigma^2|\beta, \rho_1, \mathbf{z}, \mathbf{y}) \propto \left(\frac{1}{\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}+1} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^n (z_t^* - \mathbf{x}_t^* \beta)^2\right\}, \quad (9)$$

$$\pi(\rho_1|\beta, \sigma^2, \mathbf{z}, \mathbf{y}) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^n (z_t^* - \mathbf{x}_t^* \beta)^2\right\}, \quad (10)$$

em que  $\hat{\beta} = (\mathbf{X}^{*'} \mathbf{X}^*)^{-1} \mathbf{X}^{*'} \mathbf{z}^*$  refere-se às estimativas OLS calculadas com base nos dados transformados  $\{\mathbf{z}^*, \mathbf{X}^*\}$  e  $\mathbf{X}^*$  é uma matriz  $n \times k$ , cujas linhas são  $\mathbf{x}_t^* = (1, x_{t2}^*, \dots, x_{tk}^*)$ . Portanto, no amostrador de Gibbs, os parâmetros  $\beta$  e  $\sigma^2$  são simulados, respetivamente, das distribuições normal multivariada (8) e gama-invertida (9), enquanto que valores do parâmetro autoregressivo,  $\rho_1$ , são simulados através do algoritmo de Metropolis-Hastings [9]. Para obter simulações segundo o método GDA procede-se de acordo com o seguinte algoritmo:

---

Algoritmo GDA: RLC-AR(1)	
1.	Inicializar com $\mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{y}$ , $N \in \mathbb{N}$ e $\boldsymbol{\theta}^{(0)} = (\beta^{(0)}, \sigma^{2(0)}, \rho_1^{(0)})$
2.	Para $i = 1, \dots, N$ :
3.	Simular $\boldsymbol{\theta}^{(i)}   \mathbf{z}^{(i-1)}$
4.	Para $t = 1, \dots, T$ :
5.	Se $y_t$ for censurada, simular $z_t^{(i)}   \boldsymbol{\theta}^{(i)}$
6.	Retornar $\boldsymbol{\theta}^{(1)}, \dots, \boldsymbol{\theta}^{(N)}$ e $\mathbf{z}^{(N)}$

---

### 3.2 Método ABC

O método ABC (do inglês *ABC: Approximate Bayesian Computation*) é uma metodologia de inferência adequada para modelos complexos, cujo cálculo da função de verosimilhança é impossível ou muito trabalhosa. Este método baseia-se no algoritmo de rejeição e num conjunto de Estatísticas sumárias dos dados  $\mathbf{S} = \{S_1, \dots, S_k\}$ . Um dos principais requisitos para a implementação do algoritmo de rejeição é que seja possível simular dados a partir do modelo em análise,  $M(y|\theta^{(i)})$ , em que  $\theta^{(i)}$ ,  $i = 1, \dots, N$  são valores candidatos

para os parâmetros, gerados da respetiva distribuição *a priori*. Assim, definidos  $\mathbf{S}$ , uma tolerância  $\epsilon \in \mathbb{R}_+$  e uma medida de distância,  $d$ , o algoritmo de rejeição ABC pode ser descrito da seguinte forma:

Algoritmo de rejeição ABC	
1.	Inicializar com $N \in \mathbb{N}$ e $\epsilon > 0$
2.	Para $i = 1, \dots, N$ :
3.	Simular $\boldsymbol{\theta}^{(i)} \sim \pi(\boldsymbol{\theta})$
4.	Simular $\mathbf{y}^{(i)} \sim M(\mathbf{y} \boldsymbol{\theta}^{(i)})$
5.	Calcular $d^{(i)} = \ \mathbf{S}(\mathbf{y}) - \mathbf{S}(\mathbf{y}^{(i)})\ $
6.	Retornar $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$ tais que $d^{(i)} \leq \epsilon$

Se  $\mathbf{S}$  for uma estatística suficiente para os parâmetros do modelo, o método ABC converge para os verdadeiros valores dos parâmetros ([7], [5]). Visto que no caso do modelo RLC-AR(1) não existe um conjunto de estatísticas suficientes para  $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \rho_1)$ , recorreremos ao método de *inferência indireta* [14] para selecionar  $s_1, \dots, s_k$ , do seguinte modo: ignorando a possível censura nos dados, estima-se o modelo através do método FGLS [1] e toma-se  $\mathbf{S} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{FGLS}$ . Assim, a método ABC produzirá amostras da distribuição *a posteriori* aproximada,  $\pi_\epsilon(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{S}(\mathbf{y}))$ , dada por

$$\pi_\epsilon(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{S}(\mathbf{y})) \propto L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}^{(i)}) \times \pi(\boldsymbol{\theta}) \times I_\epsilon(\mathbf{y}^{(i)}), \quad (11)$$

onde  $I_\epsilon(\mathbf{y}^{(i)}) = \{\mathbf{y}^{(i)} : \|\mathbf{S}(\mathbf{y}) - \mathbf{S}(\mathbf{y}^{(i)})\| \leq \epsilon\}$ .

## 4 Estudos de simulação

Com o objetivo de analisar o desempenho de cada uma das metodologias propostas, GDA e ABC, realizaram-se estudos de simulação considerando o modelo RLC-AR(1) simples, sob diferentes cenários de censura à esquerda (5%, 20% e 40%) e tamanhos de amostras (50, 100 e 500). E, para facilitar a comparação com o desempenho de outros métodos propostos na literatura, os parâmetros foram escolhidos com base nos valores utilizados por Schumacher *et al* (2017),

no estudo de simulação envolvendo o método SAEM. De forma semelhante, os valores da variável explicativa  $x_{t2}$  foram gerados da distribuição  $Uniforme(1,3)$ ,  $t = 1, \dots, n$  [3]. As simulações foram realizadas no software R [11] e para cada cenário consideraram-se 100 réplicas.

## Resultados

Na Figura 1 estão representadas as distribuições *a posteriori* estimadas através dos métodos ABC e GDA, considerando uma amostra de dimensão elevada ( $n=500$ ), pequena percentagem de censura (5%) e  $\theta = (\beta_1, \beta_2, \sigma^2, \rho_1) = (2, 1, 2, 0.48)$ . Na figura, verifica-se a superioridade do desempenho do GDA sobre o ABC, visto que, este último (*vermelho*) produz distribuições *a posteriori* estimadas muito distintas das correspondentes distribuições degeneradas nos verdadeiros valores dos parâmetros. De facto, a análise das estimativas ABC em diferentes cenários analisados confirmou que, para certas combinações dos parâmetros, este método não apresenta a consistência bayesiana e as estimativas dependem fortemente das distribuições *a priori*.

Considerando o método GDA, a Figura 2 ilustra a evolução do comportamento das distribuições *a posteriori* estimadas à medida que a dimensão da amostra vai aumentando e com diferentes percentagens de censura. Constatou-se que as distribuições de probabilidade empíricas dos parâmetros tendem a aproximar-se da distribuição degenerada nos correspondentes verdadeiros valores, mesmo em cenários em que a proporção de observações censuradas é elevada (40%). Este comportamento foi observado nas simulações feitas para várias combinações de parâmetros, incluindo valores negativos para o parâmetro de autocorrelação  $\rho_1$ , continuando contudo a verificar-se uma tendência para a sua subestimação em valor absoluto.

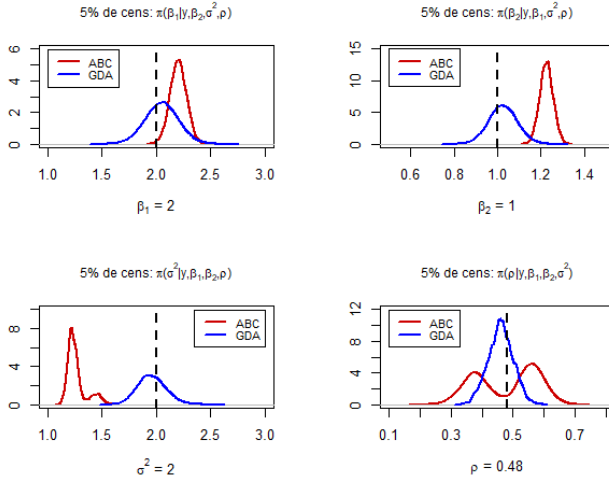


Figura 1: Comparação entre as distribuições *a posteriori* estimadas pelos métodos ABC (*vermelho*) e GDA (*azul*).

## 5 Aplicação aos dados reais

Nesta seção considera-se um conjunto de dados reais, representados na Figura 3 (*vermelho*), referente a medições de altura de nuvem (*cloud ceiling height*), analisados por Schumacher *et al* [3]. A altura de uma nuvem é definida como a distância entre o solo e a base da nuvem, medida em centenas de pés. Os dados foram recolhidos por *National Center for Atmospheric Research*, baseados em  $T = 716$  observações horárias na cidade de São Francisco (EUA), durante o mês de março de 1989. O instrumento de medição tinha um limite de deteção de 12000 pés, resultando em 41.7% de observações censuradas.

Usando o método GDA, estimaram-se dois modelos RLC-AR(p),



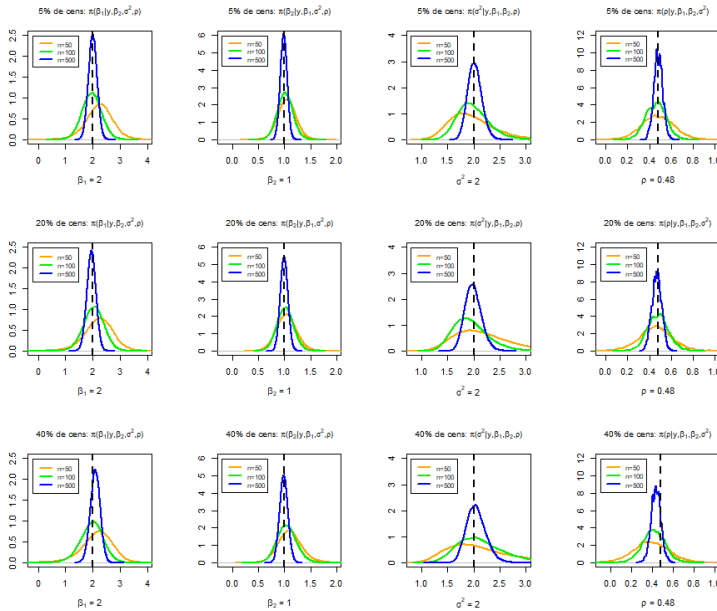


Figura 2: Distribuições *a posteriori* estimadas usando o método GDA e diferentes cenários de censura.

sem variáveis explicativas, com  $p = 1, 2$ . Para se proceder à seleção de modelos e consequentemente da ordem do processo  $AR(p)$  a considerar, utilizaram-se os critérios BIC e DIC. As estimativas obtidas encontram-se na Tabela 1 e sugerem que o modelo  $AR(2)$  é o mais adequado, visto que apresenta os menores valores de BIC e DIC. É de realçar que, usando a abordagem clássica e este conjunto de dados, Schumacher *et al* [3] também selecionaram o modelo com o processo  $AR(2)$ , cujas estimativas para os parâmetros, usando a package "ARCensReg"[15], são  $\hat{\beta}_1 = 4.07, \hat{\sigma}^2 = 0.88, \hat{\rho}_1 = 0.66$  e  $\hat{\rho}_2 = 0.17$ , que são bastante similares às obtidas pelo método GDA,

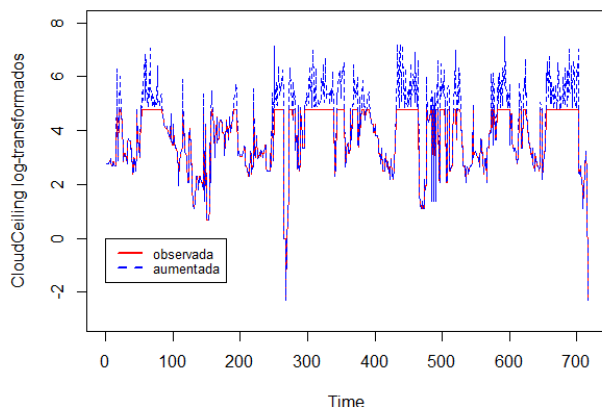


Figura 3: Série temporal censurada referente a observações de altura de nuvens na cidade de São Francisco (EUA). A linha vermelha representa os dados observados e a linha azul representa os dados aumentados, simulados com base nas estimativas do modelo com erros  $AR(2)$ .

apresentadas na Tabela 1. Evidentemente que as abordagens - clássica e bayesiana- permitem fazer análise com perspectivas distintas. No entanto realça-se que a metodologia bayesiana tem ainda a vantagem de permitir obter realizações da distribuição *a posteriori* dos parâmetros.

## 6 Conclusão

A necessidade de estimar modelos de regressão linear para dados censurados e com erros autoregressivos,  $RLC-AR(p)$ , pode surgir

Tabela 1: Resultados de estimação e seleção de modelos usando GDA. Os valores entre parênteses referem-se aos desvios padrão dos parâmetros.

$p$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\sigma}^2$	$\hat{\rho}_1$	$\hat{\rho}_2$	BIC	DIC
1	4.25	1.25	0.79	—	897.7	983.0
	(0.005)	(0.005)	(0.001)	—	—	—
2	4.22	1.10	0.65	0.17	766.1	781.4
	(0.006)	(0.001)	(0.001)	(0.001)	—	—

em vários problemas reais. Ignorar a censura nos dados para aplicar diretamente os métodos de estimação usuais resulta em estimadores inconsistentes.

Neste trabalho analisaram-se duas abordagens bayesianas para realizar inferências em modelos RLC-AR(p), nomeadamente, o método Gibbs com ampliação de dados (GDA) e o método de Computação Bayesiana Aproximada (ABC), onde, por meio de estudos de simulação, se verificou que o método GDA exibe consistência bayesiana. A utilização da abordagem bayesiana permite não só obter estimativas pontuais dos parâmetros, como também as correspondentes distribuições *a posteriori*. Além disso, método GDA permite reconstruir a série temporal, atribuindo valores credíveis aos dados censurados e preservando a estrutura de correlação. Advogamos que esta possibilidade seja importante para a construção de previsões. No entanto esse é um tema para um trabalho futuro.

## Agradecimentos

Este trabalho foi realizado com o suporte financeiro da Fundação Calouste Gulbenkian e da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) com as referências UIDB/MAT/04106/2020 (CIDMA).

## Referências

- [1] Greene, W. (2012). *Econometrics Analysis - 7th Ed.* Prentice Hall, Upper Saddle River.
- [2] Zeger, S.L., Brookmeyer, R. (1986). Regression Analysis with Censored Autocorrelated Data. *Journal of the American Statistical Association* 81, 722–729.
- [3] Schumacher, F. L., Lachos, V.H., Dey, D.K. (2017). Censored Linear Regression Models with Autoregressive Errors: A Likelihood-Based Perspective. *The Canadian Journal of Statistics* Vol. 45, 68, 375–392.
- [4] Wang, C., Chan, K. (2018). Quasi-Likelihood Estimation of a Censored Autoregressive Model with Exogenous Variables. *Journal of the American Statistical Association* 113:523, 1135–1145.
- [5] Biau, G., Guyader, G. (2015). A New Insights Into ABC. *Ann. Inst. Henri Poincaré Probab. Stat* 51, 376–403.
- [6] Beaumont, M.A., Zhang, W., Balding, D.J. (2002). Approximate Bayesian Computation in Population Genetics. *Genetics* 162, 2025–2035.
- [7] Blum, M.G.B., Nunes, M.A., Prangle, D., Sisson, S.A. (2013). A Comparative Review of Dimension Reduction Methods in Approximate Bayesian Computation. *Statistical Science* Vol.28, 2, 189–208.
- [8] Chib, S. (1992). Bayes Inference in the Tobit Regression Model. *Journal of Econometrics*, 51, 79–99.
- [9] Robert, C., Casella, G. (2010). *Introducing Monte Carlo Methods with R.* Springer, New York.
- [10] Oliveira, M., Santos, L., Fortuna, N. (2010). *Econometria.* Escolar Editora, Lisboa.
- [11] R Core Team (2017). *R: A Language and Environment for Statistical Computing.* R Foundation for Statistical Computing, Viena, Austria.
- [12] Zellner, A., Tiao, G. (1964). Bayesian Analysis of the Regression Model with Autocorrelated Errors. *Journal of American Statistical Association.* Vol. 59, 307, 763–778.
- [13] Tanner, M., Wong, W. (1978). Calculation of Posterior Distributions by Data Augmentation. *Journal of American Statistical Association.* Vol. 82, 398, 528–540.

- [14] Drovandi, C., Pettitt, A., and Faddy, M. (2011). Approximate Bayesian computation using indirect inference. *Journal of Royal Statistical Society*. 60, 317-337.
- [15] Schumacher, F. L., Lachos, V. H., Galarza, C. E. (2016). ARCensReg: Fitting Univariate Censored Linear Regression Model with Autoregressive Errors. *CRAN*.



# Semiestabilidade e max-semiestabilidade

Sandra Dias

Dep. de Matemática, ECT, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro e Centro de Matemática Computacional e Estocástica (CEMAT), Portugal, *sdias@utad.pt*

Maria da Graça Temido

Universidade de Coimbra, Faculdade de Ciências e Tecnologia e Centro de Matemática da Universidade de Coimbra (CMUC), Portugal, *mgtm@mat.uc.pt*

**Palavras-chave:** Limite em distribuição; Somas; Máximos; Semi-estabilidade; Max-semiestabilidade

**Resumo:** Seja  $\{X_n\}$  uma sucessão de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas. Estuda-se a distribuição limite conjunta da soma e do máximo de  $k_n$  variáveis, onde  $\{k_n\}$  é uma sucessão com crescimento geométrico.

## 1 Resultados clássicos

Seja  $\{X_n\}$  uma sucessão de variáveis aleatórias (v.a.'s) independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.) com função de distribuição (f.d.)  $F$ . Consideremos as sucessões parciais de somas e de máximos

$$S_n = X_1 + X_2 + \dots + X_n \quad \text{e} \quad M_n = \max\{X_1, X_2, \dots, X_n\}.$$

O comportamento assintótico conjunto de  $(S_n, M_n)$ , sob normalização linear, foi inicialmente estabelecido em Chow e Teugels [1]. Estes autores usam os resultados de Feller sobre o limite em distribuição de somas, bem como os resultados de Gnedenko para o limite em distribuição do máximo. Em Feller [2] prova-se que o limite em distribuição da soma, linearmente normalizada,  $\{a_n^{-1}S_n + b_n\}$ , com

$a_n > 0$  e  $b_n$  reais, é uma f.d. estável. Concretamente

$$E\left(\exp\left[it(a_n^{-1}S_n + b_n)\right]\right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \phi_{\alpha,p}(t), \quad t \in \mathbf{R},$$

onde

$$\log \phi_{\alpha,p}(t) = \begin{cases} c_1|t|^\alpha \left[1 - i(2p-1)\text{sign}(t) \tan\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right)\right] & \text{se } \alpha \neq 1 \\ -c_2|t| \left[1 + i(2p-1)\frac{2}{\pi}\text{sign}(t) \log|t|\right] & \text{se } \alpha = 1 \end{cases},$$

$\alpha \in ]0,2]$  representa o índice de estabilidade,  $0 \leq p \leq 1$  e  $c_1, c_2 > 0$ . O caso  $\alpha = 2$  corresponde à lei de Gauss. Acrescenta-se que  $F$  pertence ao domínio de atração de somas da lei estável com função característica  $\phi_{\alpha,p}$  (escrevemos  $F \in \mathcal{D}_S(\alpha,p)$ ) se e só se  $0 < \alpha < 2$  e existe alguma função de variação lenta  $L$  tais que, para  $x > 0$ ,

$$1 - F(x) \sim p^{\frac{2-\alpha}{\alpha}} x^{-\alpha} L(x) \quad \text{e} \quad F(-x) \sim (1-p)^{\frac{2-\alpha}{\alpha}} x^{-\alpha} L(x),$$

ou se  $\alpha = 2$  e  $\mu(x) = \int_{-x}^x y^2 dF(y)$  é uma função de variação lenta.

De acordo com Gnedenko [3], sabe-se que o limite em distribuição da sucessão  $\{c_n^{-1}(M_n - d_n)\}$ , com  $c_n > 0$  e  $d_n$  reais, é uma distribuição max-estável  $G_\beta$ , Gumbel, Fréchet ou Weibull. Neste caso, dizemos que  $F$  pertence ao domínio de atração de máximos de  $G_\beta$  e escrevemos  $F \in \mathcal{D}_{MS}(G_\beta)$ . Chow e Teugels [1] provam que, para sucessões reais adequadas  $\{a_n > 0\}$ ,  $\{b_n\}$ ,  $\{c_n > 0\}$  e  $\{d_n\}$ , a sucessão bivariada  $\{a_n^{-1}S_n + b_n, c_n^{-1}(M_n - d_n)\}$  converge em distribuição para  $(U,V)$ , não degenerado, se e só se  $F \in \mathcal{D}_S(\alpha,p) \cap \mathcal{D}_{MS}(G_\beta)$ . Mais,  $U$  e  $V$  são v.a.'s independentes, exceto se  $0 < \alpha < 2$ ,  $p > 0$  e  $G_\beta(x) = \exp(-x^{-\beta})$ ,  $x > 0$ , é a f.d. de Fréchet, caso em que

$$E\left(\exp\left[it(a_n^{-1}S_n + b_n)\right] \mathbb{1}_{\{c_n^{-1}(M_n - d_n) \leq v\}}\right) \\ \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \phi_{\alpha,p}(t) \times \exp\left[\int_v^{+\infty} e^{itkw} dw^{-\alpha}\right],$$

com  $k = |pc^{\frac{2-\alpha}{\alpha}}|^{1/\alpha} > 0$ .



Neste trabalho generalizamos este resultado ao caso em que a f.d.  $F$  não pertence a  $\mathcal{D}_S(\alpha, p) \cap \mathcal{D}_{MS}(G_\beta)$ , existindo, contudo, uma sucessão de inteiros positivos a satisfazer

$$k_{n+1}/k_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} r \geq 1, \quad (1)$$

e sucessões reais normalizadoras  $a_n, b_n$  e  $c_n, d_n$ , para a qual se prova que o par  $(a_n^{-1}S_{k_n} + b_n, c_n^{-1}(M_{k_n} - d_n))$  possui distribuição limite não degenerada, a qual caraterizamos.

## 2 Semiestável e max-semiestável

De acordo com Kruglov [8] e Grinevich e Khokhlov [6], se  $\{k_n\}$  é uma sucessão de inteiros a satisfazer (1), então o limite em distribuição de  $\{a_n^{-1}S_{k_n} + b_n\}$  é uma f.d. semiestável  $G_{\alpha, \theta}$ . Tem-se  $a_{n+1} \geq a_n$ ,  $a_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$  e  $\frac{a_{n+1}}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} a \geq 1$  e  $b_n = o(k_n)$ . Dizemos que  $F$  pertence ao domínio de atração de somas da f.d. semiestável  $G_{\alpha, \theta}$ , escrevendo  $F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_{\alpha, \theta})$ . A f.d. semiestável  $G_{\alpha, \theta}$  é Gaussiana ( $\alpha = 2$ ) ou tem função característica,  $\varphi_{\alpha, \theta}$ , com a seguinte representação

$$\log \varphi_{\alpha, \theta}(t) = ict + \int_{-\infty}^{+\infty} \left( e^{itx} - 1 - \frac{itx}{1+x^2} \right) dH(x), \quad (2)$$

onde  $c \in \mathbb{R}$  e  $H$  é a função espectral dada por

$$H(x) = \begin{cases} (-x)^{-\alpha} \theta_1(\log(-x)) & \text{se } x < 0 \\ -x^{-\alpha} \theta_2(\log x) & \text{se } x > 0 \end{cases}, \quad (3)$$

para  $0 < \alpha < 2$  e  $\theta_i$ ,  $i = 1, 2$ , funções periódicas tais que

$$e^{\alpha h} \theta_i(x - h) - e^{-\alpha h} \theta_i(x + h) \geq 0,$$

com  $0 \leq c_i \leq \theta_i(x) \leq d_i < +\infty$ ,  $i = 1, 2$ ,  $c_1 + c_2 > 0$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}$ ,  $\forall h \geq 0$ .

A classe de f.d.'s max-semiestáveis deve-se a Grinevich [4, 5] e Pancheva [9]. Se  $\{k_n\}$  é uma sucessão de inteiros a satisfazer (1), então o limite de  $P((M_{k_n} - d_n)/c_n \leq x) = F^{k_n}(c_n x + d_n)$ , com  $\{c_n > 0\}$ , se existir, é uma f.d. max-semiestável  $G_{\beta, \nu}$ . Dizemos que  $F$  pertence ao domínio de atração de  $G_{\beta, \nu}$  escrevendo  $F \in \mathfrak{D}_{MSS}(G_{\beta, \nu})$ . A f.d.  $G_{\beta, \nu}$  pertence a apenas uma das seguintes famílias caraterizadas por

$$\Phi_{\beta, \nu}(x) = \exp(-x^{-\beta} \nu(\log(x))), \quad x > 0,$$

$$\Psi_{\beta, \nu}(x) = \exp((-x)^{\beta} \nu(\log(-x))), \quad x < 0,$$

$$\Lambda_{\nu}(x) = \exp(-e^{-x} \nu(x)), \quad x \in \mathbb{R},$$

onde  $\nu$  é uma função positiva, limitada e periódica de período  $\log r$ . Temos ainda  $\frac{c_{n+1}}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \gamma > 0$ ,  $\frac{d_{n+1} - d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \delta \geq 0$ , bem como  $\frac{d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  (se  $G_{\beta, \nu} = \Phi_{\beta, \nu}$ ) e  $\frac{x_F - d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  (se  $G_{\beta, \nu} = \Psi_{\beta, \nu}$ ), onde  $x_F := \sup\{x \in \mathbb{R} : F(x) < 1\}$ .

### 3 Resultado principal

Nesta secção estudamos o comportamento conjunto do par  $(S_{k_n}, M_{k_n})$ , onde  $\{k_n\}$  satisfaz (1). Generalizamos assim os resultados de Chow e Teugels [1].

**Teorema 3.1** *A sucessão  $\{a_n^{-1} S_{k_n} + b_n, c_n^{-1} (M_{k_n} - d_n)\}$  converge em distribuição para  $(U, V)$ , não degenerado, se e só se a f.d.  $F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_{\alpha, \theta}) \cap \mathfrak{D}_{MSS}(G_{\beta, \nu})$ . As v.a.'s  $U$  e  $V$  são independentes exceto se  $0 < \alpha < 2$  e  $G_{\beta, \nu} = \Phi_{\alpha, \nu}$ . Neste caso*

$$E \left[ e^{it(a_n^{-1} S_{k_n} + b_n)} \mathbb{I}_{\{M_{k_n} \leq c_n v + d_n\}} \right] \\ \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \varphi_{\alpha, \theta}(t) \times \exp \left\{ \int_v^{+\infty} e^{ity/\lambda} d(y^{-\beta} \nu(\log y)) \right\},$$

onde  $\varphi_{\alpha, \theta}$  é dado por (2) e  $\frac{a_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \lambda$ .

*Dem.:* Tem-se

$$\begin{aligned}\chi_n(t, v) &\equiv E \left[ e^{it(a_n^{-1} S_{k_n} + b_n)} \mathbb{I}_{\{M_{k_n} \leq c_n v + d_n\}} \right] \\ &= \left[ \int_{-\infty}^{c_n v + d_n} e^{it(a_n^{-1} u + \frac{b_n}{k_n})} dF(u) \right]^{k_n} \\ &= \left[ \frac{1}{k_n} \int_{-\infty}^{+\infty} k_n (e^{itw} - 1) dF \left( a_n \left( w - \frac{b_n}{k_n} \right) \right) + 1 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{k_n} \int_v^{+\infty} k_n e^{it(a_n^{-1}(c_n y + d_n) + \frac{b_n}{k_n})} dF(c_n y + d_n) \right]^{k_n}.\end{aligned}$$

Para obter a convergência do primeiro integral, temos que

$$\begin{aligned}k_n \log \int_{-\infty}^{+\infty} e^{itw} dF \left( a_n \left( w - \frac{b_n}{k_n} \right) \right) &= \log E \left[ e^{it(a_n^{-1} S_{k_n} + a_n b_n)} \right] \\ &\xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \log \varphi_{\alpha, \theta}(t),\end{aligned}$$

com  $\log \varphi_{\alpha, \theta}$  dado por (2). Uma vez que  $\log x \sim 1 - x, x \rightarrow 1$ , vem

$$\int_{-\infty}^{+\infty} k_n (e^{itw} - 1) dF \left( a_n \left( w - \frac{b_n}{k_n} \right) \right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \log \varphi_{\alpha, \theta}(t).$$

Para estabelecer a convergência de

$$w_n(t, v) = \int_v^{+\infty} k_n e^{it(a_n^{-1}(c_n y + d_n) + \frac{b_n}{k_n})} dF(c_n y + d_n), \quad (4)$$

cujo limite denotamos por  $w(t, v)$ , consideramos as interseções possíveis dos domínios de atração de somas

$$SS \text{ I: } F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_{\alpha, \theta}), 0 < \alpha < 2, \quad SS \text{ II: } F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_2),$$

com os três domínios de atração de máximos

$$\begin{aligned}MSS \text{ I: } F &\in \mathfrak{D}_{MSS}(\Phi_{\beta, \nu}), & MSS \text{ II: } F &\in \mathfrak{D}_{MSS}(\Psi_{\beta, \nu}), \\ MSS \text{ III: } F &\in \mathfrak{D}_{MSS}(\Lambda_{\nu}).\end{aligned}$$

Caso SS I  $\cap$  MSS I: Há que distinguir:  $\theta_2(x) \neq 0$ , para  $x \in I \subset \mathbb{R}$  e  $\theta_2(x) = 0$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}$ .

Começamos por admitir que  $\theta_2(x) \neq 0$ . Uma vez que  $F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_{\alpha,\theta})$ ,  $0 < \alpha < 2$ , devido a Khokhlov [8], temos

$$F^{k_n}(a_n x) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} K(x) := \exp(-x^{-\alpha} \theta_2(\log x)),$$

bem como

$$F^{k_n}(c_n x) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \Phi_{\beta,\nu}(x) := \exp(-x^{-\beta} \nu(\log x)),$$

pois  $F \in \mathfrak{D}_{MSS}(\Phi_{\beta,\nu})$ . Assim, o Teorema de Khintchine estabelece que

$$K(x) = \Phi_{\beta,\kappa\nu}(\lambda \kappa^{1/\beta} x + \mu),$$

com  $d_n = 0$ ,  $b_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ ,  $\frac{a_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \lambda$  e  $\frac{b_n - d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mu = 0$ . Então

$$\begin{aligned} x^{-\alpha} \theta_2(\log x) &= (\lambda \kappa^{1/\beta} x)^{-\beta} \kappa \nu(\log(\lambda \kappa^{1/\beta} x)) \\ &= x^{-\beta} \lambda^{-\beta} \nu(\log(\lambda \kappa^{1/\beta} x)), \end{aligned}$$

o que implica  $\alpha = \beta$  e  $\theta_2(\log x) = \lambda^{-\beta} \nu(\log(\lambda \kappa^{1/\beta} x))$ . Atendendo a que  $k_n(1 - F(c_n y)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} y^{-\beta} \nu(\log y)$ , voltando a (4), temos

$$w_n(t, v) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} w(t, v) = \int_v^{+\infty} e^{ity/\lambda} d(-y^{-\beta} \nu(\log y)).$$

Então a função característica híbrida do par  $(S_{k_n}, M_{k_n})$  satisfaz

$$E \left[ e^{it(a_n^{-1} S_{k_n} + b_n)} \mathbb{I}_{\{M_{k_n} \leq c_n v + d_n\}} \right] \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \varphi_{\alpha,\theta}(t) e^{-w(t,v)}, \quad (5)$$

com  $w(t, v)$  dependente de  $t$ , o que mostra que  $U$  e  $V$  são dependentes.

Admitamos agora que a função  $\theta_2$  é identicamente nula. Neste caso, temos  $k_n(1 - F(a_n y)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  e

$$k_n(1 - F(c_n y)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} y^{-\beta} \nu(\log y), \quad (6)$$

donde  $(1 - F(a_n y))/(1 - F(c_n y)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Então existe  $n_0 \in \mathbb{N}$  tal que  $c_n < a_n$ , para todo o  $n > n_0$ . Se  $\frac{c_n}{a_n}$  não converge para zero, então existe  $\epsilon > 0$  e uma subsucessão de inteiros positivos  $\{n'\}$  tal que  $\frac{c_{n'}}{a_{n'}} > \epsilon$ . Neste caso  $0 < \epsilon < \frac{c_{n'}}{a_{n'}} < 1$  e, destes limites, concluímos que existe outra subsucessão de inteiros positivos  $\{n''\} \subseteq \{n'\}$  tal que  $\frac{c_{n''}}{a_{n''}} \xrightarrow{n'' \rightarrow +\infty} A > 0$ . Utilizando o Teorema de Khinchine, de (6), deduzimos

$$k_{n''}(1 - F(a_{n''}y)) \xrightarrow{n'' \rightarrow +\infty} (Ay)^{-\beta} \nu(\log(Ay)),$$

o que é uma contradição. Assim, concluímos que  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  e, uma vez que  $\frac{d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  também se tem  $\frac{d_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Temos então

$$w(t, v) = \int_v^{+\infty} d(-y^{-\beta} \nu(\log y)) = v^{-\beta} \nu(\log v), \quad v > 0.$$

Como  $w(t, v)$  não depende de  $t$ , devido a (5), concluímos que  $U$  e  $V$  são independentes.

Caso SS I  $\cap$  MSS II: Seguindo Grinevich e Khokhlov [6] construímos a sucessão  $\{\tilde{a}_n\}$  tal que  $\tilde{a}_n^{-\alpha} L(\tilde{a}_n) \sim n^{-1}$ , onde  $L$  é uma função de variação lenta, e definimos  $a_n = \tilde{a}_{k_n}$ . Então

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{\tilde{a}_{k_{n+1}}}{\tilde{a}_{k_n}} \sim \frac{(k_{n+1} L(\tilde{a}_{k_{n+1}}))^{1/\alpha}}{(k_n L(\tilde{a}_{k_n}))^{1/\alpha}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} r^{1/\alpha}. \quad (7)$$

Por outro lado, Grinevich [4] define a sucessão  $\{c_n\}$  tal que  $F(x_F - c_n) = 1 - \frac{1}{n} r^{-n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1$ , com  $x_F < +\infty$  pois  $F \in \mathcal{D}_{MSS}(\Psi_{\beta, \nu})$ .

Como consequência,  $c_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  e  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Além disso,  $d_n = x_F$  e  $\frac{d_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ . Devido a  $k_n(1 - F(c_n y + x_F)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} (-y)^\beta \nu(\log(-y))$ , concluímos que

$$\begin{aligned} w_n(t, v) &\xrightarrow{n \rightarrow +\infty} w(t, v) = \int_v^0 d(-(-y)^\beta \nu(\log(-y))) \\ &= (-v)^\beta \nu(\log(-v)). \end{aligned}$$

Então, o limite em (5) é  $\varphi_{\alpha,\theta}(t)e^{-(v)^\beta\nu(\log(-v))}$ , concluindo-se que as variáveis  $U$  e  $V$  são independentes.

Caso SS I  $\cap$  MSS III: Recordemos a construção de  $\{a_n\}$  que conduz ao limite (7). Como  $F \in \mathcal{D}_{MSS}(\Lambda_\nu)$ , as sucessões  $\{c_n\}$  e  $\{d_n\}$  verificam as condições seguintes

$$\frac{c_{n+1}}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1 \quad (8)$$

e

$$\frac{d_{n+1} - d_n}{c_n} = \frac{d_{n+1}}{c_{n+1}} \frac{c_{n+1}}{c_n} - \frac{d_n}{c_n} = \frac{d_n}{c_n} \left( \frac{d_{n+1}}{d_n} - 1 \right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \delta > 0, \quad (9)$$

o que implica  $\frac{d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$ , bem como  $\frac{d_{n+1}}{d_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1$ . Este último limite conjugado com (7) estabelece que  $\frac{d_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Mais, os limites (7) e (8) permitem concluir que  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Atendendo a que  $k_n(1 - F(c_n y + d_n)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} e^{-y}\nu(y)$ , obtemos

$$\begin{aligned} w(t, v) &= \int_v^{x_F} d(-e^{-y}\nu(y)) \\ &= \begin{cases} e^{-v}\nu(v) - e^{-x_F}\nu(x_F) & , \quad x_F < +\infty \\ e^{-v}\nu(v) & , \quad x_F = +\infty \end{cases}. \end{aligned}$$

Provámos que as variáveis  $U$  e  $V$  são independentes.

Caso SS II  $\cap$  MSS I: Neste caso  $\frac{d_n}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  e  $\frac{c_{n+1}}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \gamma > 1$ .

Por outro lado, de acordo com o Teorema 2.6.2 de Ibramovich e Linnic [7] (ver também Feller [2] XVIII.5), a sucessão  $\{a_n\}$  satisfaz

$$\frac{k_n \mu(a_n)}{a_n^2} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1.$$

Se  $F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_2)$  então, pelo Teorema 2.6.3 de Ibramovich e Linnic [7], temos  $x^2(1 - F(x) + F(-x)) = o(\mu(x))$ ,  $x \rightarrow +\infty$ . Consequentemente

$$c_n^2 x^2 (1 - F(c_n x) + F(-c_n x)) = o(\mu(c_n)), \quad n \rightarrow +\infty,$$

e

$$\frac{c_n^2 x^2 (1 - F(c_n x))}{\mu(c_n)} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

Assim, obtemos  $\frac{c_n^2}{k_n \mu(c_n)} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Provemos que  $c_n < a_n$ , pelo menos para  $n$  suficientemente grande. Com efeito, se existir uma sucessão de inteiros positivos  $\{n'\}$  tal que  $c_{n'} > a_{n'}$ , então

$$\frac{a_{n'}^2 (1 - F(c_{n'})) k_{n'}}{\mu(a_{n'}) k_{n'}} < \frac{a_{n'}^2 (1 - F(a_{n'})) k_{n'}}{\mu(a_{n'}) k_{n'}} \xrightarrow{n' \rightarrow +\infty} 0,$$

e assim

$$\frac{a_{n'}^2}{\mu(a_{n'}) k_{n'}} \xrightarrow{n' \rightarrow +\infty} 0,$$

o que é falso.

Por outro lado, de  $\frac{c_n^2}{a_n^2} \frac{\mu(a_n)}{\mu(c_n)} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  resulta que  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Assim

$$E \left[ e^{it(a_n^{-1} S_{k_n} + b_n)} \mathbb{I}_{\{M_{k_n} \leq c_n v + d_n\}} \right] \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} e^{ict - \frac{1}{2} \sigma^2 t^2} e^{-v^{-\beta} \nu(\log(v))}, \quad (10)$$

com  $t \in \mathbb{R}$  e  $v > 0$ , sendo portanto  $U$  e  $V$  independentes.

Caso SS II  $\cap$  MSS II: Do Teorema 2.1 de Grinevich [5] sabemos que  $F(x_F - c_n) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1$ , com  $d_n = x_F$  e  $c_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . Então temos trivialmente  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  bem como  $\frac{d_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ .

Caso SS II  $\cap$  MSS III: Como  $\frac{c_{n+1}}{c_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1$ ,  $\frac{d_{n+1}}{d_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1$ ,  $\frac{a_{n+1}}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \gamma > 1$ , novamente concluímos que  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  e  $\frac{d_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ . ■

## 4 Exemplos

Nesta secção apresentamos duas aplicações do resultado anterior.

**Exemplo 4.1** Consideremos a v.a. discreta  $X$  com f.d. dada por

$$1 - F(u) = \begin{cases} p^{[\alpha \log_{1/p} u]} & \text{se } u \geq p^{-1/\alpha} \\ 1 & \text{se } u < p^{-1/\alpha} \end{cases}, \quad p \in ]0, 1[, \quad \alpha \in ]0, 2[.$$

Seja  $r = p^{-1/\alpha}$ . O suporte de  $X$  é  $S_X = \{r^m, m \in \mathbb{N}\}$  com  $P(X = r^m) = p^m \left(\frac{1}{p} - 1\right) = r^{-\alpha m}(r^\alpha - 1)$ ,  $m \in \mathbb{N}$ . Tem-se  $Y = \alpha \log X \sim \text{Geom}(p)$  e  $E(X^2) = \sum_{m=1}^{+\infty} r^{m(2-\alpha)}(r^\alpha - 1)$  divergente porque  $\alpha < 2$ . Com  $c_n = p^{-n/\alpha} = r^n$ ,  $k_n = [p^{-n}]$  e  $\nu(x) = p^{\lfloor -\frac{\alpha}{\log p} x \rfloor + \frac{\alpha}{\log p} x}$ ,  $x \in \mathbb{R}$ , obtemos

$$k_n(1 - F(c_n u)) = u^{-\alpha} \nu(\log u)(1 + o_n(1)), u > 0.$$

Por outro lado, com  $a_n = r^{n+A}$ , para algum  $A \in \mathbb{N}$ , obtemos  $\alpha \log_{1/p} a_n = n + A$  e

$$k_n(1 - F(a_n u)) = (ur^A)^{-\alpha} \nu(\log u), u > 0,$$

pois  $\nu$  tem período  $\log r$ . Então  $F \in \mathfrak{D}_{SS}(G_\alpha) \cap \mathfrak{D}_{MSS}(\Phi_{\beta, \nu})$ . Atendendo a que  $c_n/a_n = r^{-A} := \lambda$ , vem

$$\begin{aligned} w_n(t, v) &= k_n \sum_{u > c_n v} e^{it(a_n^{-1}u + \frac{bn}{k_n})} P(X = u) \\ &= k_n \sum_{r^m > r^n v} e^{ita_n^{-1}r^m} r^{-\alpha m} (r^\alpha - 1) \\ &\sim \sum_{m' > \log_r v} e^{it\lambda r^{m'}} P(Y = m') \\ &= E(e^{it\lambda r^Y} \mid Y > \log_r v) := w(t, v). \end{aligned}$$

Concluimos que  $S_{k_n}$  e  $M_{k_n}$  são assintoticamente dependentes.

**Exemplo 4.2** Consideremos a f.d. definida por  $F(x) = 0$ ,  $x \leq 1$ , e

$$1 - F(x) = x^{-2} \nu(\log x), x > 1,$$

onde  $\nu$  é uma função limitada, positiva e periódica com período  $p$  e  $\nu(0) = 1$ . Esta f.d. tem média finita mas variância infinita.

Com  $r = e^{2p}$ ,  $k_n = [r^n]$  e  $c_n = e^{np}$  temos, para todo o  $x > 1$ ,

$$\begin{aligned} k_n(1 - F(c_n x)) &= [r^n] c_n^{-2} x^{-2} \nu(\log(c_n x)) \\ &= r^n c_n^{-2} x^{-2} \nu(np + \log x)(1 + o_n(1)) \\ &\longrightarrow x^{-2} \nu(\log x), \quad n \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$



Então  $F \in \mathcal{D}_{MSS}(\Phi_{2,\nu})$ . Além disso, a função  $\mu(z) = \int_{-z}^z x^2 dF(x) = \int_1^z x^2 dF(x)$ ,  $z > 1$ , verifica  $\mu(z) \rightarrow +\infty$ ,  $z \rightarrow +\infty$ , bem como

$$\begin{aligned}\mu(z) &= z^2 F(z) - F(1) - \int_1^z 2xF(x)dx \\ &= z^2(F(z) - 1) + 1 + 2 \int_1^z \frac{1}{x} \nu(\log x) dx \\ &= 1 - \nu(\log z) + 2 \int_1^z \frac{1}{x} \nu(\log x) dx.\end{aligned}$$

Como  $\nu$  é uma função positiva e limitada, obtemos que

$$0 < c_1 \log z < \int_1^z \frac{1}{x} \nu(\log x) dx < c_2 \log z, \quad c_1, c_2 > 0,$$

onde  $\mu$  é uma função de variação lenta. Concluimos então que  $F \in \mathcal{D}_{SS}(G_2)$  com  $a_n$  tal que  $k_n a_n^{-2} \mu(a_n) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1$ . Por exemplo, considerando  $\nu(x) = 2 - \cos x$  e  $a_n = 2\sqrt{2n\pi}e^{2n\pi}$ , deduzimos

$$\begin{aligned}\mu(a_n) &= -1 + \cos(\log a_n) + 4 \log 2 + 2 \log(2n\pi) + 8n\pi \\ &\quad - 2 \sin(\log a_n) \sim 8n\pi, \quad n \rightarrow +\infty,\end{aligned}$$

bem como

$$\frac{k_n}{a_n^2} \mu(a_n) = \frac{[e^{4n\pi}]}{8n\pi e^{4n\pi}} 8n\pi(1 + o_n(1)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 1.$$

Então  $\frac{c_n}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  e

$$\frac{b_n}{k_n} = \frac{a_n^{-1} E(X)}{[e^{4n\pi}]} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0,$$

obtendo-se o limite (10), com  $\beta = 2$ .

## Agradecimentos

O trabalho da primeira autora foi parcialmente financiado pela FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia, pelo projeto UID/Multi/04621/2019 do CEMAT/IST-ID (Centro de Matemática Computacional e Estocástica, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa). O trabalho da segunda autora foi parcialmente financiado pelo Centro de Matemática da Universidade de Coimbra - UID/MAT/00324/2019, financiado pelo Governo Português através da FCT e co-financiado pelo Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional através do Acordo de Parceria PT2020.

## Referências

- [1] Chow, T.L., Teugels, J.L. (1979). The sum and the maximum of i.i.d. random variables. In Mandl, P., Hušková, M. (eds.): *Proceeding of the Second Prague Symposium on Asymptotic Statistics*, 81–92, North-Holland, Amsterdam.
- [2] Feller, W. (1971). *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. Vol. 2. J. Wiley and Sons, New York.
- [3] Gnedenko, B. V. (1943). Sur la distribution limite du terme maximum d'une série aléatoire. *Ann. Math.* 44, 423-453.
- [4] Grinevich, I.V. (1992). Max-semistable laws corresponding to linear and power normalizations. *Theory Probab. Appl.* 37, 720–721.
- [5] Grinevich, I.V. (1993). Domains of attraction of the max-semistable laws under linear and power normalizations. *Theory Probab. Appl.* 38, 640–650.
- [6] Grinevich, I.V., Khokhlov, Yu.S. (1996). The domains of attraction of semistable laws. *Theory Probab. Appl.* 40, 361–366.

- [7] Ibragimov, I.A., Linnik, Yu.V. (1971). *Independent and stationary sequences of random variables*. Wolters-Noordho, Groningen.
- [8] Kruglov, V.M. (1972). On an extension of the class of stable distributions. *Teor. Veroyatnost. i Primenen.* 17(4), 723–732.
- [9] Pancheva, E. (1992). Multivariate max-semistable distributions. *Theory Probab. Appl.* 18, 679–705.



## Índice de autores

- Abreu**, Ana Maria, 121  
**Afonso**, Anabela, 13  
**Cabral**, Ivanilda, 107  
**Cadima**, Jorge, 169  
**Caeiro**, Frederico, 107  
**Carvalho**, M. Lucília, 89  
**Costa**, Eliardo G., 45  
**Dias**, Sandra, 243  
**Ferreira**, Fátima, 73  
**Fraga Alves**, Maria Isabel, 137  
**Freitas**, Adelaide, 1  
**G. M. S. Cardoso**,  
Margarida, 197  
**Gomes**, António, 29  
**Gomes**, M. Ivette, 107, 213  
**Gonçalves**, Esmeralda, 59  
**Gouveia-Reis**, Délia, 29  
**Graça**, Luís, 153  
**Henriques-Rodrigues**, Lúcia,  
213  
**Lagarto**, João, 197  
**Malato**, João, 153  
**Martins**, Ana, 197  
**Martins**, Cristina, 59  
**Mendes-Lopes**, Nazaré, 59  
**Mendonça**, Sandra, 29  
**Natário**, Isabel, 89  
**Oliveira**, Luís, 183  
**Pacheco**, António, 73  
**Paulino**, Carlos Daniel, 45  
**Pereira**, Dulce G., 13  
**Pereira**, Isabel, 227  
**Pestana**, Dinis, 213  
**Ribeiro**, Helena, 73  
**Rocha**, Cristina, 121  
**Sepúlveda**, Nuno, 153  
**Silva Lomba**, Jessica, 137  
**Silva**, Maria Eduarda, 227  
**Singer**, Julio M., 45  
**Sousa-Ferreira**, Ivo, 121  
**Sousa**, Rodney, 227  
**Temido**, Maria da Graça, 243  
**Velosa**, Sílvio, 183



## Agradecimentos

Agradecemos às seguintes entidades o valioso patrocínio concedido.

AJNET, Gráfica

AVA - Associação Viola Amarantina

Banco de Portugal

Câmara Municipal de Amarante

CEAUL - Centro de Estatística e Aplicações, Universidade de Lisboa

CIICESI - Centro de Inovação e Investigação em Ciências Empresariais e Sistemas de Informação, ESTG, Instituto Politécnico do Porto

DOLMEN, Desenvolvimento Local e Regional do Baixo Tâmega, Crl

ESTG, Escola Superior de Tecnologia e Gestão, Instituto Politécnico do Porto

FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Hotel Casa da Calçada, Amarante

IMEXSA - Organização de Congressos, Lda

INE - Instituto Nacional de Estatística

IPP - Instituto Politécnico do Porto

ISEP - Instituto Superior de Engenharia do Porto, Instituto Politécnico do Porto

LEMA - Laboratório de Engenharia Matemática, Instituto Superior de Engenharia do Porto, Instituto Politécnico do Porto

PSE, Data Science e Pesquisa Avançada

ROGER MÍDIA, Produções Audiovisuais

Somplay, Produções Audiovisuais

TORRIÉ, Cafés







