



Μπεϋζιανή Στατιστική και MCMC

Μέρος 2^ο : MCMC

Περιεχόμενα Μαθήματος

- Εισαγωγή στο Πρόβλημα.
- Monte Carlo Εκτιμητές.
- Προσομοίωση.
- Αλυσίδες Markov.
- Αλγόριθμοι MCMC (Metropolis – Hastings & Gibbs Sampling).
- WinBugs.
- Διαγνωστικοί Έλεγχοι.
- MCMC στα Γενικευμένα Γραμμικά Μοντέλα.

Μπεϋζιανή Στατιστική

- Δεδομένα $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$
- Παράμετρος $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_k) \in \Theta$
- Πιθανοφάνεια (Likelihood) $L(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta})$
- Εκ των προτέρων (Prior) $p(\boldsymbol{\theta})$
- Εκ των υστέρων (Posterior)

$$p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) = \frac{L(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta}) \times p(\boldsymbol{\theta})}{\int_{\Theta} L(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta}) \times p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}}$$

↘ Σταθερά κανονικοποίησης

Posterior \propto Likelihood \times Prior

Παραδείγματα

$$Y_1, \dots, Y_n \sim N(\theta, 1)$$

$$p(\theta) = \frac{1}{\pi(1 + \theta^2)}$$

$$p(\theta | \mathbf{y}) \propto \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \theta)^2}{2} \right\} \times \frac{1}{1 + \theta^2}$$

$$\propto \exp \left\{ -\frac{n(\theta - \bar{y})^2}{2} \right\} \times \frac{1}{1 + \theta^2}$$

Παραδείγματα

$$Y_1, \dots, Y_n \sim N(\mu, \sigma^2)$$

$$p(\mu, \sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^2}$$

$$p(\theta | \mathbf{y}) \propto \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\} \times \left(\frac{1}{\sigma^2} \right)^{\frac{n}{2}+1}$$

Εισαγωγή

Παρατηρούμε από τα δύο προηγούμενα παραδείγματα ότι ο πλήρης υπολογισμός της εκ των υστέρων κατανομής είναι δύσκολος σε κάποιες περιπτώσεις. Το πρόβλημα γίνεται ακόμα πιο περίπλοκο αν η παράμετρος είναι πολυδιάστατη.

Λύσεις:

- Συζυγείς εκ των προτέρων (conjugate priors).
- Ασυμπτωτικές Προσεγγίσεις.
- MCMC.

Εισαγωγή

MCMC

- 1949 Metropolis –Ulam (αρχική ιδέα).
- 1954 Metropolis et al. (Metropolis Algorithm).
- 1970 Hastings (Metropolis – Hastings Algorithm).
- 1984 Geman & Geman (Gibbs Sampling).
- 1990 Gelfand & Smith (Εφαρμογή MCMC σε Μπεϋζιανή Στατιστική).
- 1995 Green (Reversible Jump MCMC).

Εισαγωγή

- **ΙΔΕΑ**

Ότι θέλεις να μάθεις για μια κατανομή μπορεί να επιτευχθεί απλά **προσομοιώνοντας** τυχαίες τιμές από αυτή (Metropolis – Ulam 1949).

Monte Carlo Εκτιμητές

Ας υποθέσουμε ότι ενδιαφερόμαστε για την $p(\theta | y)$ την οποία δεν μπορούμε να υπολογίσουμε αναλυτικά και ας υποθέσουμε χάριν ευκολίας ότι το θ είναι μονοδιάστατο. Στην Μπεϋζιανή συμπερασματολογία συνήθως ενδιαφερόμαστε για διάφορα “χαρακτηριστικά” της εκ των υστέρων κατανομής όπως:

Monte Carlo Εκτιμητές

- Μέσος $\mu = E(\theta | \mathbf{y})$.
- Τυπική Απόκλιση $\sigma = \sqrt{V(\theta | \mathbf{y})}$.
- Γράφημα.
- Τεταρτημόρια (π.χ. για την κατασκευή ενός 95% εκ των υστέρων διάστημα εμπιστοσύνης για το θ πρέπει να γνωρίζεις τα 2.5% και 97.5% τεταρτημόρια της εκ των υστέρων κατανομής).

Ας υποθέσουμε ότι με κάποιον τρόπο προσομοιώσαμε τιμές $\theta_1^*, \dots, \theta_m^*$ από την $p(\theta | \mathbf{y})$. Τότε μπορούμε εύκολα να εκτιμήσουμε όλα τα παραπάνω:

Monte Carlo Εκτιμητές

- Μέσος $\hat{\mu} = \hat{E}(\theta | \mathbf{y}) = \bar{\theta}^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \theta_i^*$.
- Τυπική Απόκλιση $\hat{\sigma} = \sqrt{\hat{V}(\theta | \mathbf{y})} = \sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\theta_i^* - \bar{\theta}^*)^2}$.
- Γράφημα \longrightarrow Ιστογράμμα των θ_i^* .
- Τεταρτημόρια \longrightarrow Μετράμε πόσες από τις τιμές των θ_i^* είναι μικρότερες από μια σειρά καθορισμένων τιμών, π.χ. για να εκτιμήσουμε το 2.5% τεταρτημόριο, λύνουμε ως προς t την εξίσωση

$$\hat{F}_{\theta}(t) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m I(\theta_i^* \leq t) = 0.025, \quad I: \text{δείκτρια συνάρτηση.}$$

Monte Carlo Εκτιμητές

Αποδεικνύεται ότι για μεγάλο m , οι συγκεκριμένες **Monte Carlo εκτιμήτριες**, συγκλίνουν στην θ^* ως προς εκτίμηση ποσότητα με αρκετά μεγάλη πιθανότητα, υπό την προϋπόθεση το δείγμα των θ_i^* να είναι τυχαίο. Ένας τρόπος επιλογής τέτοιου δείγματος είναι τα θ_i^* να είναι ανεξάρτητα και ισόνομα (IID), αλλά όπως τελικά θα δούμε παρακάτω αυτό δεν είναι αναγκαίο.

Monte Carlo Εκτιμητές

Αν για παράδειγμα $\bar{\theta}^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \theta_i^*$ προέρχεται από IID δείγμα μεγέθους m από την $p(\theta | \mathbf{y})$ τότε χρησιμοποιώντας κλασική στατιστική έχουμε ότι $V(\bar{\theta}^*) = \sigma^2 / m$ με σ^2 η διασπορά της $p(\theta | \mathbf{y})$.

Άρα μπορούμε να δημιουργήσουμε ένα Monte Carlo τυπικό σφάλμα για το $\bar{\theta}^*$

$$\widehat{SE}(\hat{\theta}^*) = \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{m}} \longrightarrow$$

Χρησιμοποιείται συνήθως για να αποφασίσουμε πόσο μεγάλο πρέπει να είναι το m

IID Παράδειγμα

Έστω η εκ των υστέρων κατανομή

$$p(\lambda | \mathbf{y}) = \Gamma(29.001, 14.001)$$

Τότε $\mu = E(\lambda | \mathbf{y}) = 29.001 / 14.001 = 2.071$

Ας δούμε πόσο καλά εκτιμά αυτή την ποσότητα ο Monte Carlo εκτιμητής

IID Παράδειγμα

```
gamma.sim<- function(m,alpha,beta,n.sim,seed) {  
  set.seed(seed)  
  theta.out <- matrix(0,n.sim,2)  
  for(i in 1:n.sim) {  
    theta.sample<-rgamma(m,alpha,beta)  
    theta.out[i,1]<-mean(theta.sample)  
    theta.out[i,2]<-sqrt(var(theta.sample)/m)  
  }  
  return(theta.out)  
}
```

IID Παράδειγμα

- Η παραπάνω R συνάρτηση προσομοιώνει (n.sim φορές) m τυχαίες τιμές, ανεξάρτητες και ισόνομες από την κατανομή $\Gamma(a,\beta)$ και επιστρέφει τον μέσο τους μαζί με το τυπικό σφάλμα.

IID Παράδειγμα

```
> m <- 1000
```

```
> alpha <- 29.001
```

```
> beta <- 14.001
```

```
> n.sim <- 500
```

```
> seed <- c( 6425451, 9626954 )
```

IID Παράδειγμα

```
> theta.out <- gamma.sim( m, alpha, beta, n.sim, seed )  
  
# This took about 1 second at 550 Unix MHz.  
  
> theta.out[ 1:10, ]  
  
          [,1]      [,2]  
[1,] 2.082105 0.01166379  
[2,] 2.072183 0.01200723  
[3,] 2.066756 0.01247277  
[4,] 2.060785 0.01200449  
[5,] 2.078591 0.01212440  
[6,] 2.050640 0.01228875  
[7,] 2.071706 0.01182579  
[8,] 2.063158 0.01176577  
[9,] 2.058440 0.01186379  
[10,] 2.068976 0.01220723
```

Άρα οι τιμές του δειγματικού μέσου είναι πολύ κοντά στις πραγματικές τιμές συν-πλην περίπου 0.012 που είναι επίσης πολύ κοντά στο πραγματικό τυπικό σφάλμα $\sigma / \sqrt{m} = \sqrt{\alpha} / \beta \sqrt{m} = 0.01216$.