

EST-46115: Modelación Bayesiana

Profesor: Alfredo Garbuno Iñigo — Primavera, 2022 — Introducción a Stan.

Objetivo. Un primer acercamiento a **Stan**, sintaxis, manipulación de objetos y visualizaciones sencillas. Además un caso de estudio donde empezaremos a ver ciertos errores en el ajuste de los modelos.

Lectura recomendada: Sección 6.2.1 de [5].

1. INTRODUCCIÓN

Veremos ejemplos sencillos sobre la sintaxis de **Stan** ([2]) con el cual simularemos realizaciones de parámetros **no observables** para los cuales tenemos un **estado de conocimiento** reflejado en la distribución posterior.

Habíamos visto que los *bayesics* son los componentes:

1. Un conjunto de datos.
2. Supuestos del proceso generador de datos.
3. Conocimiento previo sobre los componentes que rigen el modelo.

Para **Stan** tenemos que seguir algo muy similar. Es decir,

1. Definir el modelo.
2. Ingestar los datos.
3. Darle *play* al botón de inferencia.

Un modelo de **Stan** se escribe en un archivo de texto y es una secuencia de bloques con nombre. En general el esqueleto es como sigue:

```
1 functions {
2     // ... function declarations and definitions ...
3 }
4 data {
5     // ... declarations ...
6 }
7 transformed data {
8     // ... declarations ... statements ...
9 }
10 parameters {
11     // ... declarations ...
12 }
13 transformed parameters {
14     // ... declarations ... statements ...
15 }
16 model {
17     // ... declarations ... statements ...
18 }
19 generated quantities {
20     // ... declarations ... statements ...
21 }
```

LISTING 1. Estructura de un modelo de *Stan*.

En general todos los bloques son opcionales, y **no es necesario** tener todos para compilar un modelo. Para mas información puedes consultar [la guía de Stan](#).

1.1. Estructura del código

Consideremos el modelo Beta-Binomial que hemos trabajado antes.

- Un bloque `data`. Por ejemplo, Y el número observado de éxitos en 10 pruebas.
- Un bloque `parameters`. Por ejemplo, θ la tasa de éxito en la realización de las pruebas.
- Un bloque `model`. Por ejemplo, $Y \sim \text{Binomial}(10, \theta)$ y $\theta \sim \text{Beta}(2, 2)$.

El código es:

```

1 data {
2   int<lower = 0, upper = 10> Y;
3 }
4 parameters {
5   real<lower = 0, upper = 1> theta;
6 }
7 model {
8   Y ~ binomial(10, theta);
9   theta ~ beta(2, 2);
10 }
```

```

1 ## Modelo Beta-Binomial
  -----
2 modelos_files <- "modelos/compilados/tutorial"
3 ruta <- file.path("modelos/tutorial/beta-binomial.stan")
4 modelo <- cmdstan_model(ruta, dir = modelos_files)
```

LISTING 2. Código necesario para interactuar con Stan desde R.

Para leer mas sobre la herramienta y sus interacción desde línea de comandos puedes consultar la [documentación de Stan](#).

1.1.1. Interacción con ejecutable La instrucción `cmdstan_model` compila el modelo y crea un **ejecutable** con el cual podemos interactuar desde **terminal**. Los datos del modelo los guardamos en un JSON

```

1 {
2   "Y" : 7
3 }
```

Tenemos un ejecutable:

```
1 ls modelos/compilados/tutorial
```

```

1 Permissions Size User Date Modified Git Name
2 .rwxr-xr-x 1.6M user  1 Mar 11:09 -I beta-binomial*
```

Con el cual podemos interactuar por medio de

```
1 ./beta-binomial sample data file=../../tutorial/datos-bb.json
```

```

1 method = sample (Default)
2   sample
3     num_samples = 1000 (Default)
4     num_warmup = 1000 (Default)
5     save_warmup = 0 (Default)
6     thin = 1 (Default)
7     adapt
8       engaged = 1 (Default)
9       gamma = 0.050000000000000003 (Default)
10      delta = 0.800000000000000004 (Default)
11      kappa = 0.75 (Default)
12      t0 = 10 (Default)
13      init_buffer = 75 (Default)
14      term_buffer = 50 (Default)
15      window = 25 (Default)
16      algorithm = hmc (Default)
17      hmc
18        engine = nuts (Default)
19        nuts
20          max_depth = 10 (Default)
21          metric = diag_e (Default)
22          metric_file = (Default)
23          stepsize = 1 (Default)
24          stepsize_jitter = 0 (Default)
25      num_chains = 1 (Default)
26 id = 1 (Default)
27 data
28   file = ../../tutorial/datos-bb.json
29 init = 2 (Default)
30 random
31   seed = 2774886018 (Default)
32 output
33   file = output.csv (Default)
34   diagnostic_file = (Default)
35   refresh = 100 (Default)
36   sig_figs = -1 (Default)
37   profile_file = profile.csv (Default)
38 num_threads = 1 (Default)
39
40
41 Gradient evaluation took 6e-06 seconds
42 1000 transitions using 10 leapfrog steps per transition would take 0.06
   seconds.
43 Adjust your expectations accordingly!
44
45
46 Iteration:    1 / 2000 [  0%] (Warmup)
47 Iteration:   100 / 2000 [  5%] (Warmup)
48 Iteration:   200 / 2000 [ 10%] (Warmup)
49 Iteration:   300 / 2000 [ 15%] (Warmup)
50 Iteration:   400 / 2000 [ 20%] (Warmup)
51 Iteration:   500 / 2000 [ 25%] (Warmup)
52 Iteration:   600 / 2000 [ 30%] (Warmup)
53 Iteration:   700 / 2000 [ 35%] (Warmup)
54 Iteration:   800 / 2000 [ 40%] (Warmup)
55 Iteration:   900 / 2000 [ 45%] (Warmup)
56 Iteration:  1000 / 2000 [ 50%] (Warmup)
57 Iteration:  1001 / 2000 [ 50%] (Sampling)
58 Iteration:  1100 / 2000 [ 55%] (Sampling)

```

```

59 Iteration: 1200 / 2000 [ 60%] (Sampling)
60 Iteration: 1300 / 2000 [ 65%] (Sampling)
61 Iteration: 1400 / 2000 [ 70%] (Sampling)
62 Iteration: 1500 / 2000 [ 75%] (Sampling)
63 Iteration: 1600 / 2000 [ 80%] (Sampling)
64 Iteration: 1700 / 2000 [ 85%] (Sampling)
65 Iteration: 1800 / 2000 [ 90%] (Sampling)
66 Iteration: 1900 / 2000 [ 95%] (Sampling)
67 Iteration: 2000 / 2000 [100%] (Sampling)
68
69 Elapsed Time: 0.005 seconds (Warm-up)
70               0.012 seconds (Sampling)
71               0.017 seconds (Total)

```

1.1.2. *Interacción desde R* Nota que el objeto `modelo` es parte de una clase (OOB):

```
1 class(modelo)
```

```
1 [1] "CmdStanModel" "R6"
```

LISTING 3. Tipo de objeto que regresa la compilación del modelo.

Con esto tenemos un **objeto** (OOP) con distintos **métodos** que podemos utilizar. Puedes consultar [aquí](#) los métodos disponibles de dichos objetos.

Stan code		Compilation	
Method	Description	Method	Description
<code>\$stan_file()</code>	Return the file path to the Stan program.	<code>\$compile()</code>	Compile Stan program.
<code>\$code()</code>	Return Stan program as a string.	<code>\$exe_file()</code>	Return the file path to the compiled executable.
<code>\$print()</code>	Print readable version of Stan program.	<code>\$hpp_file()</code>	Return the file path to the .hpp file containing the generated C++ code.
<code>\$check_syntax()</code>	Check Stan syntax without having to compile.	<code>\$save_hpp_file()</code>	Save the .hpp file containing the generated C++ code.
Model fitting			
Method	Description		
<code>\$sample()</code>	Run CmdStan's "sample" method, return <code>CmdStanMCMC</code> object.		
<code>\$sample_mpi()</code>	Run CmdStan's "sample" method with <code>MPI</code> , return <code>CmdStanMCMC</code> object.		
<code>\$optimize()</code>	Run CmdStan's "optimize" method, return <code>CmdStanMLE</code> object.		
<code>\$variational()</code>	Run CmdStan's "variational" method, return <code>CmdStanVB</code> object.		
<code>\$generate_quantities()</code>	Run CmdStan's "generate quantities" method, return <code>CmdStanGQ</code> object.		

FIGURA 1. Métodos de objetos de la clase `CmdStanModel`.

Por ejemplo, tenemos un método que puede generar muestras del **modelo** probabilístico que se definió en el bloque de modelo.

Necesitamos los datos en un formato muy especial (una lista):

```
1 data.list ← list(Y = 7)
```

La interacción desde R con Stan necesita los datos ordenados en listas con nombres. En Python éstos son diccionarios. Ambos, generalizan a archivos en formato JSON.

Vamos a darle *play* al botón de la máquina bayesiana:

```
1 muestras <- modelo$sample(data = data.list,
2                             chains = 1,
3                             iter=1500,
4                             iter_warmup=500,
5                             seed=483892929,
6                             refresh=500)
```

```
1 Running MCMC with 1 chain...
2
3 Chain 1 Iteration:    1 / 2000 [  0%] (Warmup)
4 Chain 1 Iteration:   500 / 2000 [ 25%] (Warmup)
5 Chain 1 Iteration:   501 / 2000 [ 25%] (Sampling)
6 Chain 1 Iteration:  1000 / 2000 [ 50%] (Sampling)
7 Chain 1 Iteration:  1500 / 2000 [ 75%] (Sampling)
8 Chain 1 Iteration:  2000 / 2000 [100%] (Sampling)
9 Chain 1 finished in 0.0 seconds.
```

LISTING 4. Resultados de muestreo.

El resultado es otro objeto:

```
1 class(muestras)
```

```
1 [1] "CmdStanMCMC" "CmdStanFit" "R6"
```

LISTING 5. Tipo de objeto que regresa la compilación del modelo.

Donde se pueden explorar los métodos de estos objetos en [la documentación](#).

1.2. Visualizaciones

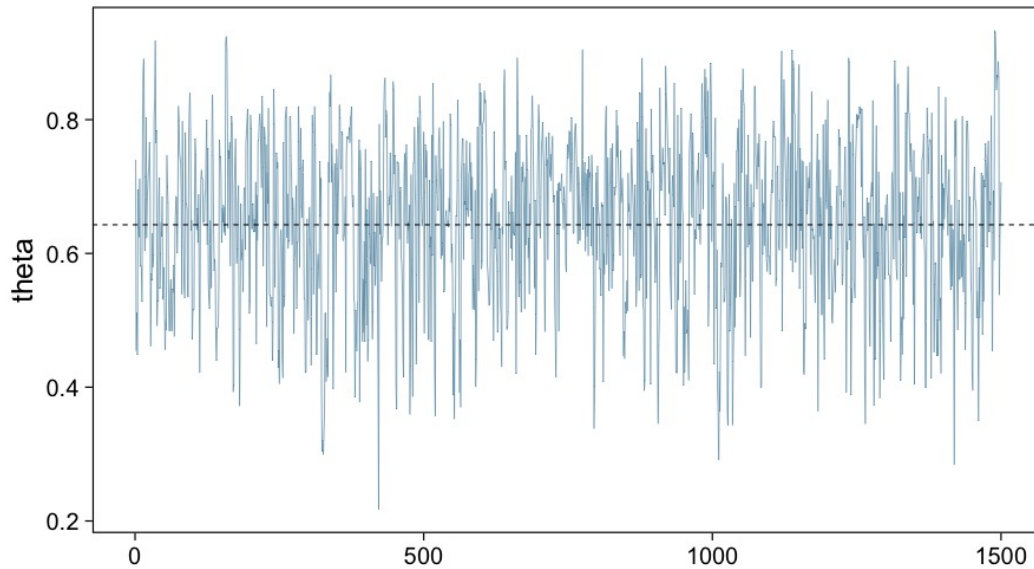
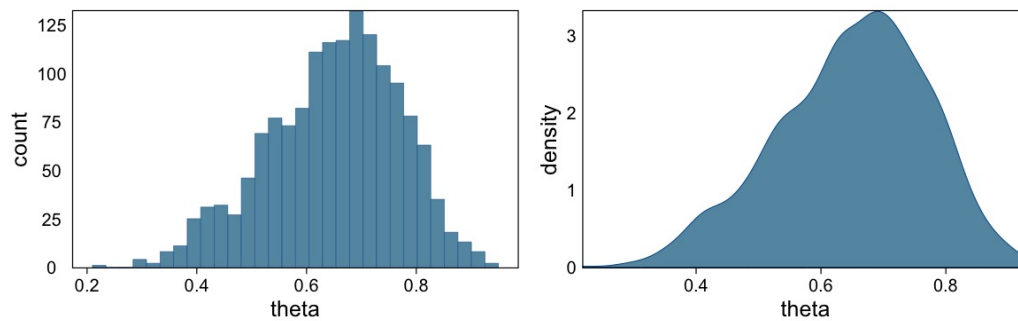
Podemos graficar trayectorias

Nota: tuvimos que definir qué parámetros queremos en la visualización. Por *default* incluye un misterioso `lp_` que hace referencia a la evaluación de la log-posterior para cada elemento de la simulación. Adicional, nota (en el código fuente) que la sintaxis para el gráfico utiliza la gramática y las funciones de `ggplot2`.

1.3. Modelos conjugados

Se puede aprovechar que el modelo Beta-Binomial es un modelo conjugado. De tal forma que podemos escribirlo

```
1 data {
2   int<lower = 0, upper = 10> Y;
3 }
4 generated quantities {
5   real<lower=0, upper=1> theta;
6   theta = beta_rng(Y + 2, 10 - Y + 2);
7 }
```

FIGURA 2. Trazas (trayectorias) del componente θ en el modelo Beta-Binomial.FIGURA 3. Histogramas del componente θ en el modelo Beta-Binomial.

```

1  ## Modelo BetaBinomial Conjugado
   -----
2  modelos_files <- "modelos/compilados/tutorial"
3  ruta <- file.path("modelos/tutorial/beta-binomial-conjugado.stan")
4  modelo <- cmdstan_model(ruta, dir = modelos_files)

```

```

1  muestras <- modelo$sample(data = data.list,
2                             chains = 1,
3                             iter = 1500,
4                             iter_warmup = 500,
5                             seed = 10101,
6                             refresh = 500,
7                             fixed_param = TRUE)

```

```

1  Running MCMC with 1 chain...
2
3  Chain 1 Iteration:    1 / 1500 [ 0%] (Sampling)

```

```

4 Chain 1 Iteration: 500 / 1500 [ 33%] (Sampling)
5 Chain 1 Iteration: 1000 / 1500 [ 66%] (Sampling)
6 Chain 1 Iteration: 1500 / 1500 [100%] (Sampling)
7 Chain 1 finished in 0.0 seconds.

```

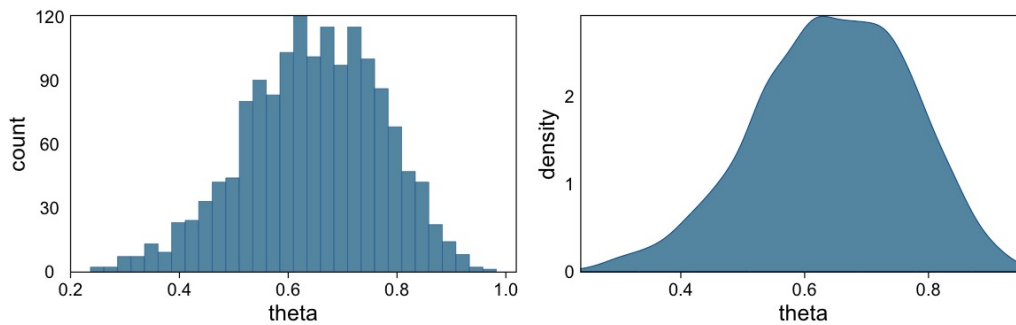


FIGURA 4. Histogramas del componente θ en el modelo Beta-Binomial.

1.3.1. Tarea (1) ¿Cómo utilizarías Stan para generar números aleatorios de:

1. la distribución previa;
2. la distribución predictiva posterior?

Utiliza el ejemplo Beta-Binomial de arriba para ponerlo en práctica. *Hint*: revisa la documentación del bloque `generated quantities`.

1.3.2. Tarea (2) Repite lo anterior para un modelo Poisson-Gamma. Es decir, para una colección de observaciones $(Y_1, Y_2) = (2, 9)$ donde suponemos que $Y_j \stackrel{\text{iid}}{\sim} \text{Poisson}(\lambda)$ y $\lambda \sim \text{Exponencial}(3)$.

Hints: Revisa la documentación para definir vectores (en este caso de longitud 2) en el bloque de datos.

1.3.3. Tarea (3) Utiliza el ambiente de Stan para encontrar el estimador de Máxima verosimilitud de los dos problemas que hemos trabajado. Es decir, el caso Beta-Binomial y Poisson-Gamma.

2. CASO: ESCUELAS

Utilizaremos los datos de un estudio de desempeño de 8 escuelas ([3, 8]). Los datos consisten en el puntaje promedio de cada escuela y y los errores estándar reportados σ la dispersión de los resultados de dicha prueba.

```

1 ## Caso: escuelas
2 -----
3 data <- tibble( id = factor(seq(1, 8)),
4                 y = c(28, 8, -3, 7, -1, 1, 18, 12),
5                 sigma = c(15, 10, 16, 11, 9, 11, 10, 18))

```

En este caso se utiliza un modelo normal para los resultados de cada escuela

$$y_j \sim N(\theta_j, \sigma_j), \quad j = 1, \dots, J, \quad (1)$$

donde $J = 8$, y θ_j representa el promedio de los alumnos de escuela que no observamos pero del cual tenemos un estimador y_j .

Nota que tenemos J valores distintos para θ_j y σ_j . Dado que esperamos que las escuelas provengan de la misma población de escuelas asumimos que

$$\theta_j \sim N(\mu, \tau), \quad j = 1, \dots, J,$$

donde μ representa la media poblacional (el promedio en el sistema escolar) y τ la desviación estándar alrededor de este valor.

Representamos nuestra incertidumbre en estos dos valores por medio de

$$\mu \sim N(0, 5), \quad \tau \sim \text{Half-Cauchy}(0, 5),$$

lo cual representa información poco precisa de estos valores poblacionales.

3. PRIMER MODELO EN STAN

La forma en que escribimos el modelo en Stan es de manera generativa (*bottom up*):

$$\mu \sim N(0, 5), \quad (2a)$$

$$\tau \sim \text{Half-Cauchy}(0, 5), \quad (2b)$$

$$\theta_j \sim N(\mu, \tau), \quad j = 1, \dots, J, \quad (2c)$$

$$y_j \sim N(\theta_j, \sigma_j), \quad j = 1, \dots, J. \quad (2d)$$

```

1 data {
2   int<lower=0> J;
3   array[J] real y;
4   array[J] real<lower=0> sigma;
5 }
6 parameters {
7   real mu;
8   real<lower=0> tau;
9   array[J] real theta;
10 }
11 model {
12   mu ~ normal(0, 5);
13   tau ~ cauchy(0, 5);
14   theta ~ normal(mu, tau);
15   y ~ normal(theta, sigma);
16 }
```

LISTING 6. Código del modelo para el desempeño de las escuelas.

Nota que `sigma` está definida como *parte del conjunto de datos* que el usuario debe de proveer. Aunque es un parámetro en nuestro modelo (verosimilitud) no está sujeto al proceso de inferencia. Por otro lado, nota que la declaración no se hace de manera componente por componente, sino de forma **vectorizada**.

Una vez escrito nuestro modelo, lo podemos compilar utilizando la librería de `cmdstanr`, que es la interface con Stan desde R.

```

1 modelos_files <- "modelos/compilados/caso-escuelas"
2 ruta <- file.path("modelos/caso-escuelas/modelo-escuelas.stan")
3 modelo <- cmdstan_model(ruta, dir = modelos_files)
```


Los datos que necesita el bloque `data` se pasan como una *lista con nombres*.

```
1 data_list <- c(data, J = 8)
```

3.1. Simulación

Contra todas las recomendaciones usuales, corramos sólo una cadena corta:

```
1 muestras <- modelo$sample(data = data_list,
2                             chains = 1,
3                             iter=700,
4                             iter_warmup=500,
5                             seed=483892929,
6                             refresh=1200)
```

```
1 Running MCMC with 1 chain...
2
3 Chain 1 Iteration:    1 / 1200 [ 0%] (Warmup)
4 Chain 1 Iteration:   501 / 1200 [ 41%] (Sampling)
5 Chain 1 Iteration:  1200 / 1200 [100%] (Sampling)
6 Chain 1 finished in 0.1 seconds.
7 Warning: 53 of 700 (8.0%) transitions ended with a divergence.
8 See https://mc-stan.org/misc/warnings for details.
9
10 Warning: 1 of 1 chains had an E-BFMI less than 0.2.
11 See https://mc-stan.org/misc/warnings for details.
```

LISTING 7. Resultados del muestreador en el modelo.

El muestreador en automático nos regresa ciertas alertas las cuales podemos inspeccionar más a fondo con el siguiente comando:

```
1 muestras$cmdstan_diagnose()
```

```
1 Processing csv files: /var/folders/lk/4hdvzkhx269df8zc5xmkqgwr0000gn/T/
   RtmpSCHD1Q/modelo-escuelas-202303011628-1-1b033f.csv
2
3 Checking sampler transitions treedepth.
4 Treedepth satisfactory for all transitions.
5
6 Checking sampler transitions for divergences.
7 53 of 700 (7.57%) transitions ended with a divergence.
8 These divergent transitions indicate that HMC is not fully able to explore the
   posterior distribution.
9 Try increasing adapt delta closer to 1.
10 If this doesn't remove all divergences, try to reparameterize the model.
11
12 Checking E-BFMI of sampler transitions HMC potential energy.
13 The E-BFMI, 0.16, is below the nominal threshold of 0.30 which suggests that
   HMC may have trouble exploring the target distribution.
14 If possible, try to reparameterize the model.
15
16 Effective sample size satisfactory.
17
18 The following parameters had split R-hat greater than 1.05:
```

```

19  tau, theta[1], theta[7]
20  Such high values indicate incomplete mixing and biased estimation.
21  You should consider regularizing your model with additional prior
    information or a more effective parameterization.
22
23  Processing complete.

```

LISTING 8. Diagnósticos y resumen.

Notamos que parece ser que tenemos varias transiciones divergentes, algunos parámetros tienen una \hat{R} tienen un valor que excede la referencia de 1.1 (lo veremos más adelante), y parece ser que los estadísticos de energía también presentan problemas.

Podemos inspeccionar el resultado de las simulaciones utilizando:

```

1  muestras$cmdstan_summary()

```

```

1  Inference for Stan model: modelo_escuelas_model
2  1 chains: each with iter=(700); warmup=(0); thin=(1); 700 iterations saved.
3
4  Warmup took 0.030 seconds
5  Sampling took 0.043 seconds
6
7           Mean      MCSE   StdDev      5%      50%      95%    N_Eff  N_Eff
8           /s      R_hat
9  lp__          -12        2.0       8.0      -25      -12      0.36      16
10     382          1.1
11  accept_stat__ 0.76    1.1e-01   3.7e-01  4.6e-16   0.98     1.00   1.1e+01  2.5e
12     +02    1.1e+00
13  stepsize__    0.086      nan   2.8e-17  8.6e-02   0.086   0.086      nan
14     nan      nan
15  treedepth__   3.9    4.1e-01   1.5e+00  1.0e+00   4.0      6.0   1.3e+01  3.1e
16     +02    1.1e+00
17  n_leapfrog__  28    4.2e+00   2.3e+01  3.0e+00   19      63   3.0e+01  6.9e
18     +02    1.1e+00
19  divergent__   0.076   6.0e-02   2.6e-01  0.0e+00   0.00     1.0   1.9e+01  4.5e
20     +02    1.1e+00
21  energy__      17    2.0e+00   8.5e+00  4.0e+00   17      30   1.7e+01  4.1e
22     +02    1.1e+00
23
24  mu            4.0      0.47      3.5     -1.7      3.4      9.7      55
25     1283          1.0
26  tau            2.9      0.55      3.0      0.32      1.7      8.9      30
27     688          1.1
28  theta[1]       5.4      0.60      5.1     -1.6      4.0      15      74
29     1719          1.1
30  theta[2]       4.4      0.56      4.8     -2.6      3.4      12      72
31     1674          1.0
32  theta[3]       3.4      0.47      5.4     -5.1      3.3      11     130
33     3028          1.0
34  theta[4]       4.1      0.54      4.9     -3.6      3.4      12      82
35     1914          1.0
36  theta[5]       3.5      0.46      4.4     -4.1      3.2      11      92
37     2143          1.0
38  theta[6]       3.7      0.49      4.8     -4.7      3.6      11      99
39     2296          1.00
40  theta[7]       5.4      0.59      4.9     -1.2      4.2      14      68
41     1586          1.1

```

```

26 theta[8]      4.5      0.53      4.9      -3.0      3.6      12      85
    1976      1.0
27
28 Samples were drawn using hmc with nuts.
29 For each parameter, N_Eff is a crude measure of effective sample size,
30 and R_hat is the potential scale reduction factor on split chains (at
31 convergence, R_hat=1).

```

LISTING 9. Resumen utilizando los métodos de CmdStanModel.

Donde además de los resúmenes usuales para nuestros parámetros de interés encontramos resúmenes internos del simulador (los veremos mas adelante).

3.2. Alternativas: Rstan

Podemos utilizar las funciones de RStan (otra interfase con Stan desde R) para visualizar los resúmenes de manera alternativa.

```

1 ## Ejemplo de código utilizando Rstan
2 stanfit <- rstan::read_stan_csv(muestras$output_files())
3 stanfit

```

```

1 Inference for Stan model: modelo-escuelas-202202231948-1-817561.
2 1 chains, each with iter=1200; warmup=500; thin=1;
3 post-warmup draws per chain=700, total post-warmup draws=700.
4
5      mean se_mean sd  2.5%  25%  50%  75% 97.5% n_eff Rhat
6 mu      4.0    0.47 3.5  -2.42  1.66  3.4  6.6  11.1   55  1.0
7 tau     2.9    0.55 3.0   0.32  0.59  1.6  4.3  11.1   29  1.1
8 theta[1] 5.4    0.60 5.1  -3.50  2.50  4.0  8.4  17.2   73  1.1
9 theta[2] 4.4    0.57 4.8  -3.99  1.62  3.4  7.5  14.3   71  1.0
10 theta[3] 3.4    0.48 5.4  -8.36  0.83  3.3  6.7  14.5  129  1.0
11 theta[4] 4.1    0.54 4.9  -5.79  1.39  3.4  7.3  13.6   82  1.0
12 theta[5] 3.5    0.46 4.4  -6.08  1.16  3.2  6.6  11.8   91  1.0
13 theta[6] 3.7    0.49 4.8  -6.97  1.04  3.6  7.0  12.7   98  1.0
14 theta[7] 5.4    0.59 4.9  -2.64  2.65  4.1  8.1  16.7   67  1.1
15 theta[8] 4.5    0.53 4.9  -4.63  1.84  3.6  7.6  14.5   84  1.0
16 lp__    -11.6    2.01 8.0 -25.98 -18.30 -11.9 -3.8   1.4   16  1.1
17
18 Samples were drawn using NUTS(diag_e) at Wed Feb 23 19:48:39 2022.
19 For each parameter, n_eff is a crude measure of effective sample size,
20 and Rhat is the potential scale reduction factor on split chains (at
21 convergence, Rhat=1).

```

LISTING 10. Resumen obtenido con librería de Rstan.

3.3. Consulta de resultados de muestreo

En caso de necesitarlo podemos extraer las muestras en una tabla para poder procesarlas y generar visualizaciones. Por ejemplo, un gráfico de traza con τ que es el parámetro donde más problemas parecemos tener.

Claramente no podemos afirmar que el muestreador está explorando bien la posterior. Hay correlaciones muy altas. Si usáramos la media acumulada no seríamos capaces de diagnosticar estos problemas.

Utilizar gráficos de dispersión bivariados nos ayuda a identificar mejor el problema. En color salmón apuntamos las muestras con transiciones *divergentes* (mas adelante lo explicaremos).

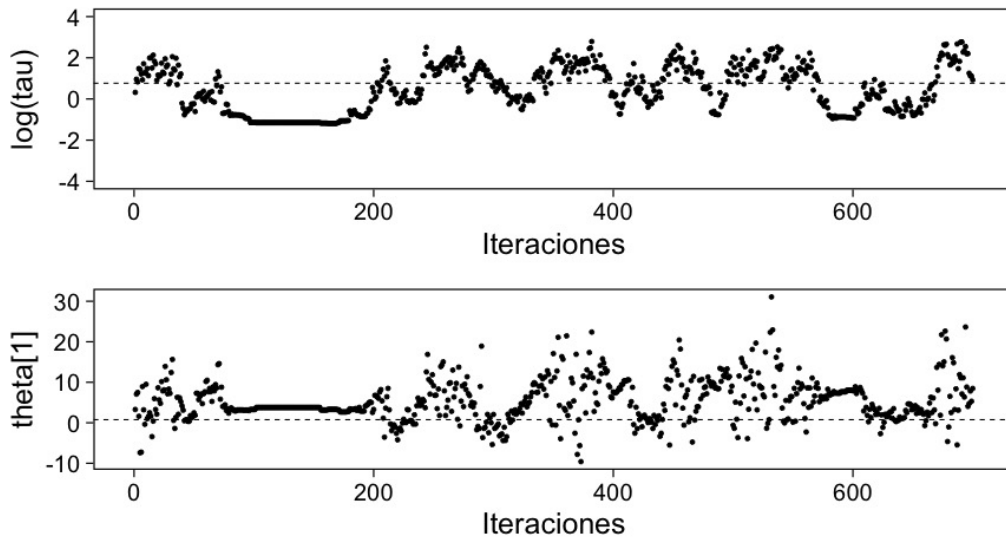


FIGURA 5. Trayectorías de las muestras del modelo para los componentes $\log \tau$ y θ_1 .

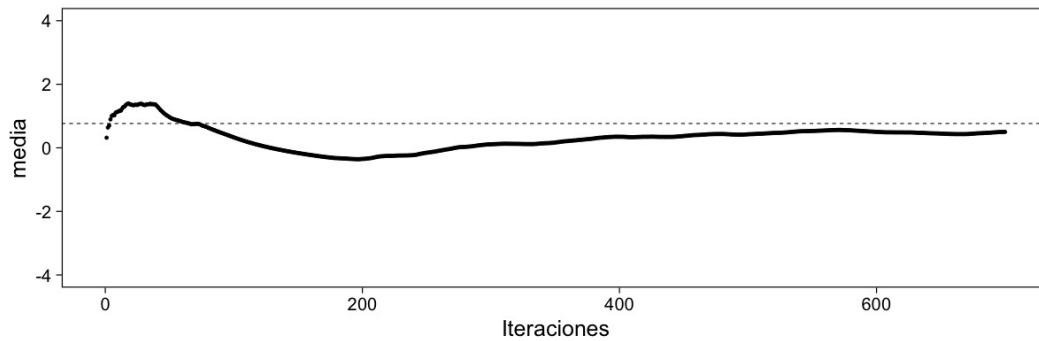


FIGURA 6. Media acumulada de $\log \tau$.

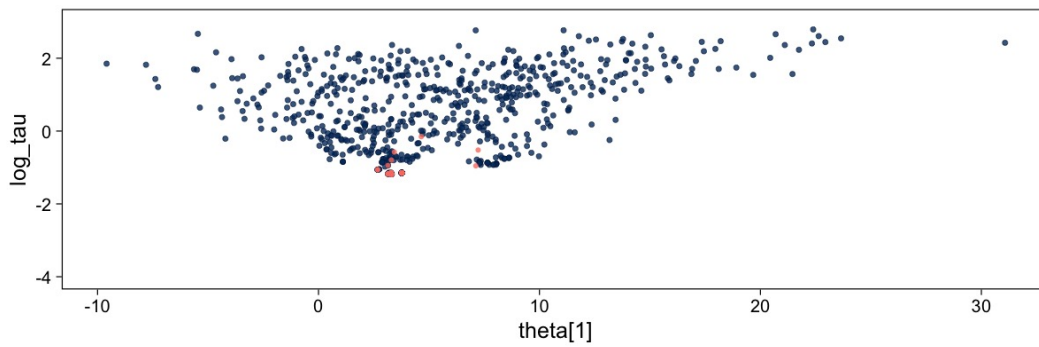


FIGURA 7. Gráfico de dispersión. Muestras en color salmón representan simulaciones problemáticas.

Otra visualización muy conocida es la de coordenadas paralelas. En este tipo de gráficos podemos observar de manera simultánea ciertos patrones en todos los componentes.

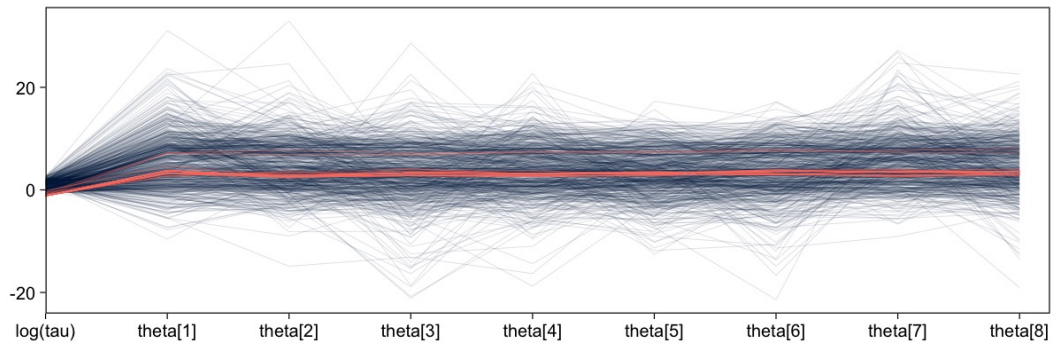


FIGURA 8. Gráfico de coordenadas paralelas. Permiten conectar los distintos componentes de un vector. Color salmón representa simulaciones problemáticas.

Y por último, también podemos explorar la autocorrelación de la cadena.

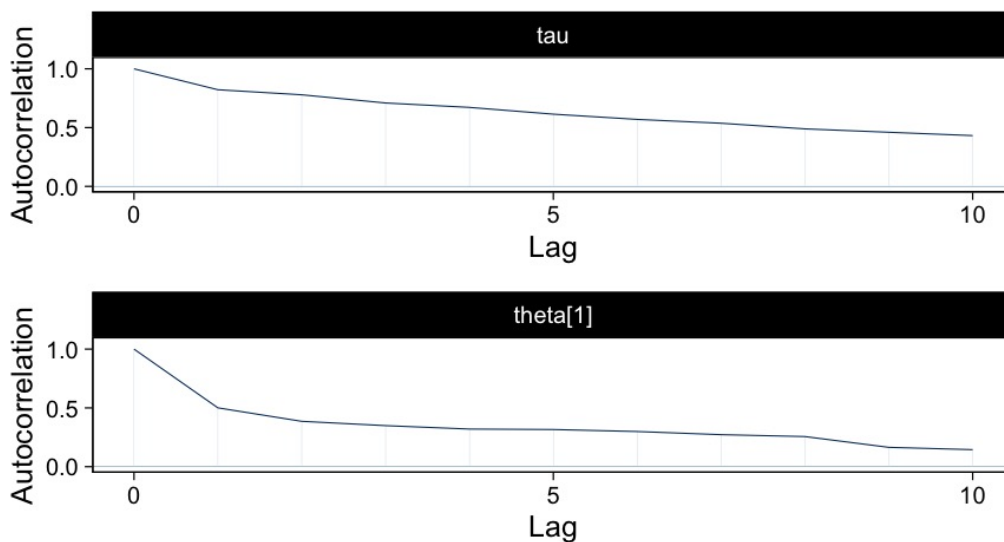


FIGURA 9. Autocorrelaciones en las simulaciones.

3.4. Generando mas simulaciones

Hasta ahora los resultados parecen no ser buenos. Tenemos muestras con transiciones *divergentes* y una *correlación muy alta* entre las muestras. Podríamos aumentar el número de simulaciones con la esperanza que esto permita una mejor exploración de la posterior:

```
1 muestras <- modelo$sample(data      = data_list,
2                               chains   = 1,
3                               iter     = 5000,
4                               iter_warmup = 5000,
5                               seed     = 483892929,
6                               refresh  = 10000)
```

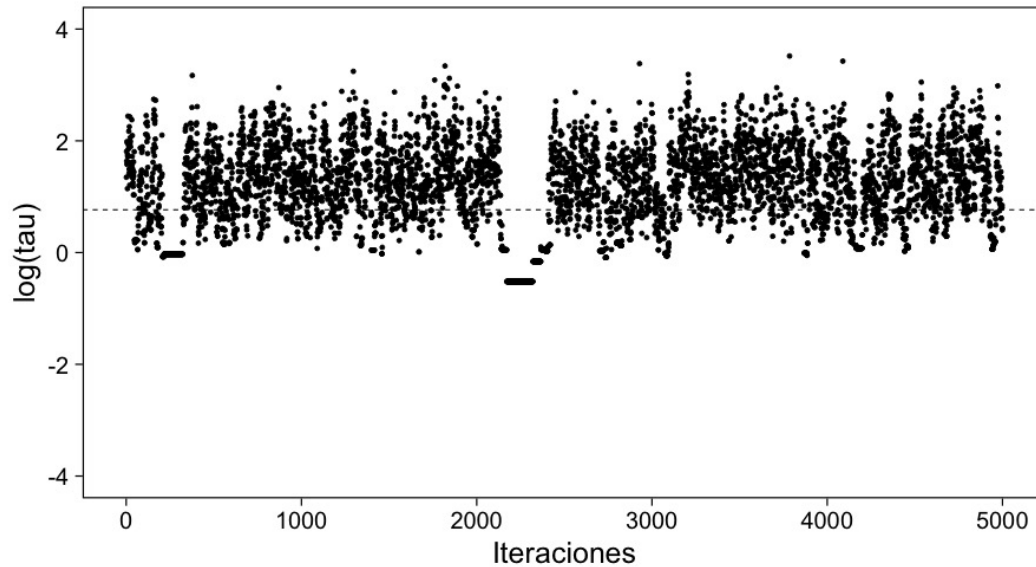


FIGURA 10. Trayectorías de simulaciones.

Como vemos, seguimos teniendo problemas con la exploración del espacio parametral (donde está definida nuestra distribución de θ) y tenemos dificultades en explorar esa zona con τ pequeña. Esto lo confirmamos en la siguiente gráfica.

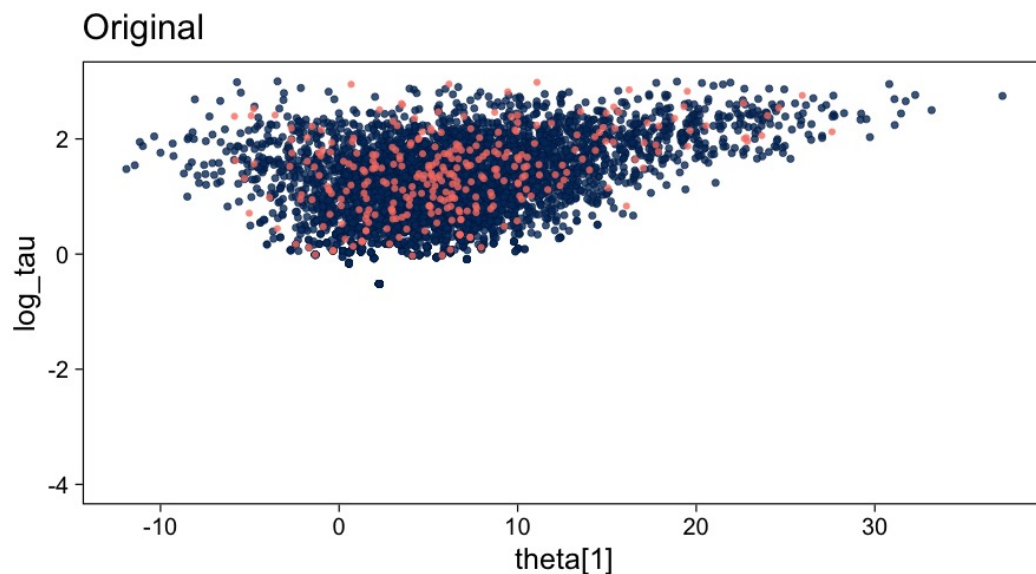
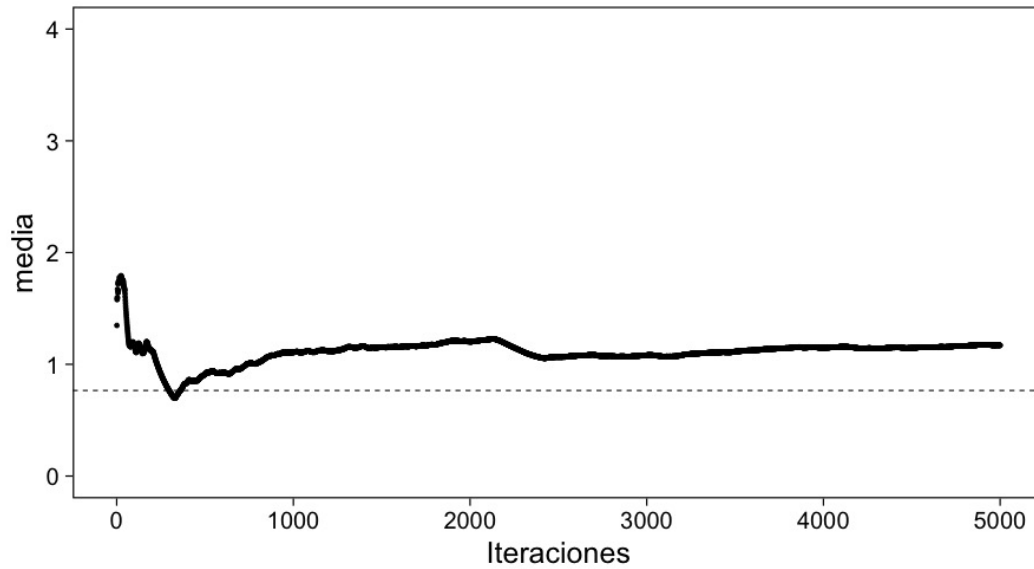


FIGURA 11. Gráficos de dispersión.

3.5. Haciendo tweaks en el simulador

Podríamos correr una cadena con algunas opciones que permitan la exploración mas segura de la distribución.

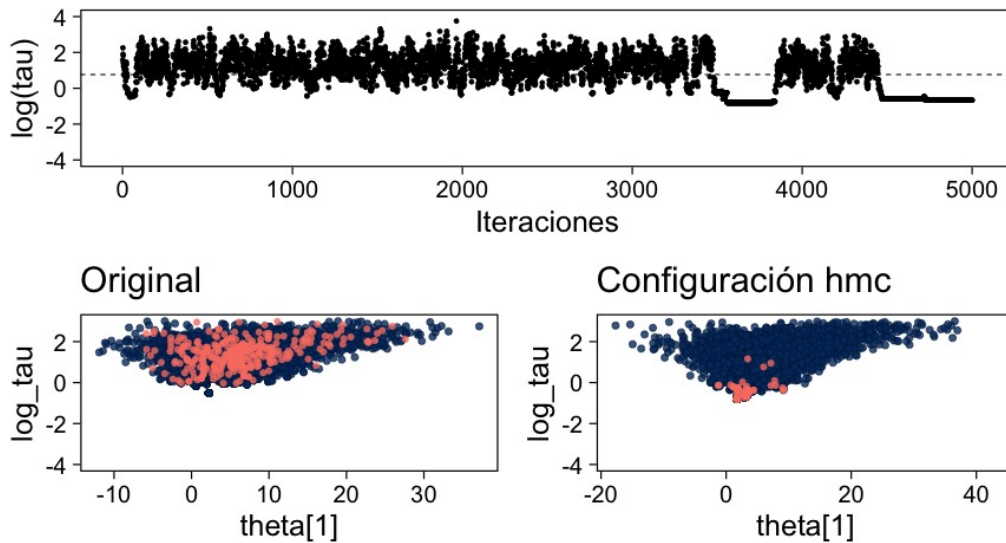
```
1 muestras <- modelo$sample(data      = data_list,
2                             chains    = 1,
```


FIGURA 12. *Media acumulada de $\log \tau$.*

```

3         iter      = 5000,
4         iter_warmup = 5000,
5         seed       = 483892929,
6         refresh    = 10000,
7         adapt_delta = .90)

```


FIGURA 13. *Gráficos de comparación.*

4. CAMBIANDO LIGERAMENTE EL MODELO

Tener cuidado en la simulación del sistema Hamiltoniano nos ayuda hasta cierto punto. Seguimos teniendo problemas y no hay garantías que nuestra simulación y nuestros estimadores

Monte Carlo no estén sesgados.

Esta situación es muy común en *modelos jerárquicos*. El cual hemos definido como

$$\mu \sim N(0, 5), \quad (3a)$$

$$\tau \sim \text{Half-Cauchy}(0, 5), \quad (3b)$$

$$\theta_j \sim N(\mu, \tau), \quad j = 1, \dots, J, \quad (3c)$$

$$y_j \sim N(\theta_j, \sigma_j), \quad j = 1, \dots, J. \quad (3d)$$

El problema es la geometría de la distribución posterior. La ventaja es que existe una solución sencilla para hacer el problema de muestreo mas sencillo. Esto es al escribir el modelo en términos de una variable auxiliar:

$$\mu \sim N(0, 5), \quad (4a)$$

$$\tau \sim \text{Half-Cauchy}(0, 5), \quad (4b)$$

$$\tilde{\theta}_j \sim N(0, 1), \quad j = 1, \dots, J, \quad (4c)$$

$$\theta_j = \mu + \tau \cdot \tilde{\theta}_j, \quad j = 1, \dots, J, \quad (4d)$$

$$y_j \sim N(\theta_j, \sigma_j), \quad j = 1, \dots, J. \quad (4e)$$

El modelo en **Stan** es muy parecido. La nomenclatura que se utiliza es: **modelo centrado** para el primero, y para la reparametrización presentada en la ecuación de arriba nos referimos a un **modelo no centrado**.

```

1 data {
2   int<lower=0> J;
3   array[J] real y;
4   array[J] real<lower=0> sigma;
5 }
6
7 parameters {
8   real mu;
9   real<lower=0> tau;
10  array[J] real theta_tilde;
11 }
12
13 transformed parameters {
14   array[J] real theta;
15   for (j in 1:J)
16     theta[j] = mu + tau * theta_tilde[j];
17 }
18
19 model {
20   mu ~ normal(0, 5);
21   tau ~ cauchy(0, 5);
22   theta_tilde ~ normal(0, 1);
23   y ~ normal(theta, sigma);
24 }
```

Nota que la definición de nuevos parametros se hace desde el bloque **transformed parameters** en donde la asignación se ejecuta componente por componente mientras que la definición del modelo de probabilidad conjunto se puede hacer de manera vectorizada.

Igual que antes lo necesitamos compilar para hacerlo un objeto ejecutable desde R.


```
1 ## Cambio de óparametrizacin
2 ruta_ncp <- file.path("modelos/caso-escuelas/modelo-escuelas-ncp.stan")
3 modelo_ncp <- cmdstan_model(ruta_ncp, dir = modelos_files)
```

Muestreamos de la posterior

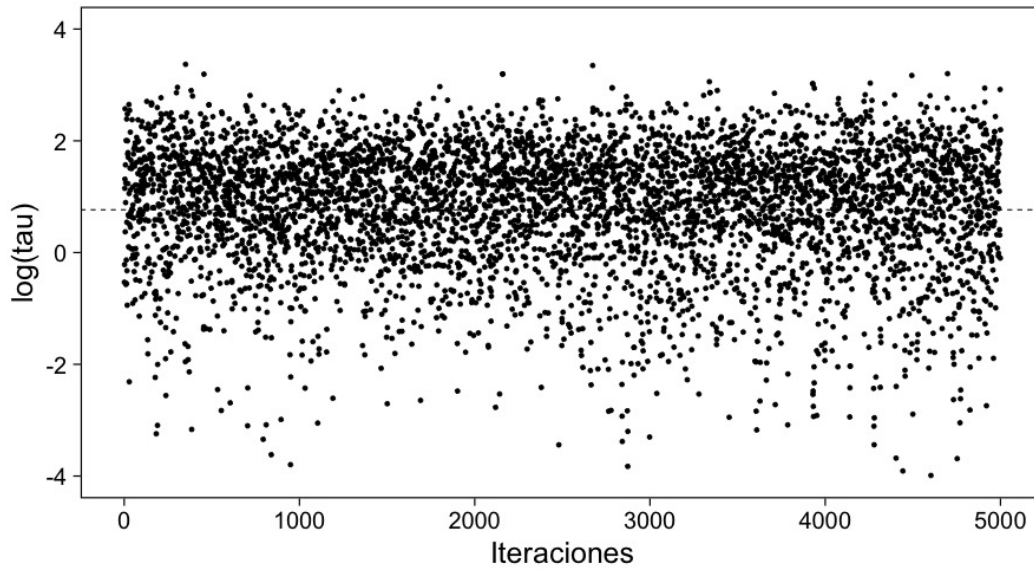
```
1 muestras_ncp <- modelo_ncp$sample(data = data_list,
2                                   chains = 1,
3                                   iter=5000,
4                                   iter_warmup=5000,
5                                   seed=483892929,
6                                   refresh=10000)
```

```
1 Running MCMC with 1 chain...
2
3 Chain 1 Iteration:    1 / 10000 [ 0%] (Warmup)
4 Chain 1 Iteration: 5001 / 10000 [ 50%] (Sampling)
5 Chain 1 Iteration: 10000 / 10000 [100%] (Sampling)
6 Chain 1 finished in 0.3 seconds.
```

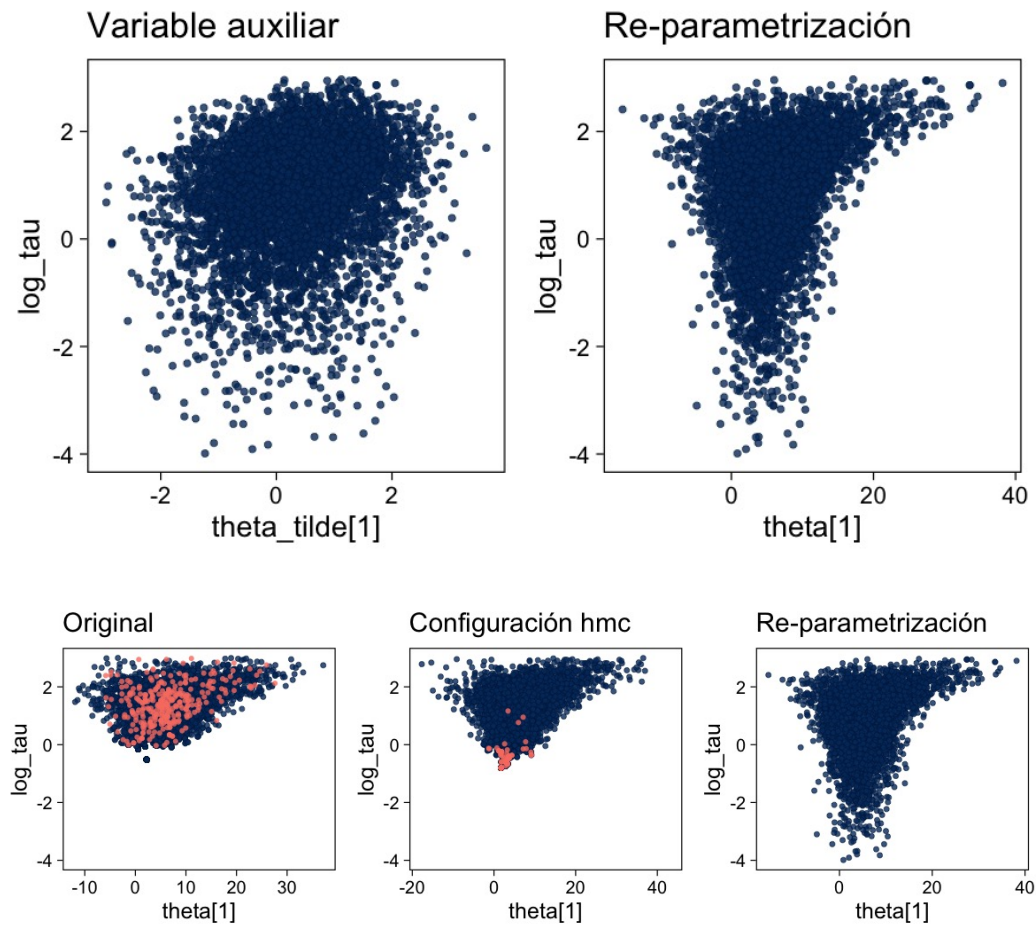
```
1 print(muestras_ncp, max_rows = 19)
```

	variable	mean	median	sd	mad	q5	q95	rhat	ess_bulk	ess_tail
2	lp__	-6.99	-6.70	2.30	2.22	-11.09	-3.77	1.00	2199	2984
3	mu	4.33	4.30	3.38	3.28	-1.17	9.99	1.00	4660	3210
4	tau	3.60	2.78	3.20	2.55	0.27	9.84	1.00	3321	2377
5	theta_tilde[1]	0.31	0.32	0.99	1.02	-1.33	1.91	1.00	5289	3976
6	theta_tilde[2]	0.10	0.11	0.95	0.93	-1.45	1.65	1.00	5112	3495
7	theta_tilde[3]	-0.08	-0.10	0.97	0.97	-1.67	1.52	1.00	4731	3522
8	theta_tilde[4]	0.07	0.06	0.93	0.95	-1.45	1.59	1.00	5773	3865
9	theta_tilde[5]	-0.16	-0.17	0.93	0.94	-1.67	1.38	1.00	5730	4068
10	theta_tilde[6]	-0.08	-0.08	0.94	0.94	-1.62	1.47	1.00	5664	3710
11	theta_tilde[7]	0.37	0.39	0.97	0.96	-1.27	1.92	1.00	4720	3688
12	theta_tilde[8]	0.09	0.10	0.99	1.02	-1.53	1.70	1.00	5050	3175
13	theta[1]	6.10	5.52	5.60	4.71	-1.83	16.12	1.00	4807	3956
14	theta[2]	4.89	4.69	4.68	4.25	-2.37	12.74	1.00	4901	3803
15	theta[3]	3.88	4.01	5.35	4.48	-4.91	12.00	1.00	4777	3577
16	theta[4]	4.74	4.63	4.81	4.41	-2.88	12.63	1.00	5645	4062
17	theta[5]	3.55	3.71	4.80	4.27	-4.61	11.00	1.00	4982	4180
18	theta[6]	3.88	4.04	4.97	4.36	-4.62	11.63	1.00	5494	4553
19	theta[7]	6.29	5.79	5.16	4.45	-1.10	15.61	1.00	5017	3604
20	theta[8]	4.87	4.70	5.35	4.51	-3.34	13.49	1.00	4872	3874

Si graficamos la dispersión de τ ($\log \tau$), vemos un mejor comportamiento (del cual ya teníamos indicios por los diagnósticos del modelo).



Si regresamos a los gráficos de dispersión para verificar que se hayan resuelto los problemas observamos lo siguiente:



Como lo hemos mencionado antes. Este caso ilustra uno de los casos de uso mas conocidos de la inferencia Bayesiana, **modelos jerárquicos**. Estos modelos surgen en diversas aplicaciones, como regresión, análisis de series de tiempo, datos estratificados, etc.

5. REGULARIZACIÓN BAYESIANA

Otro caso de uso bastante común y con el cual *podrían* estar altamente familiarizados es con el concepto de **regularización**. Por ejemplo, en modelos predictivos donde buscamos una regla de asociación $y = f_{\theta}(x)$. En dichos modelos θ son los parámetros que no conocemos y que ajustamos minimizando una función de pérdida *adecuada*

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \mathcal{J}(y, f_{\theta}(x)) . \quad (5)$$

El problema de optimización está usualmente **mal formulado** en el sentido de que pequeñas perturbaciones en el conjunto de datos utilizado para *entrenar* lleva a soluciones radicalmente distintas. En este contexto se busca **regularizar** el problema utilizando una función que permita restringir la solución y de esta manera tener soluciones **estables**. Esto lo formulamos como

$$\hat{\theta}_R = \arg \min_{\theta} (\mathcal{J}(y, f_{\theta}(x)) + R(\theta)) . \quad (6)$$

Esto es bastante usual en la solución de problemas inversos ([6, 9]) y la estimación de modelos predictivos por medio de Ridge o Lasso ([4]). Por ejemplo, se pueden considerar regularizadores como penalizaciones en **norma 2** (Ridge, $\|\theta\|_2^2 = \sum (\theta_i)^2$) o **norma 1** (Lasso, $\|\theta\|_1 = \sum |\theta_i|$).

5.1. Formulación probabilística

En términos probabilísticos esto correspondería a plantear un modelo

$$\pi(\theta|y) \propto \exp(-\mathcal{J}(y, f_{\theta}(x))) \exp(-R(\theta)) . \quad (7)$$

Por ejemplo, considerar **regresión Ridge** implica considerar un modelo **Gaussiano** para la **verosimilitud** y un modelo Gaussiano para la **previa**.

Una variable aleatoria Gaussiana tiene conexiones interesantes con la **descomposición espectral** de una señal (descomposición en valores singulares y series de Fourier). Si pensamos que en un problema de regresión queremos estimar coeficientes. La solución sin restricciones nos puede dar algunos coeficientes con **errores estándar muy altos** y en consecuencia **estadísticamente no significativos** (alta varianza y centrados en cero). La regularización elimina la alta variabilidad (las frecuencia altas de una señal) y rápidamente centra los valores de aquellos valores alrededor del cero para tener una señal con una frecuencia mas *suave*. ¡La conexión la podemos trazar a los coeficientes de Fourier ([1])!

La solución de este problema de optimización se traduce en encontrar el punto **máximo posterior**.

Ahora, el problema es que tanto para Ridge (previa Gaussiana) como para LASSO (previa **doble-exponencial** o Laplace), la *moda* –el punto que maximiza la posterior– es muy distinto de lo que nos darían simulaciones de ese modelo.

En el contexto Bayesiano nos interesaría poder utilizar una distribución previa de la cual podamos extraer muestras donde algunos componentes son cero. Con este propósito se han estudiado y propuesto previas de la familia **horseshoe** (presiento que es un modismo finlandés) [7].

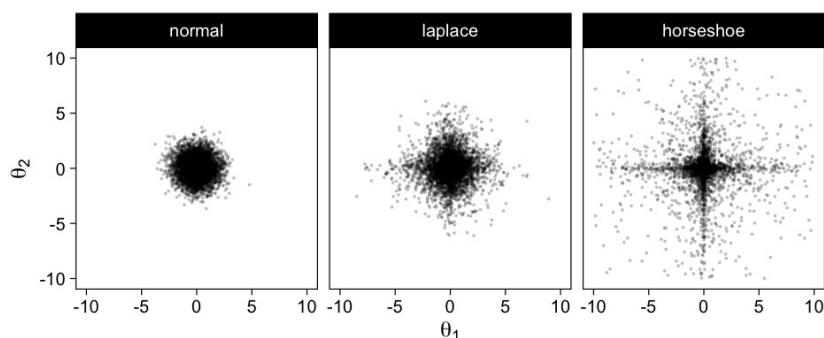


FIGURA 14. Distintas previas y efectos de regularización.

5.2. Regularización en regresión (diabetes)

Veamos lo siguiente para comparar los distintos modelos probabilísticos (Normal, Laplace, Horseshoe).

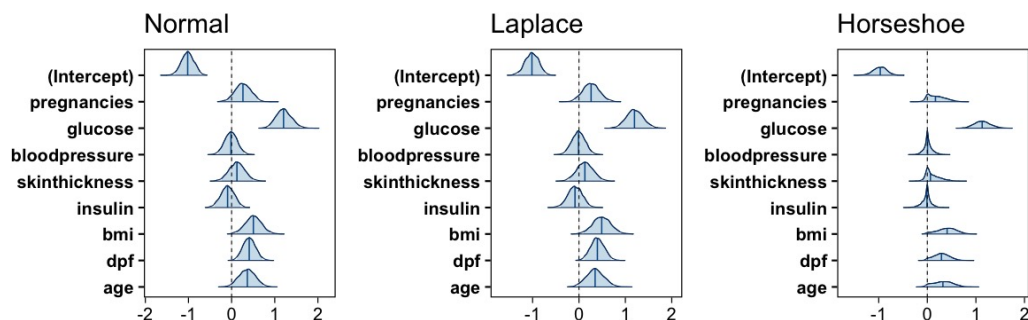


FIGURA 15. Ajuste posterior bajo distintas previas.

5.3. Regularización en regresión (carros)

Notemos como el modelo tiene dos zonas de alta probabilidad.

REFERENCIAS

- [1] J. B. J. Baron Fourier. The analytical theory of heat. *Cambridge*, 1878. [19](#)
- [2] B. Carpenter, A. Gelman, M. D. Hoffman, D. Lee, B. Goodrich, M. Betancourt, M. Brubaker, J. Guo, P. Li, and A. Riddell. Stan: a probabilistic programming language. *Journal of Statistical Software*, 76(1): nil, 2017. . URL <https://doi.org/10.18637/jss.v076.i01>. [1](#)
- [3] A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, and D. B. Rubin. *Bayesian Data Analysis*, volume 2. CRC press Boca Raton, FL, 2014. [7](#)
- [4] T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Friedman. *The Elements of Statistical Learning*. Springer Series in Statistics. Springer New York, New York, NY, 2009. ISBN 978-0-387-84857-0 978-0-387-84858-7. . [19](#)
- [5] A. Johnson, M. Ott, and M. Dogucu. *Bayes Rules! An Introduction to Applied Bayesian Modeling*. CRC Press, 2021. [1](#)
- [6] J. Kaipio and E. Somersalo. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Number v. 160 in Applied Mathematical Sciences. Springer, New York, 2005. ISBN 978-0-387-22073-4. [19](#)

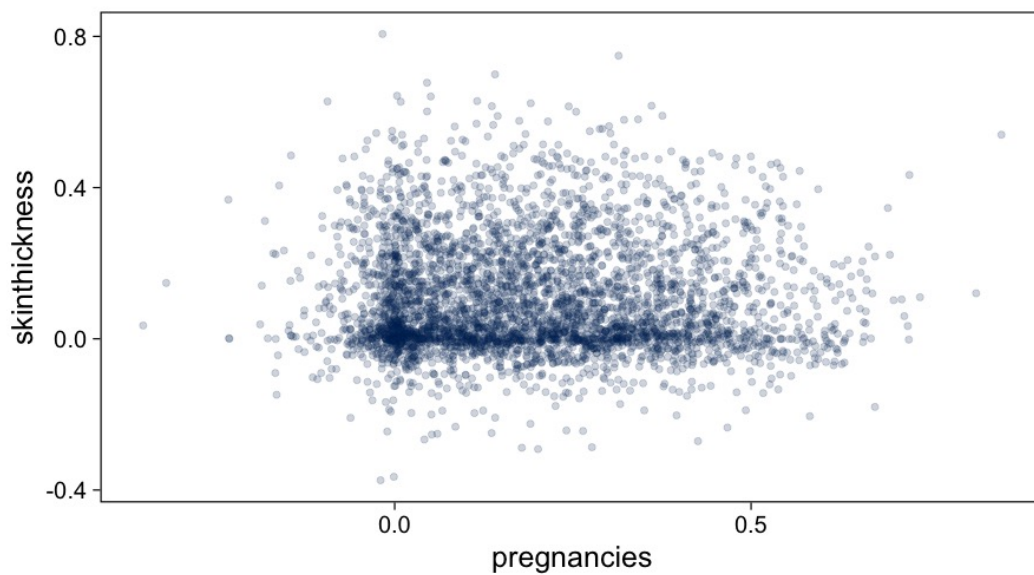


FIGURA 16. Efecto de la regularización en un par de coeficientes.

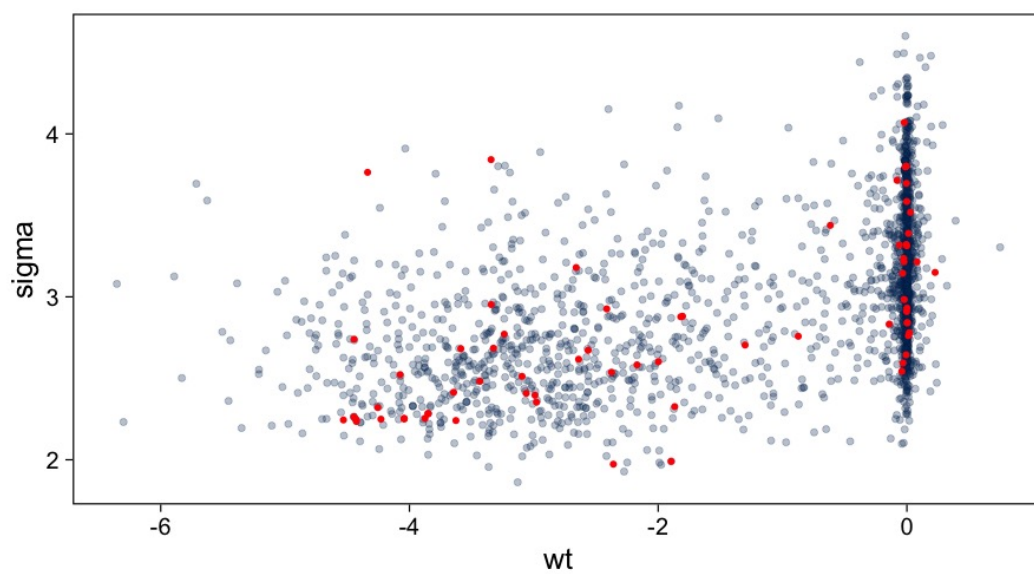


FIGURA 17. Efecto de regularización en dos parámetros de un modelo.

-
- [7] J. Piironen and A. Vehtari. Sparsity information and regularization in the horseshoe and other shrinkage priors. *Electronic Journal of Statistics*, 11(2), jan 2017. ISSN 1935-7524. . [20](#)
 - [8] D. B. Rubin. Estimation in Parallel Randomized Experiments. *Journal of Educational Statistics*, 6(4): 377–401, 1981. ISSN 0362-9791. . [7](#)
 - [9] A. Tarantola. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Society for Industrial and Applied Mathematics, jan 2005. ISBN 978-0-89871-572-9 978-0-89871-792-1. . [19](#)