# Simulación

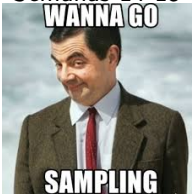
## Monte Carlo a través de Cadenas de Markov (MCMC)

## Gibbs Sampler

Jorge de la Vega Góngora

Departamento de Estadística,
Instituto Tecnológico Autónomo de México

Semanas 14-15




ITAM

# Gibbs Sampler

# Gibbs Sampler I

El Gibbs Sampler es un caso particular del algoritmo de Metropolis-Hastings que se aplica cuando la distribución objetivo a muestrear es una distribución multivariada, y parte de la siguiente idea:

- La distribución objetivo $\pi(\boldsymbol{\theta})$ tiene un vector de variables $\boldsymbol{\theta}$ que se puede particionar en $k$ subpartes: $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \ldots, \boldsymbol{\theta}_k)$
- La cadena de Markov se genera muestreando de las distribuciones condicionales de la distribución objetivo:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}_j | \boldsymbol{\theta}_{-j}, y), \text{ donde } \boldsymbol{\theta}_{-j} = \boldsymbol{\theta} \setminus \boldsymbol{\theta}_j, \quad j = 1, \ldots, k$$

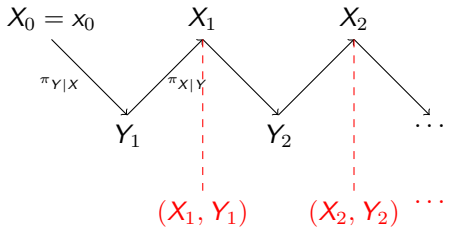
  iterando sobre los $k$ subvectores de parámetros $\boldsymbol{\theta}_{-j}$.

En el caso bidimensional, $(X, Y) \sim \pi(x, y)$. Se genera una cadena de Markov bidimensional $(X_t, Y_t)$ del siguiente modo. Para $n = 1, 2, \ldots$:

- Se inicializa la cadena $X_0 = x_0$.
- Genera $Y_t \sim \pi_{Y|X}(\cdot | X_{t-1})$.
- Genera $X_t \sim \pi_{X|Y}(\cdot | Y_t)$
- Incrementa $t$ a $t + 1$ hasta $n$

# Gibbs Sampler II

En el caso del Gibbs sampler, a diferencia del Metropolis-Hastings, cada candidato generado es aceptado.
Una representación gráfica del flujo del algoritmo se muestra a continuación:




En los problemas bayesianos que se plantean como modelos jerárquicos, este es el método que se puede aplicar de manera consistente, y es por eso que ha tenido tanto éxito.

# Ejemplo 1 GS Normal bivariada I

Consideremos una normal bivariada $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ con $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2)$ y $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho \\ \rho & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$. En este caso es fácil conocer las marginales:

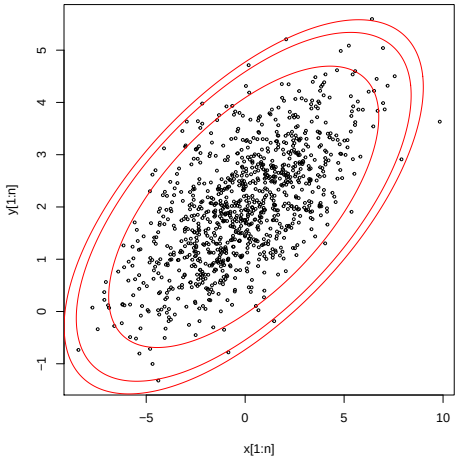
$$\begin{aligned} Y_{n+1}|X_n &\sim \mathcal{N}\left(\mu_2 + \rho\frac{\sigma_2}{\sigma_1}(X_n - \mu_1), (1-\rho^2)\sigma_2^2\right) \\ X_{n+1}|Y_{n+1} &\sim \mathcal{N}\left(\mu_1 + \rho\frac{\sigma_1}{\sigma_2}(Y_{n+1} - \mu_2), (1-\rho^2)\sigma_1^2\right) \end{aligned}$$

Entonces $(X_n, Y_n) \to \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$. A continuación se muestra la simulación para el caso $\rho = 0.5$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 2$, $\sigma_1 = 1$ y $\sigma_2 = 2$

# Ejemplo 1 GS Normal bivariada II

```
library(mixtools) #para la función ellipse.
par(pty="s")  #plot cuadrado
n <- 1000; x0 <- 0 #valor incial
x <- NULL; y <- NULL
x <-append(x0,x)
rho <- 0.5; mu1 <- 0; mu2 <- 2; sigma1 <- 1; sigma2 <- 2 #valores dados
for(i in 1:n){
        y <- append(y, rnorm(1,mean=mu2 + rho*sigma1/sigma2*(x[i]-mu1),sd=sqrt(1-rho^2))*sigma1)
        x <- append(x, rnorm(1,mean=mu1 + rho*sigma2/sigma1*(y[i]-mu2),sd=sqrt(1-rho^2))*sigma2)
}
plot(x[1:n],y[1:n],cex=0.5)
ellipse(mu = colMeans(cbind(x[1:n],y[1:n])), sigma = cov(cbind(x[1:n],y[1:n])),
              alpha = 0.005, npoints = 300, col="red")
ellipse(mu = colMeans(cbind(x[1:n],y[1:n])), sigma = cov(cbind(x[1:n],y[1:n])),
              alpha = 0.01, npoints = 300, col="red")
ellipse(mu = colMeans(cbind(x[1:n],y[1:n])), sigma = cov(cbind(x[1:n],y[1:n])),
              alpha = 0.05, npoints = 300, col="red")
```

# Ejemplo 1 GS Normal bivariada III



# GS multiestado

Si se particiona el vector $\mathbf{X}$ en $k$ componentes $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \ldots, \mathbf{X}_k)$, y podemos simular de $f_i(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_{-i})$, entonces podemos aplicar el siguiente algoritmo:

## Algoritmo Gibbs sampler

1. Inicializar $\mathbf{X}^{(0)} = (\mathbf{X}_1^{(0)}, \mathbf{X}_2^{(0)}, \ldots, \mathbf{X}_k^{(0)})$ y $j = 1$
2. Obtener $\mathbf{X}^{(j)}$ a partir de $\mathbf{X}^{(j-1)}$ generando

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}_1^{(j)} &\sim f(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2^{(j-1)}, \ldots, \mathbf{x}_k^{(j-1)}) \\
\mathbf{x}_2^{(j)} &\sim f(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1^{(j)}, \mathbf{x}_3^{(j-1)}, \ldots, \mathbf{x}_k^{(j-1)}) \\
\mathbf{x}_3^{(j)} &\sim f(\mathbf{x}_3|\mathbf{x}_1^{(j)}, \mathbf{x}_2^{(j)}, \ldots, \mathbf{x}_k^{(j-1)}) \\
&\vdots \\
\mathbf{x}_{k-1}^{(j)} &\sim f(\mathbf{x}_{k-1}|\mathbf{x}_1^{(j)}, \mathbf{x}_2^{(j)}, \ldots, \mathbf{x}_k^{(j-1)}) \\
\mathbf{x}_k^{(j)} &\sim f(\mathbf{x}_k|\mathbf{x}_1^{(j)}, \mathbf{x}_2^{(j)}, \ldots, \mathbf{x}_{k-1}^{(j)})
\end{aligned}
$$

3. Hacer $j := j + 1$ y repetir el paso 2 hasta que la sucesión $\mathbf{X}^{(n)}$ converja a la distribución objetivo.

# Ejemplo I

## Ejemplo, Casella y George (1992)

Supongan que $X$, $P$ y $N$ son tres variables aleatorias con densidad conjunta:

$$\pi(x, p, n) \propto \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x} \frac{4^n}{n!}$$

para $x \in \{0, 1, \ldots, n\}$, $p \in (0, 1)$, $n \in \mathbb{N}$.Con esta estructura, notemos que:

- $X|P = p, N = n \propto \textbf{Bin}(n, p)$.
- $P|X = x, N = n \propto \mathcal{B}e(x + 1, n - x + 1)$.
- $N|X = x, P = p \propto \frac{(1-p)^{n-x} 4^n}{(n-x)!}$ para $n = x, x + 1, \ldots$. Esta es una distribución Poisson desplazada con parámetro $4(1 - p)$, es decir, $N|P = p, X = x \sim Z + x$ donde $Z \sim \mathcal{P}(4(1 - p))$.

De acuerdo al algoritmo dado, la implementación se realiza de la siguiente manera:

- Inicializar $(x_0, p_0, n_0) \leftarrow (1, 0.5, 2)$
- Para $m = 1, \ldots, M$
  - $x_m \sim \textbf{Bin}(n_{m-1}, p_{m-1})$

# Ejemplo II

## Ejemplo, Casella y George (1992)

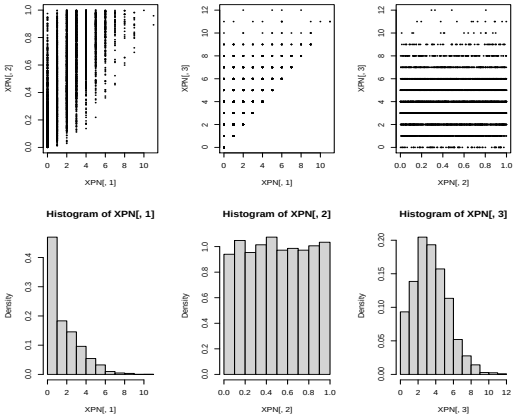
- $p_m \sim \mathcal{B}e\,(x_m + 1, n_{m-1} - x_m + 1)$
- $z \sim \mathcal{P}\,(4(1 - p_m))$ y $n_m = z + x_m$

El algoritmo anterior nos da la secuencia de valores $(X_0, P_0, N_0), (X_1, P_1, N_1), \ldots (X_M, P_M, N_M)$

```
M <- 5000
XPN <- matrix(rep(0,3*M),ncol=3) #Guarda los vectores con variables X, P, N
XPN[1,] <- c(1,0.5,2) #inicialización
for(i in 2:M) {
        XPN[i,1] <- rbinom(1,XPN[i-1,3],XPN[i-1,2])
        XPN[i,2] <- rbeta(1,XPN[i,1]+1, XPN[i-1,3]-XPN[i,1]+1)
        XPN[i,3] <- rpois(1,4*(1-XPN[i,2])) + XPN[i,1]
}
par(mfrow=c(2,3))
plot(XPN[,1],XPN[,2],pch=16,cex=0.5)
plot(XPN[,1],XPN[,3],pch=16,cex=0.5)
plot(XPN[,2],XPN[,3],pch=16,cex=0.5)
hist(XPN[,1],prob=T)
hist(XPN[,2],prob=T)
hist(XPN[,3],prob=T)
```

# Ejemplo III

## Ejemplo, Casella y George (1992)



# ¿Porqué funciona el Gibbs sampler? I

- El Gibbs sampler funciona porque es un caso especial del algoritmo de Metropolis-Hastings en el que siempre se acepta el estado propuesto.
- Para verlo, consideremos un sólo paso en la iteración para mostrar la lógica. Todos los pasos en cada variable siguen el mismo razonamiento.
- Sea $i = (x_1, x_2, \ldots, x_k) \in \mathcal{S}$ el estado actual y $j = (x_1^*, x_2, \ldots, x_k)$ el estado propuesto. Se toma a la distribución candidata $q(\cdot|\cdot)$ como la distribución condicional de $X_1$ dados $X_2, \ldots, X_k$.
- La probabilidad de aceptación del paso es $\alpha(i,j) = \frac{\pi_j q(i|j)}{\pi_i q(j|i)} = \frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}}$. Entonces

$$
\begin{aligned}
\pi_j q_{ji} &= \pi(x_1^*, x_2, \ldots, x_k) f_{X_1|X_2,\ldots,X_k}(x_1|x_2, \ldots, x_k) \\
&= \pi(x_1^*, x_2, \ldots, x_k) \left( \frac{\pi(x_1, x_2, \ldots, x_k)}{\int \pi(x, x_2, \ldots, x_k) dx} \right) \\
&= \pi(x_1, x_2, \ldots, x_k) \left( \frac{\pi(x_1^*, x_2, \ldots, x_k)}{\int \pi(x, x_2, \ldots, x_k) dx} \right) \\
&= \pi(x_1, x_2, \ldots, x_k) f_{X_1|X_2,\ldots,X_k}(x_1^*|x_2, \ldots, x_k) \\
&= \pi_i q_{ij}
\end{aligned}
$$

# ¿Porqué funciona el Gibbs sampler? II

Así que la probabilidad de aceptación es 1, $\alpha(i,j) = 1$, lo que implica que con esta elección de función $q$ el estado propuesto siempre se acepta.

# Ejemplo 2: GS en modelos jerárquicos I

## Modelo jerárquico Binomial-beta

El Gibbs sampler se hizo muy popular en los 90's por sus aplicaciones en estadística Bayesiana, sobre todo en los problemas de estimación de modelos jerárquicos, ya que se cuenta con las marginales de manera explícita.

**Ejemplo**

Consideren el modelo jerárquico

$$\begin{aligned} x|\theta &\sim \textbf{Bin}(n, \theta) \\ \theta &\sim \mathcal{B}e(a, b) \end{aligned}$$

Entonces se tiene que la densidad conjunta de $X$ y $\theta$ se puede escribir como

$$\begin{aligned} f(X, \theta) = f(X|\theta)f(\theta) = f(\theta|X)f(X) &= \binom{n}{x}\theta^x(1-\theta)^{n-x}\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1} \\ f(\theta|X) = \frac{f(X, \theta)}{f(X)} &\propto \binom{n}{x}\theta^{x+a-1}(1-\theta)^{n-x+b-1} \end{aligned}$$

# Ejemplo 2: GS en modelos jerárquicos II

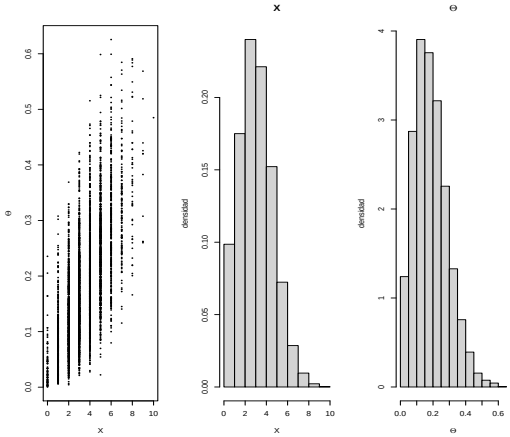
## Modelo jerárquico Binomial-beta

Entonces $\theta|X \sim \mathcal{B}e\,(x+a, n-x+b)$ (beta y binomial son familias conjugada). Así que para generar de la conjunta $(X, \theta)$ se puede generar de $f(X|\theta)$ y de $f(\theta|X)$.
Queremos obtener muestras de la conjunta de los datos y el parámetro. Se considera una binomial con $n = 15$, con $a = 1$ y $b = 8$.

```
nsim <- 5000
n <- 15        #Parámetro dado
a <- 1; b <- 8 #Parámetros de Beta
X <- Theta <- array(0,dim=c(nsim,1)) # Definición de variables
Theta[1] <- rbeta(1,a,b)
X[1] <- rbinom(1,n,Theta[1])
for(i in 2:nsim){
        X[i] <- rbinom(1,n,Theta[1])
        Theta[i] <- rbeta(1,a+X[i],n-X[i]+b)
}

par(mfrow=c(1,3))
plot(X,Theta,pch=16,cex=0.5,ylab=expression(Theta))
hist(X, probability = T, main = "X", ylab = "densidad")
hist(Theta, probability = T, main = expression(Theta),
     xlab = expression(Theta), ylab = "densidad")
```

# Ejemplo 2: GS en modelos jerárquicos III

## Modelo jerárquico Binomial-beta



# Aplicación: Análisis de punto de cambio I

- **Problema**: Considerar el siguiente proceso Poisson con punto de cambio:

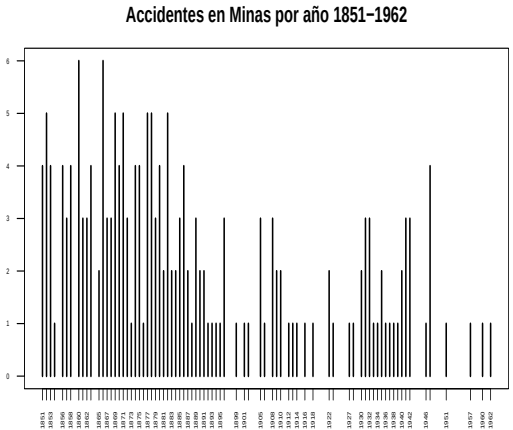
$$X_t \sim \begin{cases} \mathcal{P}(\mu t) & 0 < t \leq k \\ \mathcal{P}(\lambda t) & t > k \end{cases}$$

  Dada una muestra de $n$ observaciones del proceso anterior, estimar $\mu$, $\lambda$ y $k$.
- Este es un proceso muy común y que ha sido ampliamente estudiado. Hay varias opciones de especificación de modelos Bayesianos para resolverlo.
- Una aplicación concreta del problema anterior se relaciona con los datos publicados en el artículo de R.G. Jarret: A note on the intervals between coal-mining disasters. *Biometrika*, **66:191-193**, 1979. Los datos se encuentran en `coal`, en el paquete de `R` `boot` y corresponden a las fechas de 191 explosiones en minas de carbón que resultaron en más de 10 fatalidades desde marzo 15, 1851 hasta marzo 22, 1962.

# Aplicación: Análisis de punto de cambio II

```
library(boot)
par(mar=c(2,2,3,1))
data(coal)
head(coal) #fecha en numeros consecutivos desde 1851

      date
1 1851.203
2 1851.632
3 1851.969
4 1851.975
5 1852.314
6 1852.347

año <- floor(coal) #tomamos el año del evento
y <- table(año) #número de eventos por año
plot(y,las=2,main="Accidentes en Minas por año 1851-1962",cex.axis=0.4)
```

# Aplicación: Análisis de punto de cambio III




Los datos muestran un cambio en el número promedio de desastres por año alrededor de 1900. Los números anuales de accidentes se crean a continuación:

# Aplicación: Análisis de punto de cambio IV

```
año <- floor(coal[[1]]) #extrae las fechas como vector
y <- tabulate(año) #usa tabulate para obtener los años con frecuencia 0
y <- y[1851:length(y)]
y

  [1] 4 5 4 1 0 4 3 4 0 6 3 3 4 0 2 6 3 3 5 4 5 3 1 4 4 1 5 5 3 4 2 5 2 2 3 4 2
 [38] 1 3 2 2 1 1 1 1 3 0 0 1 0 1 1 0 0 3 1 0 3 2 2 0 1 1 1 0 1 0 1 0 0 0 2 1 0
 [75] 0 0 1 1 0 2 3 3 1 1 2 1 1 1 1 2 3 3 0 0 0 1 4 0 0 0 1 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0
[112] 1
```

Modelado:

- Sea $Y_i =$ número de desastres en el año $i$ (1851=1). Entonces, si $k$ es el año punto de cambio,

$$Y_i \sim \mathcal{P}(\mu), \qquad i = 1, \ldots k,$$
$$Y_i \sim \mathcal{P}(\lambda), \qquad i = k+1, \ldots, n$$

  Hay $n = 112$ observaciones terminando en el año 1962. El parámetro a estimar es $\boldsymbol{\theta} = (k, \mu, \lambda)$.

- Se requiere estimar como distribución objetivo la posterior $\pi(\boldsymbol{\theta}|y) = \pi(k, \mu, \lambda|y)$, y en particular, la distribución posterior de $k$, $\pi(k|y, \mu, \lambda)$.

# Aplicación: Análisis de punto de cambio V

- Se puede construir un modelo Bayesiano con las siguientes distribuciones iniciales *independientes*:

$$\begin{aligned} k &\sim U\{1, 2, \ldots, n\}, \\ \mu &\sim \mathcal{G}(a_1, b_1), \\ \lambda &\sim \mathcal{G}(a_2, b_2) \end{aligned}$$

donde $a_1$, $a_2$, $b_1$ y $b_2$ son hiperparámetros que se pueden fijar o bien, se pueden considerar a su vez aleatorios.

- Sean $S_k = \sum_{i=1}^{k} Y_i$ y $S_k^c = S_n - S_k$. Para aplicar el GS, se necesita especificar las distribuciones condicionales posteriores. Las densidades condicionales para $k$, $\mu$, $\lambda$, están dadas por:

$$\begin{aligned} \mu|y, k &\sim \mathcal{G}(a_1 + S_k, k + b_1) \\ \lambda|y, k &\sim \mathcal{G}(a_2 + S_k^c, n - k + b_2) \\ k|y, \mu, \lambda &\sim \frac{L(Y|k, \mu, \lambda)}{\sum_{j=1}^{n} L(Y|j, \mu, \lambda)} \end{aligned}$$

# Aplicación: Análisis de punto de cambio VI

con función de verosimilitud

$$L(Y|k,\mu,\lambda) = e^{k(\lambda-\mu)}\left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{S_k}.$$

Por ejemplo, para encontrar la distribución de $\mu|y,k$ usamos la siguiente relación:

$$\begin{aligned}
\pi(\mu|y,k) &\propto \pi(y|k,\mu)\pi(k,\mu) = \pi(y|k,\mu)\pi(k)\pi(\mu) \\
&\propto \prod_{i=1}^{k} e^{-\mu}\mu^{y_i} e^{-b_1\mu}\mu^{a_1-1} \\
&\propto e^{-k\mu-b_1\mu}\mu^{S_k+a_1-1}
\end{aligned}$$

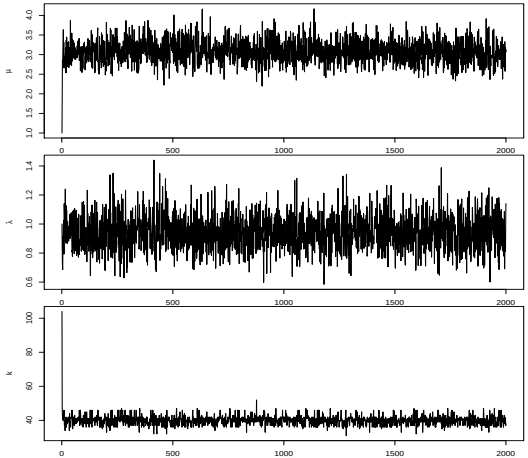
que corresponde al kernel de una distribución $\mathcal{G}(a_1+S_k, k+b_1)$, por lo que $\mu|y,k \sim \mathcal{G}(a_1+S_k, k+b_1)$.

# Aplicación: Análisis de punto de cambio VII

```
#Simulación de los datos para la distribución del punto de cambio.
n <- length(y) #longitud de los datos
m <- 2000      #longitud de la cadena
mu <- lambda <- k <- numeric(m)
L <- numeric(n)
k[1] <- sample(1:n,1) #valor inicial del punto de cambio (seleccionado al azar)
mu[1] <- 1
lambda[1] <- 1
b1 <- b2 <- 1
a1 <- a2 <- 2

for (i in 2:m){
            mu[i] <- rgamma(1, shape = a1 + sum(y[1:k[i-1]]), rate = k[i-1] + b1) #genera mu
        lambda[i] <- rgamma(1, shape = a2 + sum(y)-sum(y[1:k[i-1]]), rate= n - k[i-1] + b2) #genera lambda
for(j in 1:n){
        L[j] <- exp((lambda[i]-mu[i])*j) * (mu[i]/lambda[i])^sum(y[1:j])
}
L <- L/sum(L)
#genera k de la distribución discreta L en 1:n
k[i] <- sample(1:n, prob = L, size = 1)
}
```

```
par(mfrow = c(3,1))
par(mar = c(2,4,0,1))
plot(mu, type = "l", ylab = expression(mu))
plot(lambda, type = "l", ylab = expression(lambda))
plot(k, type = "l", ylab = "k")
```

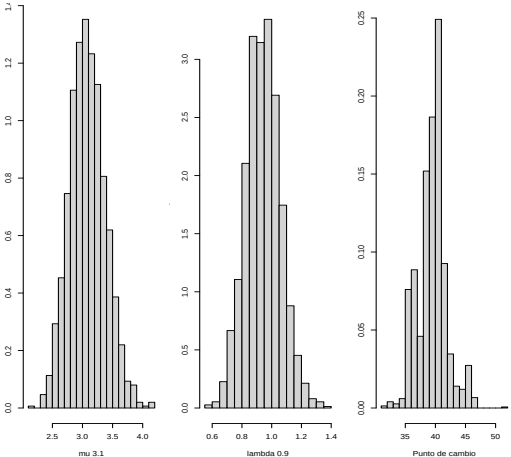
# Aplicación: Análisis de punto de cambio VIII



# Aplicación: Análisis de punto de cambio IX

```r
# histogramas para el output de GS:
b <- 500 #burn-in
par(mar = c(4,3,0,1))
par(mfrow = c(1,3))
label1 <- paste("mu", round(mean(mu[b:m]), 1))
label2 <- paste("lambda", round(mean(lambda[b:m]), 1))
hist(mu[b:m], main = "", xlab = label1, breaks = "scott", prob = TRUE) #mu posterior
hist(lambda[b:m], main = "", xlab = label2,  breaks = "scott", prob = TRUE) #lambda posterior
hist(k[b:m], breaks = min(k[b:m]):max(k[b:m]), prob = TRUE, main = "", xlab = "Punto de cambio")
```

# Aplicación: Análisis de punto de cambio X



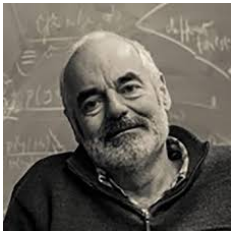
# Aplicación: Análisis de punto de cambio XI

Entonces el punto de cambio está alrededor de $\hat{k} = 40$, que corresponde al año $1851 + 40 = 1891$. De 1851 a 1890 la media Poisson es alrededor de $\hat{\mu} \approx 3.1$ y del año 1891 hacia adelante la media es $\hat{\lambda} \approx 0.93$

# GS Software

# Software relacionado al GS I

- BUGS (Bayesian Analysis using Gibbs Sampler) es un programa que permite realizar el análisis Bayesiano de modelos estadísticos complicados, utilizando métodos MCMC y extraer muestras de distribuciones posteriores. Fue desarrollado del 89 al 97 por un equipo en Cambridge dirigido por Sir David Spiegehalter.



- De este modo, nos podemos enfocar en el modelado estadístico, que es el principal interés, y dejar los cálculos a la computadora. La sintaxis de *BUGS es muy similar a la de R, pero hay algunas diferencias que hay que notar.

# Software relacionado al GS II

- BUGS tiene dos sabores: `WinBUGS`, versión para Windows con interfaz gráfica y `OpenBUGS`, que es la versión de consola, abierta y extendida a más plataformas. Ahora también tiene su versión GUI.
- `WinBUGS` ya no se actualiza y se ha sustituído principalmente por OpenBUGS. `BRugs` y `R2OpenBUGS` son paquetes interfaz entre OpenBUGS y R.
- Una buena manera de aprender lo básico de `WinBUGS` es ver: WinBUGS - The Movie
- JAGS (Just Another Gibbs Sampler) es otro proyecto independiente de BUGS para hacer análisis de modelos jerárquicos bayesianos usando MCMC.
- Stan Stan es un lenguaje y librerias para obtener inferencia Bayesiana utilizando muestreo MCMC, utilizando como interfase a `R`, pero también puede ser Python, MATLAB, JULIA y Stata.

Stan es actualmente el programa con mayor desarrollo y más potente, así que eventualmente hay que migrar a el, pero ayuda aprender un poco de BUGS debido a la documentación que existe y cuya sintaxis es replicada por los otros programas.

# Modelado en BUGS

- Para llevar a cabo un análisis en BUGS, se requiere considerar la siguiente secuencia de acciones
  1. Definir el modelo
  2. Incluir los datos observados
  3. Dar valores iniciales para los parámetros.
  4. Estimar el modelo
  5. Realizar evaluación de diagnósticos.
  6. Analizar los resultados
- A continuación seguiremos el procedimiento en `WinBUGS` a través de un ejemplo sencillo, y lo haremos también a través de la interfase a `R` utilizando `BRugs`.

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado I

- Paso 1: Consideremos un modelo normal conjugado:

$$y|\theta \sim \mathcal{N}\left(\theta, \sigma^2\right)$$

donde $\sigma^2$ es conocido, y la prior de la media $\theta$ también es normal,

$$\theta|\eta \sim \mathcal{N}\left(m, \tau^2\right)$$

donde $m$ y $\tau$ son hiperparámetros conocidos ($\eta = (m, \tau)$), entonces la posterior de $\theta|y$ también es normal:

$$\begin{aligned} \theta|y &\sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma^2 m + \tau y}{\sigma^2 + \tau^2}, \frac{\sigma^2\tau^2}{\sigma^2 + \tau^2}\right) \\ &= \mathcal{N}\left(Bm + (1-B)y, B\tau^2\right) \end{aligned}$$

donde $B = \frac{\sigma^2}{\sigma^2+\tau^2} \in (0, 1)$, se puede interpretar como un *factor de compresión* de la media.

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado II

- En estadística Bayesiana, es común pensar más en términos del concepto de *precisión* que de varianza.

**Precisión**

La precisión es el recíproco de la varianza: si $\sigma^2$ es la varianza, la precisión es $1/\sigma^2$.

- Si ahora se toma una muestra aleatoria $y_1, \ldots, y_n$, entonces la información de la muestra se puede combinar en la estadística suficiente $\bar{y}$, y

$$\begin{aligned} \theta|\bar{y} &\sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma^2 m + \tau^2 \bar{y}}{\sigma^2/n + \tau^2}, \frac{\frac{\sigma^2}{n}\tau^2}{\sigma^2/n + \tau^2}\right) \\ &= \mathcal{N}\left(\frac{\sigma^2 m + n\tau\bar{y}}{\sigma^2 + n\tau^2}, \frac{\sigma^2\tau^2}{\sigma^2 + n\tau^2}\right) \end{aligned}$$

- Paso 2 y 3: Por ejemplo, si $m = 2$, $\tau = \sigma = 1$ y $\bar{y} = 6$, podemos obtener la distribución posterior para diferentes tamaños de la muestra $n$.

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado III

Aunque este modelo está resuelto de manera analítica, se puede usar como referencia para aprender BUGS.

Para ejecutar este modelo desde R usando BRugs, seguimos el mismo proceso.

1. Paso 4: Escribimos el modelo a un archivo, y se "checa" el modelo:

```
library(BRugs) #Paquete que establece la conexión de OpenBUGS y R
setwd("~/Dropbox/Academia/ITAM/2020-II/Sim_S20-II/bugs/modelo1/")
Modelo <- "model{
   prec.ybar <- n/sigma2  #Los modelos normales en BUGS usan precision, no varianza
   prec.theta <- 1/tau2
   ybar ~ dnorm(theta,prec.ybar)
  theta ~ dnorm(mu,prec.theta)}"
writeLines(Modelo, con = "Modelo.txt")
modelCheck("Modelo.txt")
```

```
model is syntactically correct
```

2. Cargamos los datos y los valores iniciales a un archivo. Cargamos los datos del modelo. Aquí suponemos que $n = 10$.

```
datos <- "list(ybar=6, mu=2, sigma2=1, tau2=1, n=10)"
writeLines(datos, con = "datos.txt")

vinit <- "list(theta=0)"
writeLines(vinit, con = "vinit.txt")

modelData("datos.txt")
```

```
data loaded
```

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado IV

3. A continuación se compila el modelo y se inicializa la cadena.

```
modelCompile() #compilación del modelo
```

```
model compiled
```

```
modelInits("vinit.txt") #Se da un valor inicial para el modelo o se puede usar modelGenInits() para valores generados
```

```
Initializing chain 1:
model is initialized
```

4. Ahora ejecutamos el modelo. Por ejemplo, consideramos un burn-in de 1,000 observaciones y generamos 10,000 datos adicionales. Necesitamos monitorear a $\theta$:

```
modelUpdate(1000) #burn-in
```

```
1000 updates took 0 s
```

```
samplesSet("theta") #Define el monitor de la variable
```

```
monitor set for variable 'theta'
```

```
modelUpdate(10000)  #Generamos n iteraciones
```

```
10000 updates took 0 s
```

```
samplesStats("theta") #podemos usar "*" o un vector con los nombres de las variables a monitorear entre comillas
```

```
      mean     sd MC_error val2.5pc median val97.5pc start sample
theta 5.635 0.3028 0.003174    5.046  5.638     6.228  1001  10000
```

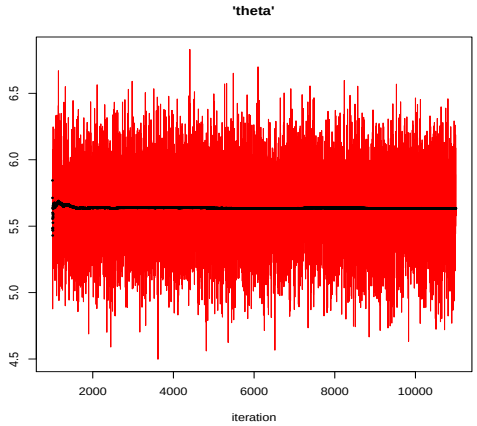
`samplesStats` devuelve los valores de la muestra obtenida

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado V

Paso 5: Podemos ahora generar las gráficas del modelo

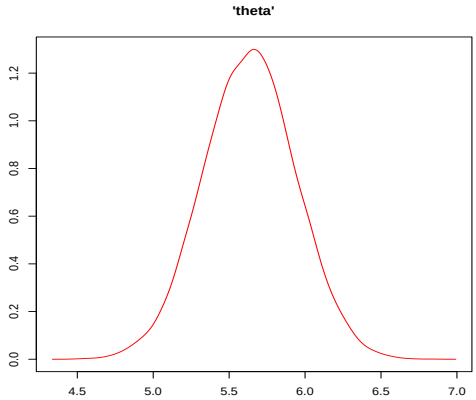
```
a <- samplesHistory("*",mfrow=c(1,1),ask = F)
points(1001:11000,cumsum(a$theta)/(1:length(a$theta)),pch=16,cex=0.5)
```

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado VI




```
samplesDensity("theta",mfrow=c(1,1))
```

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado VII



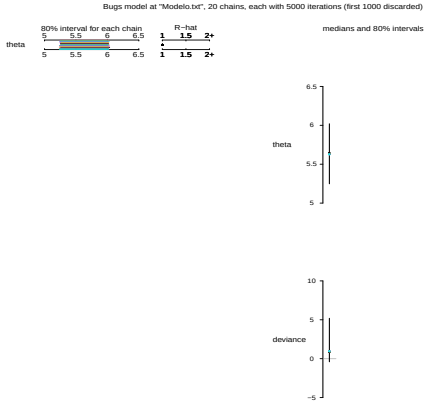
# Ejemplo 3 con Modelo normal conjugado con R2OpenBUGS I

Ejecutamos el mismo ejemplo previo usando el paquete R2OpenBUGS. El modelo se escribe con la misma sintaxis que antes y está en el archivo `Modelo.txt`.
Este programa da una salida ligeramente diferente a la de OpenBUGS con información adicional.

# Ejemplo 3 con Modelo normal conjugado con R2OpenBUGS II

```
library(R2OpenBUGS)
setwd("~/Dropbox/Academia/ITAM/2020-II/Sim_S20-II/bugs/modelo1/") #define el directorio de trabajo.
datos <- list(ybar=6, mu=2, sigma2=1, tau2=1, n=10) #define los valores de los datos

#también se requiere especificar valores iniciales
inits <- function(){list(theta = 0)} #se requiere función para tener inicializadas múltiples cadenas
mod.sim <- bugs(datos, inits, model.file = "Modelo.txt",
                              parameters = c("theta"), n.chains = 20,
                              n.burnin = 1000, n.iter = 5000)
print(mod.sim)

Inference for Bugs model at "Modelo.txt",
Current: 20 chains, each with 5000 iterations (first 1000 discarded)
Cumulative: n.sims = 80000 iterations saved
         mean  sd 2.5%  25% 50% 75% 97.5% Rhat n.eff
theta     5.6 0.3  5.0  5.4 5.6 5.8   6.2    1 80000
deviance  1.8 2.6 -0.5 -0.1 0.9 2.8   8.7    1 80000

For each parameter, n.eff is a crude measure of effective sample size,
and Rhat is the potential scale reduction factor (at convergence, Rhat=1).

DIC info (using the rule, pD = Dbar-Dhat)
pD = 0.9 and DIC = 2.7
DIC is an estimate of expected predictive error (lower deviance is better).


plot(mod.sim)
```

# Ejemplo 3 con Modelo normal conjugado con R2OpenBUGS III



# Explicación de los elementos de la salida de OpenBUGS I

- La interpretación de esta salida es muy similar a la que se obtendría en `Stan` también.
- En la salida de los resultados del modelo, se pueden ver los siguientes elementos para cada parámetro estimado:
  - `mean` es la media posterior estimada, calculada como el promedio de las salidas de la cadena.
  - `sd` es la desviación estándar de las observaciones, que conforme el tamaño de muestra tiende a infinito, se acerca a la desviación estándar posterior del parámetro.
  - `2.5%, 25%, 50%, 75%, 97.5%` son cuantiles de la distribución posterior
  - `Rhat` corresponde al factor de reducción potencial de escala $\hat{R}$, que vale $\hat{R} = 1$ cuando todas las cadenas se han mezclado.
  - `n.eff` es el tamaño de muestra efectivo, que tiene una fórmula dada por:

$$\hat{n}_{eff} = \frac{mn}{1 + 2\sum_{i=1}^{T} \hat{\rho}_t}$$

$\rho_t$ es la autocorrelación de la sucesión $\{X_n\}$ en el rezago $t$, $n$ es el número de simulaciones de cada cadena y $m$ es el número de cadenas simuladas, y $T$ es el primer entero impar para el cual $\hat{\rho}_{T+1} + \hat{\rho}_{T+2} < 0$. (ver detalles en Gelman, et.al BDA3, sección 11.5) Basta tomar como referencia que $\hat{n}_{eff} \geq 10m$ es un síntoma de que la cadena se ha mezclado adecuadamente.

# Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. I

- coda significa Convergence and diagnostics analysis for MCMC. El paquete coda, permite hacer análisis de salida y diagnósticos para MCMC. coda trata de responder a la pregunta: ¿ha tenido el sampler suficiente adaptación (burn-in) para justificar que la muestra proviene de la posterior de interés?
- Un paquete similar es boa que sirve para evaluar la convergencia de cadenas MCMC. boa surge de reescribir de las funciones y la interfase de CODA, que es la versión original del paquete de R coda. El orden es:

$$\texttt{CODA} \rightarrow \texttt{boa} \rightarrow \texttt{coda}$$

- Usualmente tenemos que analizar las muestras *después* del periodo burn-in para detectar algún tipo de anomalía. El paquete coda ofrece algunas funciones de diagnóstico para para facilitar el análisis.

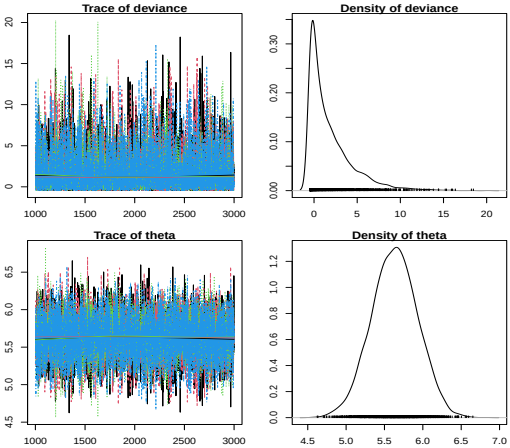
# Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. II

- Podemos obtener la traza y las densidades de las variables de interés del modelo. Estas ya las obteníamos desde antes.

```
par(mar=c(3,3,1,1))
library(coda)
inits <- function(){list(theta = 0)}
#agrega la opción {\tt codaPkg = T} para poder leer la salida a coda
mod.sim2 <- R2OpenBUGS::bugs(datos, inits, model.file = "Modelo.txt",
                             parameters = c("theta"), n.chains = 4,
                          n.burnin = 1000, n.iter = 3000, codaPkg = T)
plot(R2OpenBUGS::read.bugs(mod.sim2))
```

```
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
```

# Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. III




- Otra herramienta de diagnóstico que ya mencionamos antes son los gráficos de Gelman, que grafican el valor de $\hat{R}$.

# Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. IV

- La gráfica de Gelman mide si hay una diferencia significativa entre la varianza al interior de varias cadenas y la varianza entre las cadenas.
- `gelman.diag` devuelve el factor de reducción para cada parámetro. Un factor de 1 significa que la intravarianza y la intervarianza son iguales. Valores grandes denotan que hay diferencias notables entre las cadenas.

# Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. V

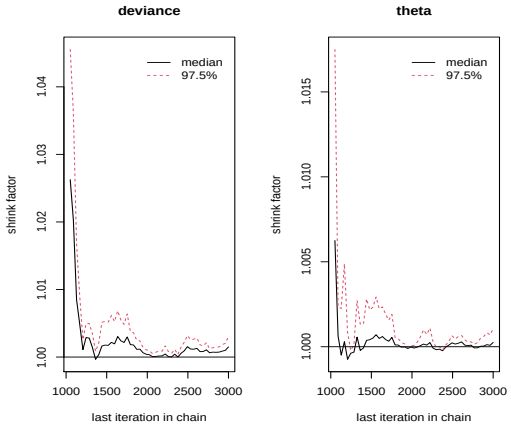
```
gelman.diag(R2OpenBUGS::read.bugs(mod.sim2))
```

```
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Potential scale reduction factors:

         Point est. Upper C.I.
deviance          1          1
theta             1          1

Multivariate psrf

1
```

```
gelman.plot(R2OpenBUGS::read.bugs(mod.sim2))
```

```
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
```

# Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. VI



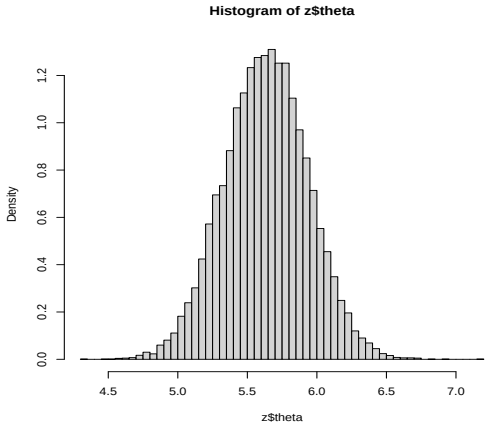

De acuerdo al profesor Charles Geyer, de la Universidad de Minnesota, el periodo de burn-in es completamente innecesario

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado con JAGS y rjags I

Para ejecutar el programa ahora usamos JAGS El archivo con el modelo siguie teniendo la misma especificación y está en `Modelo.txt`. Obviamente primero se requiere tener instalado JAGS en la computadora.

```
library(rjags)
setwd("~/Dropbox/Academia/ITAM/2020-II/Sim_S20-II/bugs/modelo1/") #define el directorio de trabajo.
jags <- jags.model("Modelo.txt",
                   data = list(ybar=6, mu=2, sigma2=1, tau2=1, n=10), #define los valores de los datos
                   n.chains = 20,
                   n.adapt = 1000) # burn-in


Compiling model graph
   Resolving undeclared variables
   Allocating nodes
Graph information:
   Observed stochastic nodes: 1
   Unobserved stochastic nodes: 1
   Total graph size: 9

Initializing model


update(jags,1000)

z <- jags.samples(jags,c("theta"),1000)
hist(z$theta,breaks = 50,prob=T)
```

# Ejemplo 3: Modelo normal conjugado con JAGS y rjags II




Información adicional y ejemplos se pueden encontrar en este tutorial.

# Ejemplo 4: Simulación de transformación de variable aleatoria I

Problema: Si tenemos $Z \sim N(0,1)$ y transformamos a $Y = (2Z+1)^3$. Queremos obtener la distribución de $Y$, su media y $P(Y > k)$ para alguna $k$, por ejemplo $k = 10$. El problema es difícil de resolver de manera analítica pero es fácil de simular.

# Ejemplo 4: Simulación de transformación de variable aleatoria II

```
Modelo2 <- "
    model {
Z ~ dnorm(0,1) #Hay que considerar que en BUGS se lee la precisión, no la varianza
Y <- pow(2*Z+1,3)
P10 <- step(Y-10) #step es la indicadora de la condición > 0 Suponemos k=10
}
"

writeLines(Modelo2,con="Modelo2.txt")
modelCheck("Modelo2.txt")

model is syntactically correct

modelCompile()

model compiled

modelGenInits() #inicializa al azar

initial values generated, model initialized

modelUpdate(10000) #burn-in

10000 updates took 0 s

samplesSet(c("Y","P10"))

monitor set for variable 'Y'
monitor set for variable 'P10'

modelUpdate(50000)
```

# Simplificación de proceso I

Como pueden ver, varios pasos se repiten con frecuencia. Entonces, podemos tratar de escribir una función que haga todo el proceso sin tener que reescribirlo todo el tiempo.

```
run.model <- function(modelo, muestras, datos = list(), longcadena = 10000, burnin = 0.10,
vinit, nchains=1,thin=1) {
        writeLines(modelo, con="modelg.txt")
        modelCheck("modelg.txt")   #Envía el modelo a BUGS, para verificar sintaxis
        if(length(datos)>0)        #Si hay datos disponibles,
        modelData(bugsData(datos)) #BRugs los pone en un archivo y los envía a BUGS
        modelCompile(nchains)        #BRugs compila el modelo

        if(missing(vinit)) {
                modelGenInits()           #Inicializa la cadena al azar si no hay valores iniciales
        } else {
                for(chain in 1:nchains) modelInits(bugsInits(vinit))
        }

        modelUpdate(longcadena*burnin) #porcentaje de las simulaciones a descartarse
        samplesSet(muestras)
        samplesSetThin(thin)
        modelUpdate(longcadena)
}
```

Entonces el ejercicio previo lo pudimos haber ejecutado de la siguiente manera:

# Simplificación de proceso II

```
run.model(Modelo2, muestras=c("Y","P10"),longcadena = 50000)
```

```
model is syntactically correct
model compiled
initial values generated, model initialized
5000 updates took 0 s
monitor set for variable 'Y'
monitor set for variable 'P10'
50000 updates took 0 s
```

# Ejemplo 5: Estimación de número de reparaciones I

Problema: Tenemos 100 computadoras que requieren reparación. El costo unitario de reparación depende de las piezas que tenga descompuesta la computadora, y usualmente el costo es una variable aleatoria que se puede modelar como una gamma con media 100 y desviación estándar 50. Si tenemos un presupuesto de 10,000 para reparaciones, ¿cuántas reparaciones en promedio podemos hacer?

Recuerden que la distribución $\mathcal{G}(a, b)$ tiene media $\frac{a}{b}$ y varianza $\frac{a}{b^2}$ Entonces la costo en el ejercicio tiene distribución $\mathcal{G}(4, 0.04)$.

Para simular el ejercicio, generamos 100 datos de costos con la distrbución dada. Entonces obtenemos una muestra $Y_1, \ldots, Y_{100}$ donde $Y_i$ es el costo de reparar la computadora $i$. El problema consiste en estimar $M$ tal que $\sum_{i=1}^{M} Y_i <= 10,000$ Como podemos ver $M$ es aleatorio completamente.

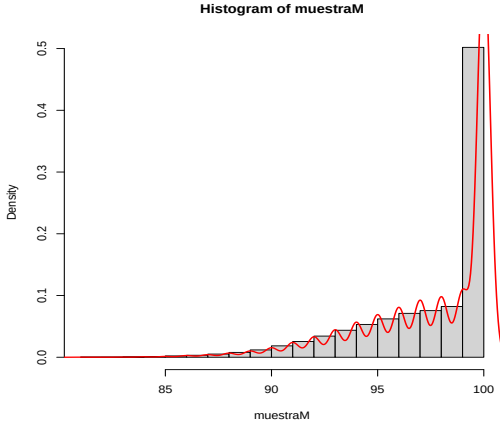
# Ejemplo 5: Estimación de número de reparaciones II

```
modelo3 <- "model {
for(i in 1:100) {Y[i] ~ dgamma(4,0.04)}
sumacosto[1] <- Y[1]
for(i in 2:100) {sumacosto[i] <- sumacosto[i-1] + Y[i]}
for(i in 1:100) {cum.step[i] <- i * step(10000 - sumacosto[i]) } #1,2,...,M,0,...
M <- ranked(cum.step[],100)}"

run.model(modelo3, muestras=c("M","sumacosto[100]"),longcadena = 50000)

model is syntactically correct
model compiled
initial values generated, model initialized
5000 updates took 0 s
monitor set for variable 'M'
monitor set for variable 'sumacosto[100]'
50000 updates took 5 s
```

Para ver los resultados

```
samplesStats(c("M","sumacosto[100]"))

                  mean      sd MC_error val2.5pc median val97.5pc start sample
M                 97.8   3.033  0.01244       90    100       100  5001  50000
sumacosto[100] 10000.0 498.700  2.10000     9055   9998     11000  5001  50000

muestraM <- samplesSample("M")
hist(muestraM,probability = T)
lines(density(muestraM),col="red",lwd=2)
```

# Ejemplo 5: Estimación de número de reparaciones III



# Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal I

En el siguiente modelo será $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$. Se supone que la precisión tiene una distribución inicial de la forma gamma($\epsilon$,$\epsilon$), en la parametrización de la Gamma en BUGS, tiene media $\frac{\epsilon}{\epsilon} = 1$ y varianza $\frac{\epsilon}{\epsilon^2} = \frac{1}{\epsilon} = 10$.

# Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal II

```
modelo4 <- "
    model {
for (i in 1:n) {
logx[i] <- log(x[i])
y[i] ~ dnorm(mu[i], tau)
mu[i] <- beta0 + beta1*logx[i]
}
# priors para los parámetros de regresión
beta0 ~ dnorm(0,100)
beta1 ~ dnorm(0,100)
# prior para la precisión del parámetro
tau ~ dgamma(0.1,0.1)
sigma <- 1/sqrt(tau)
}
"

run.model(modelo4, muestras=c("beta0","beta1","sigma"),
              datos = list(x = c(1.0, 1.5, 1.5, 1.5, 2.5, 4.0, 5.0, 5.0, 7.0,
                                                            8.0, 8.5, 9.0, 9.5, 9.5, 10.0, 12.0, 12.0, 13.0,
                                                           13.0, 14.5, 15.5, 15.5, 16.5, 17.0, 22.5, 29.0,31.5),
                                          y = c(1.80, 1.85, 1.87, 1.77, 2.02, 2.27, 2.15, 2.26, 2.47,
                                                            2.19, 2.26, 2.40, 2.39, 2.41, 2.50, 2.32, 2.32, 2.43,
                                                            2.47, 2.56, 2.65, 2.47, 2.64, 2.56, 2.70, 2.72, 2.57),
                                          n = 27),
                                    longcadena = 30000,burnin = 0.20)
```

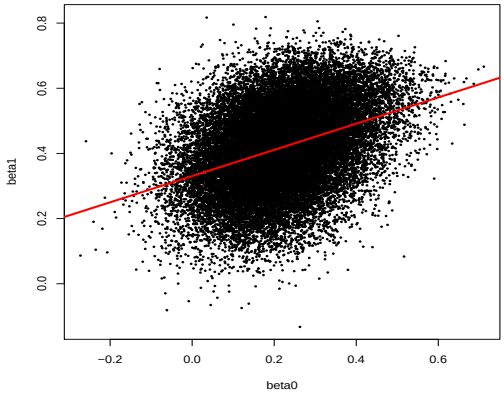
```
model is syntactically correct
data loaded
model compiled
initial values generated, model initialized
6000 updates took 0 s
monitor set for variable 'beta0'
monitor set for variable 'beta1'
monitor set for variable 'sigma'
30000 updates took 0 s
```

# Modelo de Regresión Lineal I

Después de obtener las iteraciones analizamos los resultados. Noten en la gráfica conjunta de $(\beta_0, \beta_1)$ la fuerte correlación que hay entre los dos parámetros La correlación se puede eliminar si la variable $x$ se centra alrededor de su propia media.

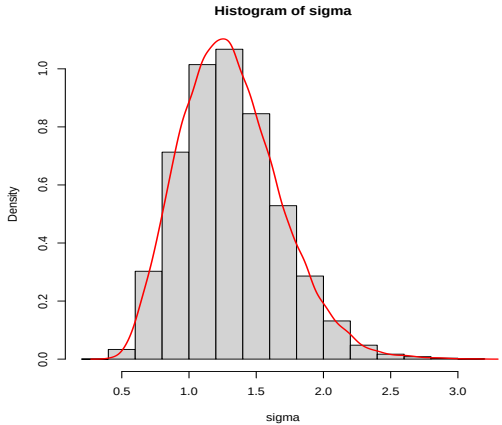
```
samplesStats("*")

        mean     sd MC_error  val2.5pc median val97.5pc start sample
beta0 0.2179 0.1191 0.001299 -0.009314 0.2158    0.4592  6001  30000
beta1 0.4181 0.1289 0.001911  0.161000 0.4209    0.6571  6001  30000
sigma 1.3090 0.3666 0.005506  0.689300 1.2790    2.1100  6001  30000

beta0 <- samplesSample("beta0")
beta1 <- samplesSample("beta1")
sigma <- samplesSample("sigma")
plot(beta0,beta1,pch=16,cex=0.5)
abline(reg=lm(beta1~beta0),col="red",lwd=3)
```

# Modelo de Regresión Lineal II




```
hist(sigma, probability = T)
lines(density(sigma),col="red",lwd=2)
```

# Modelo de Regresión Lineal III




Versión con `OpenBUGS` para incluir análisis de `coda`

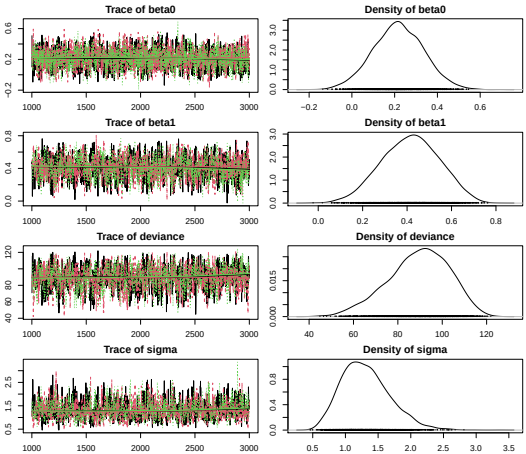
# Modelo de Regresión Lineal IV

```
#previamente cargado coda y R2OpenBUGS
writeLines(modelo4, con = "Modelo4.txt")

inits <- function(){list(beta0=1,beta1=1,tau=1)}

datos = list(x = c(1.0, 1.5, 1.5, 1.5, 2.5, 4.0, 5.0, 5.0, 7.0, 8.0, 8.5, 9.0, 9.5, 9.5,
                   10.0, 12.0, 12.0, 13.0, 13.0, 14.5, 15.5, 15.5, 16.5, 17.0, 22.5,
                   29.0,31.5),
             y = c(1.80, 1.85, 1.87, 1.77, 2.02, 2.27, 2.15, 2.26, 2.47, 2.19,
                     2.26, 2.40, 2.39, 2.41, 2.50, 2.32, 2.32, 2.43, 2.47, 2.56, 2.65,
                   2.47, 2.64, 2.56, 2.70, 2.72, 2.57),
             n = 27)

mod.sim1 <- R2OpenBUGS::bugs(datos,inits,model.file="Modelo4.txt",
                  parameters=c("beta0","beta1","sigma"),
                  n.burnin = 1000, n.iter = 3000, codaPkg = T)
```

# Modelo de Regresión Lineal V

```
par(mar=c(2,2,2,1))
plot(R2OpenBUGS::read.bugs(mod.sim1))

Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
```

# Modelo de Regresión Lineal VI



# Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal I

```
par(mar=c(3,3,1,1))
gelman.plot(R2OpenBUGS::read.bugs(mod.sim1))

Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
```

# Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal II