MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA OBTENER LA POSTERIOR

Santiago Alonso-Díaz, PhD Universidad Javeriana En esta sesión veremos programación probabílistica.

Programación probabílistica se refiere a algoritmos que permiten hacer inferencia con distribuciones (no son programas inciertos).

Con probabilistic programming se puede samplear posteriors elaboradas

Caída Exponencial de la Memoria

Figuras:

Cuadrado -> discreto

Circulo -> continuo

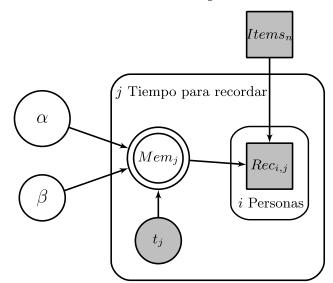
Frontera doble -> determinista

Platos/grupos -> repeticiones

Colores:

Blanco -> latente

Gris -> observables

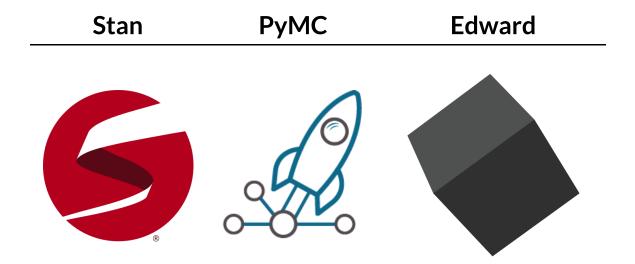


 $\alpha \sim Beta(1,1)$

 $\beta \sim Beta(1,1)$

 $Mem_j \sim min\left(1, e^{-\alpha t_j} + \beta\right)$

 $Rec_{i,j} \sim Binomial(Mem_j, Items_n)$





Nota: PyMC3 ... PyMC4 está en pre-release.

Basado en: Davidson-Pilon, C. (2015). Bayesian methods for hackers: probabilistic programming and Bayesian inference.

https://github.com/CamDavidsonPilon/Probabilistic-Programming-and-Bayesian-Methods-for-Hackers

(https://github.com/CamDavidsonPilon/Probabilistic-Programming-and-Bayesian-Methods-for-Hackers)

PERO PRIMERO UN CORTO TUTORIAL DE DOT

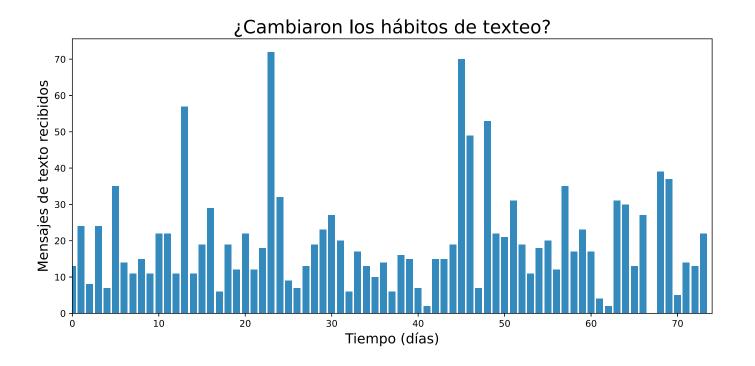
Se pueden hacer modelos gráficos con Python usando la sintaxis de dot

```
In [2]: #Primero definamos la gráfica
       dot text = 'digraph G {\
                            node[margin=0.2, shape=rectangle,\
                                  style = rounded,\
                                 width=0.8, height = .71;
                            compound=true; \
                            newrank=true; \
                            d -> e [label=" mi texto "];\
                            subgraph cluster0{\
                               label = " ";\
                               texlbl = "$\\theta i$";\
                                labeljust = "l"; color = "red";\
                                f;\
                               g; \
                            }; \
                            e -> f [lhead = cluster0, label=" "];\
                            f -> q;\
                            q -> h [ltail = cluster0];\
                            { rank=same; f; e};\
                            d [label = "Nodo", fixedsize=true, width=0.5,\
                                         shape = circle;\
                            e [texlbl = "$\\mu$", shape = square,\
                                         width = 0.61;
                            f [label = "VI", shape = plaintext];\
                            g [texlbl = "$\\sum i x i$"];\
                            h [texlbl = "$\\int \\beta i di$",\
                                          shape = circle, peripheries = 4];
       #Tip: use single quote at start and end; double quotes for labels
```

```
In [3]: #Ahora salvarla
    #Para que se vea bien en tex
    tex = d2t.dot2tex(dot_text, format='tikz', preproc = True)
    #crop: tamaño de página igual al modelo
    tex = d2t.dot2tex(dot_text, texmode = 'verbatim', crop=True)
    diagram_tex = open('img/4_CB/tutorial_dot.tex', 'w')
    diagram_tex.write(tex)
    diagram_tex.close()

# this builds a pdf-file inside a directory
    pdf = build_pdf(tex)
    #convertir a svg y pulir/editar posiciones en inkscape
    pdf.save_to('img/4_CB/tutorial_dot.pdf')
```

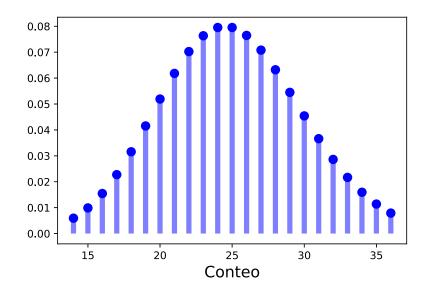
Analicemos mensajes de texto de una persona (Fuente: Davidson-Pilon, 2015)



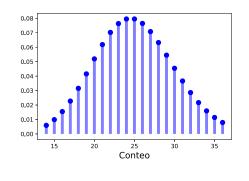
¿Cómo modelamos el conteo de mensajes por día?

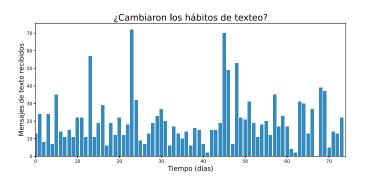
 $Conteo_{día} \sim Poisson(\lambda)$

Nota: El parámetro λ es el promedio y varianza al mismo tiempo.



Pero ... se ven diferentes





Un histograma es una guía visual (depende de los bins)

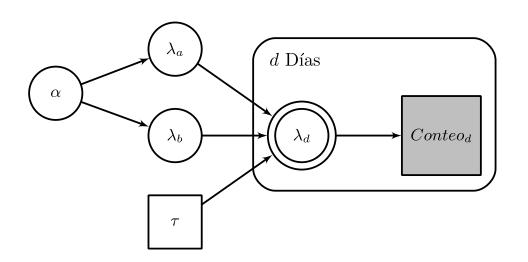
Pueden ser dos Poisson diferentes, después de un día au

Esta es la propuesta:

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_a & \text{día} < \tau \\ \lambda_b & \text{día} \ge \tau \end{cases}$$

Esta es la propuesta bayesiana completa:

Mensajes de Texto por Día



$$\alpha = \frac{1}{E[Conteo_d]}$$

 $\lambda_b \sim Exponential(\alpha)$

 $\lambda_a \sim Exponential(\alpha)$

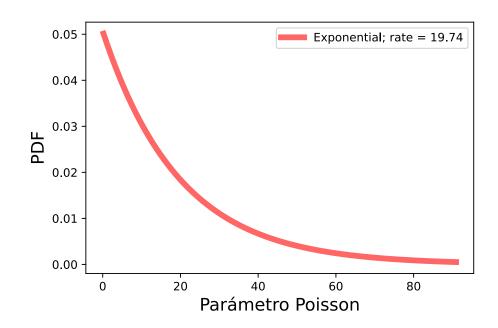
 $\tau \sim Uniform(0, N_{\rm días})$

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_a & \text{día} < \tau \\ \lambda_b & \text{día} \ge \tau \end{cases}$$

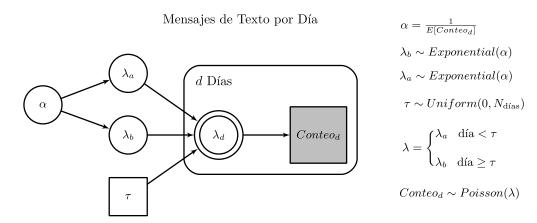
 $Conteo_d \sim Poisson(\lambda)$

¿Por qué esas formas y distribuciones para los parámetros?

Parte ciencia (e.g. conjugate prior) y arte (conocimiento del área). Por ejemplo, para los λ_a y λ_b escogimos una exponencial con rate $\alpha = \frac{1}{\mathbb{E}[Conteo_d]}$. No es conjugate, pero hace algo deseable: castiga conteos altos.



Ahora tomemos muestra del modelo con PyMC



PyMC guarda el modelo en la clase Model. Veamos el código.

```
[lambda_antes_log__, lambda_despues_log__, tau, conteos]
[lambda_antes_log__, lambda_despues_log__, tau]
[conteos]
11.43 7.44 25.75
```

Out[6]: lambda_antes \sim Exponential(lam = 0.05065023956194388)



```
In [7]: with modelo_mensajes:
    trace = pm.sample(10000, chains = 4, cores = 2)
    #posterior_predictive = pm.sample_posterior_predictive(trace)

Multiprocess sampling (4 chains in 2 jobs)
CompoundStep
```

>NUTS: [lambda_despues, lambda_antes]

>Metropolis: [tau]

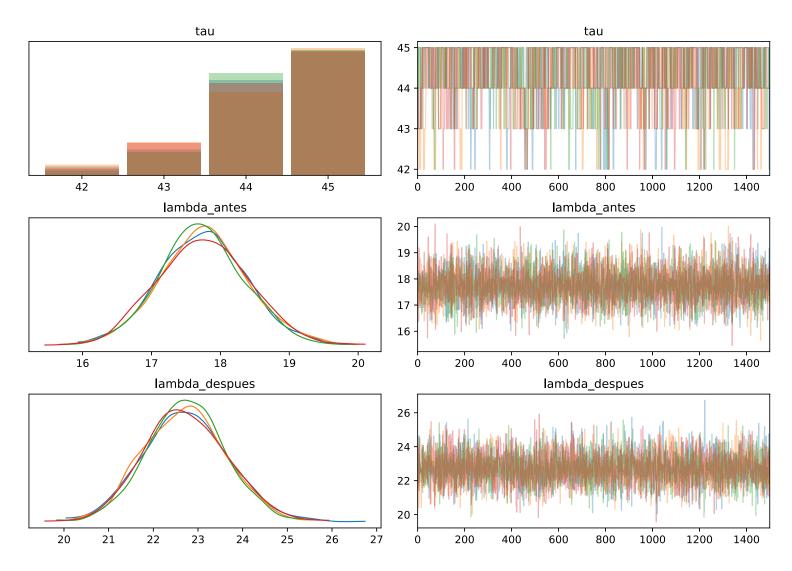
100.00% [44000/44000 00:30<00:00 Sampling 4

chains, 0 divergences]

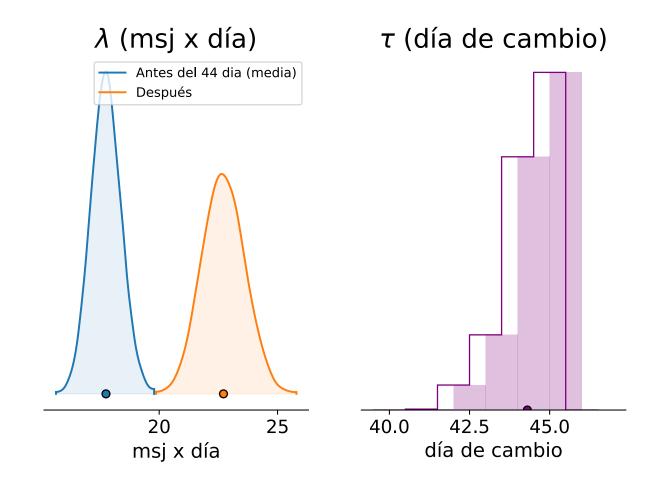
Sampling 4 chains for 1_000 tune and 10_000 draw iterations $(4_000 + 40_000$ draws total) took 31 seconds.

The number of effective samples is smaller than 25% for some parameters.

El modelo convergio. Hay tests, pero visualmente combina bien (plots derechos)

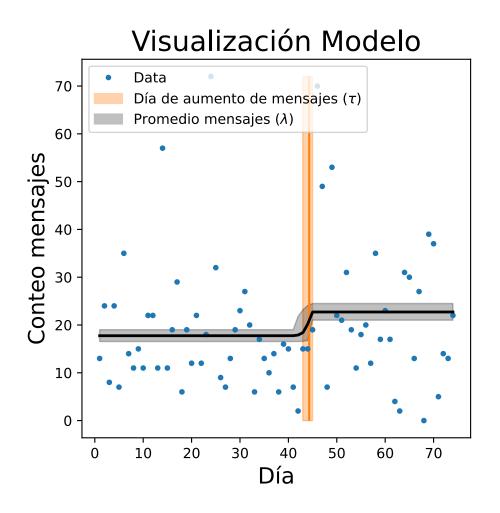


Aún cuando escogimos prior exponenciales (lambda) y uniformes (tau), las posterior se ven diferentes. La data modificó nuestra creencia.



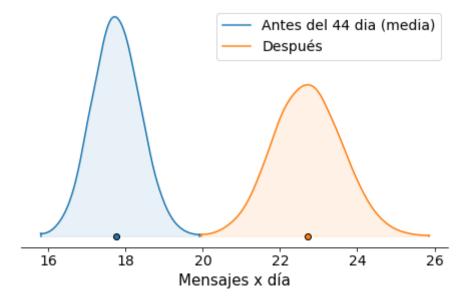
Podemos sacar promedios y calcular intervalos de densidad con las muestras producidas por el algoritmo. El objeto que llamamos trace tiene la info por parámetro.

Hay un salto en msjs x día. ¿Qué pudo pasarle a esta persona en el salto? Especular; o si hay conocimiento del área podríamos lanzar una hipótesis.



Podemos testear directamente hipótesis. Por ejemplo, ¿qué tan seguros estamos que la tasa de mensajes antes y después del día de cambio es diferente?

100% seguros que msj x día (lambdas) difieren en el día del cambio



EJERCICIOS (MENSAJES DE TEXTO POISSON)

1. Calcule el promedio de lambda_antes y lambda_despues.

```
In []: #Escriba su código aqui
```

2. Calcule el incremento porcentual promedio de mensajes por día. pista: Consiga la distribución de la variable incremento porcentual. No haga

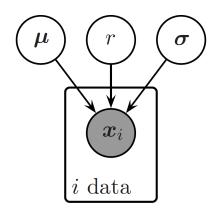
lambda_antes.mean()/lambda_despues.mean(). Es parecido, pero use todas las posteriores. Queremos el promedio de la distribución de incremento porcentual.

```
In []: #Escriba su código aqui
```

3. Calcule el promedio de λ_{antes} dado que $\tau < 45$. Recuerde: las muestras del sampleador están coordinadas. Es decir, busque los indices de τ menores a 45 y use ese indice para seleccionar muestras de λ_{antes} .

In []: #Escriba su código aqui

4. Haga el siguiente modelo gráfico con la sintaxis dot



In []: #Escriba su código aqui

PYMC: DETALLES

En PyMC el modelo "vive" en el objeto pm.Models

Python trata de emular lenguaje natural. El bloque with trabaja con el objeto pm. Model, con el alias model, y ejecuta lo que va dentro del bloque.

Podemos trabajar con el alias

```
In [17]: with model:
          data_plus_one = data_generator + 1
          print(data_plus_one.tag.test_value) #test values: valores iniciales
          print(model.basic_RVs)
          rvs = model.poisson_param.random
          print(np.round(rvs(),2), np.round(rvs(),2), np.round(rvs(),2))

1
          [poisson_param_log__, data_generator]
4.69 1.08 1.35
```

PyMC3 tiene dos tipos de variables: estocásticas y determinísticas.

- Estocásticas: Variable aleatoria. Ejemplos en esta clase: Poisson, DiscreteUniform, and Normal.
- Determinísticas: El nombre lo dice todo. Ejemplos en esta clase: formula cuadratica. Una vez conozco el input x, con seguridad sé el valor.

ESTOCÁSTICAS

Ya hemos usado variables estocásticas. Por ejemplo,

```
mi_variable =
pm.DiscreteUniform("discrete_uni_var", 0, 4)
```

El nombre para Python es *mi_variable*. El nombre para el sampleador es *discrete_uni_var*. Pueden ser diferentes o iguales. Recomendación: iguales.

El 0 (límite bajo) y el 4 (alto) son los parámetros libres de la uniforme. Diferentes distribuciones y parámetros en (http://pymc-devs.github.io/pymc3/api.html) (http://pymc-devs.github.io/pymc3/api.html))

Si hay N variables con distribuciones similares, se puede usar el parámetro shape

```
betas_regresion = pm.Uniform("betas", 0, 1,
shape = N)
```

DETERMINÍSTICAS

Hay dos formas de introducir variables determinísticas en nuestro modelo. Ya vimos una: con funciones del paquete PyMC.

lambda_ es determinística. Usamos la función .switch con dos de las variables estocásticas (VE). En cada iteración, VE se "materializa" y .switch se aplica

Otra forma es con pm. Deterministic.

```
In [19]: def restar(x, y):
    return x - y

with pm.Model() as model_det:
    stochastic_1 = pm.Uniform("U_1", 0, 1)
    stochastic_2 = pm.Uniform("U_2", 0, 1)

    det_1 = pm.Deterministic("Delta", restar(stochastic_1, stochastic_2))
```

La función restar debe poder trabajar con escalares o vectores.

Para una variable determinística, es recomendado primero tratar de usar funciones de PyMC o el backend (PyMC3, Theano; PyMC4, TensorFlow).



Veamos detalles del backend.

Pueden pensar en el backend como el caballo de trabajo. Hace los calculos y manipulaciones de la información.

Se basa en objetos matemáticos llamados tensores (generalización de vectores y matrices)

Acá usamos la operación stack. Agrupa p1 y p2 en una nueva variable p.

Se puede pensar como una lista con dos elementos (o una matriz con dos columnas). Los elementos NO son escalares.

La nueva variable p la podemos pasar a una variable estocástica como probabilidad de dos categorias.

```
In [20]: import theano.tensor as tt

with pm.Model() as theano_test:
    p1 = pm.Uniform("p", 0, 1)
    p2 = 1 - p1
    p = tt.stack([p1, p2])

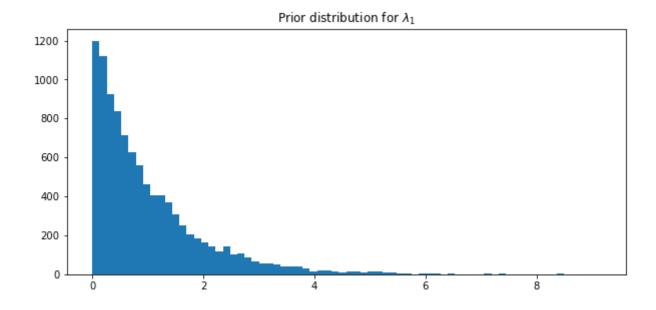
assignment = pm.Categorical("assignment", p)
```

Vamos a usar muchas operaciones del backend en el curso.

DATA/OBSERVACIONES

Hemos definido priors ...

```
In [21]: fig = plt.figure(figsize = (10, 4.5))
    samples = lambda_1.random(size=10000)
    plt.hist(samples, bins=70);
    plt.title("Prior distribution for $\lambda_1$");
```



... ahora veamos likelihoods y data

Es sencillo. Todas las variables estocásticas tienen un parámetro observed. A la que le asignemos la data es el likelihood.

```
In [22]: # Generemos una data
data = np.array([10, 25, 15, 20, 35])
with model:
    obs = pm.Poisson("obs", lambda_, observed=data)
print(obs.tag.test_value)
print(model.free_RVs) #Latentes / no observables
print(model.observed_RVs) #Observables
[10 25 15 20 35]
[lambda_1_log__, lambda_2_log__, tau]
[obs]
```

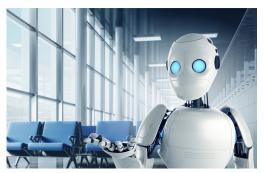
MODELOS BAYESIANOS DE ANÁLISIS DE DATOS

A/B TESTING

Tal vez el diseño experimental más simple y popular. Se busca cuál es mejor opción, A o B.

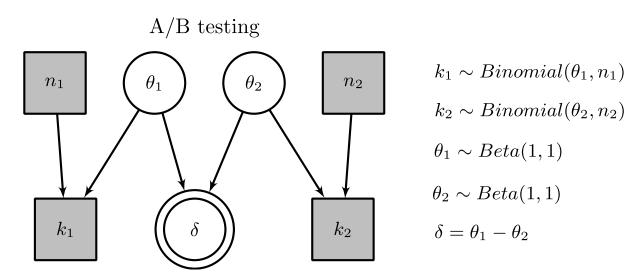
Por ejemplo, ¿qué robot debería atender en un aeropuerto?





Diseño experimental: dos grupos en distintos aeropuertos. El tamaño de cada grupo es n_1 y n_2 con k_1 y k_2 conteos prefiriendo robot 1. Cada aeropuerto tiene una proporción latente θ_1 y θ_2 .

Formulación bayesiana:



```
In [23]: #No conocemos estas cantidades. Son los theta del modelo gráfico.
        true p A = 0.05
        true p B = 0.04
        #Tenemos más datos en un sitio (A). No es problema
        N A = 1500
        N B = 750
        #Generemos datos. Son los k del modelo gráfico.
        datos A = st.bernoulli.rvs(true p A, size=N A)
        datos B = st.bernoulli.rvs(true p B, size=N B)
        print("Obs del sitio A: ", datos_A[:30], "...")
print("Obs del sitio B: ", datos_B[:30], "...")
        print("Promedio A: ", np.mean(datos_A))
print("Promedio B: ", np.mean(datos_B))
        0] ...
```

01 ...

Promedio A: 0.052

Promedio B: 0.037333333333333333

```
In [24]: # Formulemos el modelo pymc3 con priors uniformes para p A & p B
        with pm.Model() as model:
            #Priors
            p_A = pm.Beta("p_A", 1, 1) #Beta(1,1) es uniforme en el rango 0,1
p_B = pm.Beta("p_B", 1, 1)
            #Variable de interés: la diferencia de proporciones.
            delta = pm.Deterministic("delta", p A - p B)
            # Likelihood. Asumimos independencia de los dos sitios.
            obs_A = pm.Bernoulli("obs_A", p_A, observed=datos_A)
            obs B = pm.Bernoulli("obs B", p B, observed=datos B)
            # Llamemos el algoritmo para samplear.
            step = pm.Metropolis() #Tipo de algoritmo.
            nsamples = 20000
            trace = pm.sample(nsamples, step=step)
            burned trace=trace[1000:] #burn-in; importante para Metropolis
        Multiprocess sampling (4 chains in 4 jobs)
        CompoundStep
        >Metropolis: [p B]
        >Metropolis: [p A]
```

100.00% [84000/84000 00:33<00:00 Sampling 4

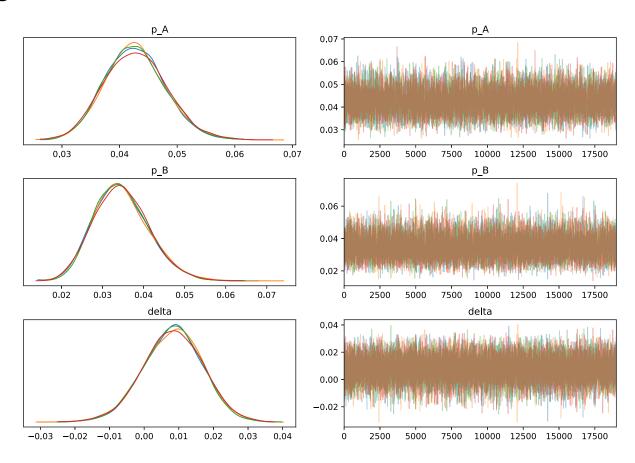
chains, 0 divergences]

Sampling 4 chains for 1_000 tune and 20_000 draw iterations $(4_000 + 80_000$ draws total) took 34 seconds.

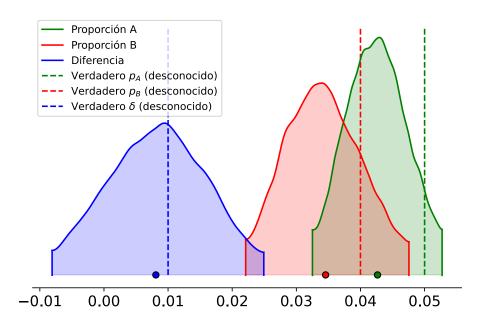
The number of effective samples is smaller than 25% for some parameters.

```
In [25]: #Ahora grafiquemos
        p A samples = burned trace["p A"]
        p B samples = burned trace["p B"]
        delta samples = burned trace["delta"]
        data = az.from pymc3(trace=burned trace, model=model)
        #Convergencia
        az.plot trace(data, figsize = [10,7]);
        plt.savefig("img/4 CB/trace proporcion.svg"); plt.close()
        #Densidades
        az.plot density(
           [p A samples, p B samples, delta samples],
           data labels = ['Proporción A', 'Proporción B', 'Diferencia'],
           shade=.2, colors = ['green', 'red', 'blue'], hdi prob=.95,
        plt.vlines(true p A, 0, 80, linestyle="--",
                 label="Verdadero $p A$ (desconocido)", color = 'green')
        plt.vlines(true p B, 0, 80, linestyle="--",
                 label="Verdadero $p B$ (desconocido)", color = 'red')
        plt.vlines(true p A-true p B, 0, 80, linestyle="--",
                 label="Verdadero $\delta$ (desconocido)", color = blue')
        plt.legend()
        plt.title('')
        plt.savefig("img/4 CB/density proporcion.svg"); plt.close()
```

Convergencia



Densidades (todas las cadenas)



¿Por qué es más "gorda" la distribución de B? ¿Por qué tenemos menos certeza? ¿Qué tiene que ver los datos?

¿Son esas probabilidades suficientes para decidir? Debatir

Probabilidad proporcion A menor a B: 0.064 Probabilidad proporcion A mayor a B: 0.936 Acabamos de comparar dos proporciones con técnicas bayesianas.

El tamaño muestral se incluye automaticamente en el análisis: menor certeza para p_B .

Podemos hacer las preguntas que queramos de las muestras e.g. moda, areas bajo la curva, etc.

OTRO EJEMPLO BINARIO: MENTIRAS

Situación: un investigador le interesa la tasa de trampa en una universidad

Solución 1:

- preguntar a los estudiantes un si o un no (método directo)
 - problema: privacidad, desconfianza en promesa de no castigo.

Solución 2:

- lanzar moneda en privado.
 - Si cae cara, escriba la verdad.
 - Si cae sello vuelva lanzar. Escriba:
 - "sí hago trampa" si cae cara,
 - ∘ "no hago trampa" si cae sello.

Es privado. El experimentador no sabe la fuente de las respuestas. Pueden ser la verdad o el resultado del segundo lanzamiento.

¿Qué distribución podemos usar para data binaria? Binomial

$$P(X = k|p, N) = \binom{N}{k} p^k (1-p)^{N-k}$$

k: éxitos

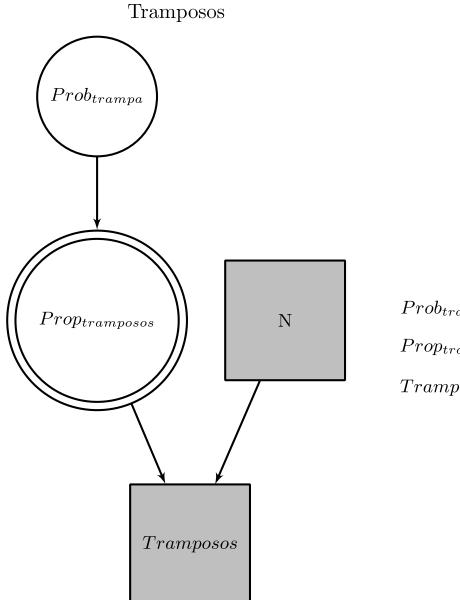
N: intentos

p: probabilidad éxito

En lenguaje natural:

Si conozco la probabilidad del evento (cara) y el número de intentos (veces que se lanza la moneda), sé la probabilidad de número de éxitos.

¡A modelar!



 $Prob_{trampa} \sim Uniforme(0,1)$

 $Prop_{tramposos} = 0.5 * Prob_{trampa} + 0.5^{2}$

 $Tramposos \sim Binomial(N, Prop_{tramposos})$

Ahora, definamos un likelihood binomial para la data.

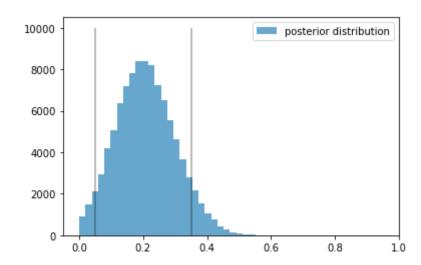
Multiprocess sampling (4 chains in 4 jobs)
Metropolis: [prob trampa]

100.00% [164000/164000 00:51<00:00 Sampling 4

chains, 0 divergences]

Sampling 4 chains for 1_000 tune and 40_000 draw iterations $(4_000 + 160_000$ d raws total) took 53 seconds.

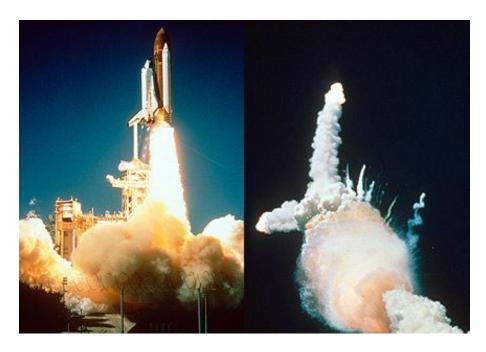
The number of effective samples is smaller than 25% for some parameters.



PRO TIP

Podemos crear un modelo con muchas variables con un for loop. Hay que inicializar un array con tipo de dato objeto

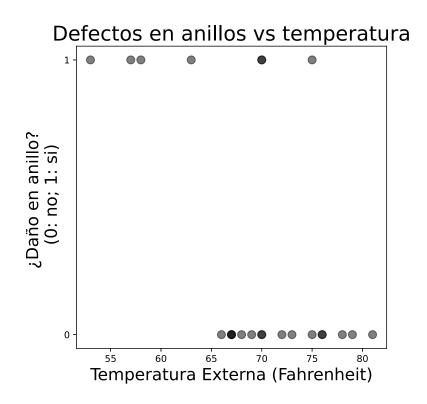
OTRO EJEMPLO: DESASTRE DEL CHALLENGER



Potencial razón:

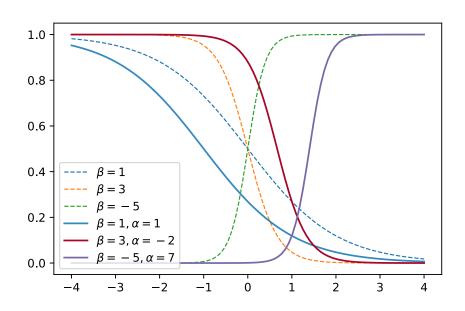
Daño de un anillo en una conexión de uno de los impulsores de un cohete (i.e. se daño una pieza)

¿Qué relación vemos entre temperatura ambiental y daño del anillo?

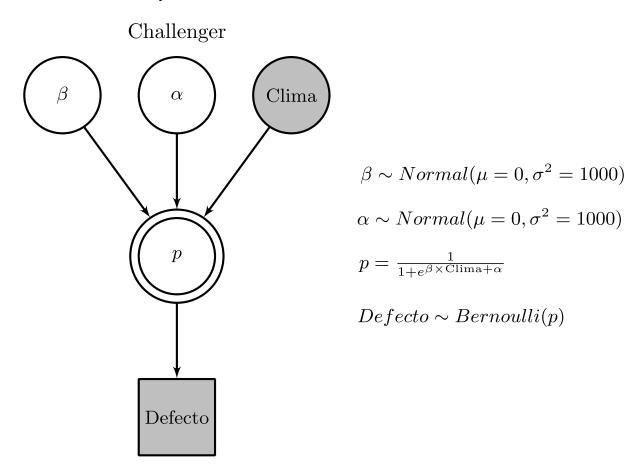


Podemos modelar variables binarias con la función logística

$$p(t) = \frac{1}{1 + e^{\beta t + \alpha}}$$

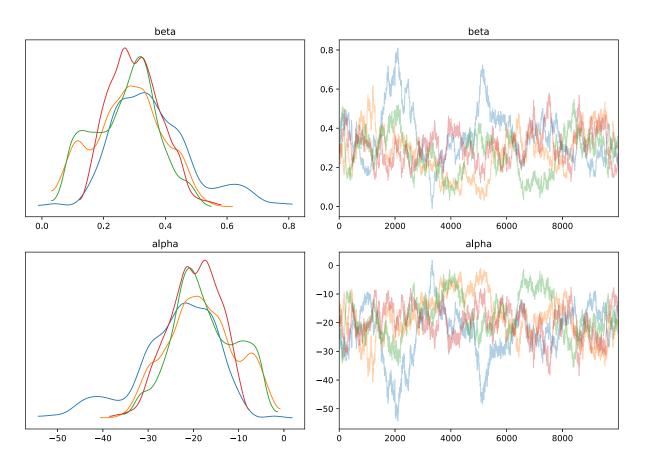


Este es el modelo bayesiano

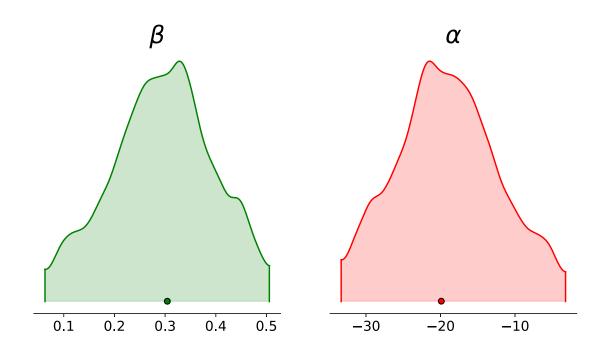


```
In [ ]: | temperature = challenger data[:, 0]
       D = challenger data[:, 1] # defecto (0 no, 1 si)
       with pm.Model() as model:
          #Caveat computacional: beta y alpha empiezan en cero para evitar
          # que p se vaya a las esquinas 0 o 1 desde el comienzo
          beta = pm.Normal("beta", mu=0, tau=0.001, testval=0)
          alpha = pm.Normal("alpha", mu=0, tau=0.001, testval=0)
          p = pm.Deterministic("p",
                            1.0/(1. + tt.exp(beta*temperature + alpha)))
          defecto = pm.Bernoulli("defecto", p, observed=D)
          # Sampleo
          start = pm.find MAP() #Max. a posteriori con valores iniciales
          step = pm.Metropolis()
          trace = pm.sample(120000, step=step, start=start)
          burned trace = trace[100000::2]
```

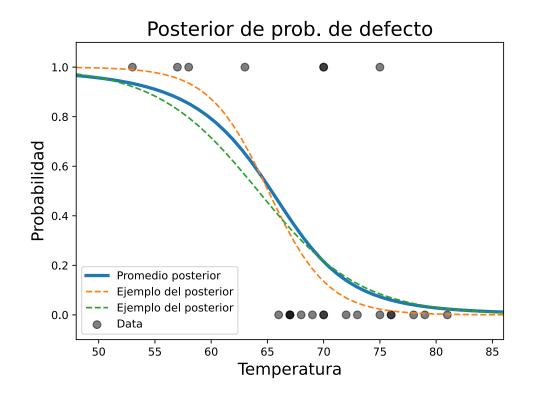
El modelo combina relativamente bien



Notable que β , la importancia de la temperatura, no incluya cero. La temperatura sí jugó un rol.



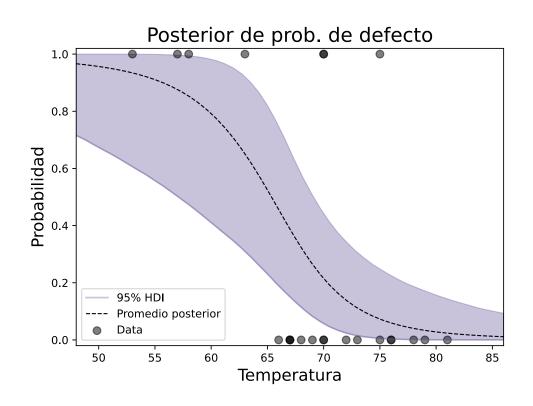
Posterior: promedio y algunos ejemplos. Generamos muchas versiones de la hipótesis logística.



Podemos incluso generar intervalos de certidumbre

```
In []: #95 HDI
qs = mquantiles(p_t, [0.025, 0.975], axis=0)
```

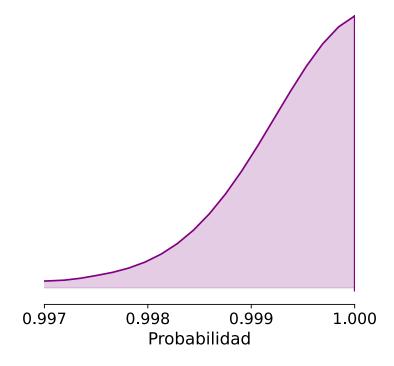
Podemos saber donde tenemos más incertidumbre: temperaturas entre 50 y 70. Enfocarnos en recoger datos en esa zonas.



Podemos poner probabilidades para la temperatura que hizo el día del desastre: 31 Fahrenheit

```
In [ ]: prob_31 = logistic(31, beta_samples, alpha_samples)
```

Probabilidad de defecto en el anillo O, dado t = 31 Fahrenheit



EN RESUMEN ...

Usamos PyMC para tomar muestras.

La sintaxis básica es

with pm.Model() as ELNOMBREQUEQUIERA: distribuciones y sampleador