

Bayesova statistika - zapiski s predavanj prof. Smrekarja

Tomaž Poljanšek

študijsko leto 2023/24

Kazalo

1	Uvod	1
1.1	Elementarna Bayesova statistika	1
1.2	Proučevani slučajni vektor (vzročni) parametrični model . . .	2
1.3	Apriorna in „robna“ porazdelitev	3
1.4	Disperzija aposteriornih porazdelitev	6
2	Enoparametrični modeli	10
2.1	Beta-binomski model	10
2.2	Poissonov model (gama-poissonov model)	10
2.3	Normalni model z znano disperzijo	11
2.4	Ekspontentne družine porazdelitev	13
2.5	Neinformirane apriorne porazdelitve	15
3	Monte-Carlo integracija in metode vzorčenja	18
3.1	Klasična integracija Monte-Carlo	19
3.2	Simulacija vzorčenja z inverzno kumulativno porazdelitveno funkcijo	20
3.3	Metoda sprejmi ali zavrni (A/R)	21
3.4	Metode MCMC (Monte Carlo z markovskimi verigami)	23

Seznam uporabljenih kratic

kratica	pomen
s.v.	slučajni vektor
B	binomska porazdelitev
NEP	neodvisen in enako porazdeljen
s.s.	slučajna spremenljivka
p.v.	pričakovana vrednost
AKI	aposteriorni kredibilnostni interval
BF	Bayesova formula
s.g.	skoraj gotovo
k.p.f.	kumulativna porazdelitvena funkcija
A/R	accept or reject
M.v.	Markovska veriga
EZVŠ	ergodični zakon velikih števil
ECLI	ergodični CLI

Poglavje 1

Uvod

Bayesova statistika je formalni okvir za „osveževanje“ vedenja/znanja o porazdelitvi nekega slučajnega vektorja.

Zgled. 1000, \approx 400Č \rightarrow 600B (apriorno znanje).

Izvedemo (statistični) poskus: izvlečemo 10, dobimo 6 črnih in 4 bele

1.1 Elementarna Bayesova statistika

Privzamemo popoln sistem dogodkov $E_1, E_2 \dots E_m : E_i \cap E_j = \emptyset$ za $i \neq j$ in $E_1 \cup E_2 \cup \dots \cup E_m = \Omega$.

Če imamo še neki dogodek A , velja t.i. zakon o popolni verjetnosti

$P(A) = \sum_{i=1}^m P(A | E_i) \cdot P(E_i)$ (interpretacija: 2-fazni poskus).

V Bayesovem okviru nas zanimajo $P(E_j | A)$ (verjetnost, da se je v „1. fazi“ zgodil E_j , če se je „2. fazi“ zgodil A). Ker je

$$P(E_j | A) = \frac{P(E_j \cap A)}{P(A)}$$

je

$$P(E_j | A) = \frac{P(A | E_j) \cdot P(E_j)}{P(A)} \quad \text{- elementarna pogojna verjetnost}$$

oziroma

$$P(E_j | A) = \frac{P(A | E_j) \cdot P(E_j)}{\sum_{i=1}^m P(A | E_i) \cdot P(E_i)} \quad \text{- elementarna Bayesova formula.}$$

Nadaljujemo zgled. V Bayesovi statistiki predhodno („apriorno“) vedenje formaliziramo kot realizacijo slučajnega eksperimenta. V našem primeru vpeljemo funkcijo, da smo število črnih frnikul θ (- realizacija) dobili kot rezultat slučajne spremenljivke $\Theta \in \{0, 1, 2 \dots 1000\}$.

Informacijo $\theta \approx 400$ zakodiramo kot $E(\Theta) = 400$.

$$\begin{aligned} \text{Privzamemo (kar!) } \Theta &\sim B\left(1000, \frac{4}{10}\right) \\ \Rightarrow P(\Theta = \theta) &= \binom{1000}{\theta} \left(\frac{4}{10}\right)^\theta \left(1 - \frac{4}{10}\right)^{1000-\theta} \\ P(k \text{ črnih od } 10 \text{ izvlečenih} | \Theta = \theta) &= \frac{\binom{\theta}{k} \binom{1000-\theta}{10-k}}{\binom{1000}{k}} \quad (*) \end{aligned}$$

(*) pri omejitvah (k omejimo).

Osvežena porazdelitev - novo vedenje

$$\begin{aligned} P(\Theta = \theta | 6 \text{ črnih od } 10 \text{ izvlečenih}) &= \\ \frac{P(6 \text{ črnih od } 10 \text{ izvlečenih} | \Theta = \theta) \cdot P(B(1000, \frac{4}{10}) = \theta)}{\sum_{i=0}^{1000} P(6 \text{ črnih od } 10 \text{ izvlečenih} | \Theta = i) \cdot P(B(1000, \frac{4}{10}) = i)} &= i \end{aligned}$$

Pravimo ji aposteriorna porazdelitev.

1.2 Proučevani slučajni vektor (vzročni) parametrični model

Naj bo $X = (X_1, X_2 \dots X_n) \in \mathbb{R}^n$ preučevani slučajni vektor. Pogosto so neodvisni in enako porazdeljeni (NEP) realizacija danega slučajnega eksperimenta. S pomočjo statistike lahko „ocenjujemo“ porazdelitev slučajnega vektorja X . Zanj privzamemo, da pripada nekemu modelu, t.j. neki množici dopustnih rešitev. Privzamemo, da je ta množica parametrizirana s parametričnim prostorom $\Theta \subset \mathbb{R}^r$. Tu si mislimo, da parameter $\theta \in \Theta$ dobimo kot realizacijo slučajnega vektorja (s.v.) Θ z vrednostmi v Θ (večinoma $r \geq 2$).

Porazelitvi s.v. X_i pogojno na $\Theta = \theta$ pravimo vzorčna porazdelitev. Privzeli bomo, da imamo gostote $f(x | \theta)$ ali verjetnostne funkcije

$$P(X = x | \theta) = f(x | \theta),$$

torej da velja

$$P(X \in B | \Theta = \theta) = \int_B f(x | \theta) d\nu(x)$$

(v Lebesgueovi meri) ali

$$P(X \in B | \Theta = \theta) = \sum_{x \in B} f(x | \theta).$$

Modelu pogojnih porazdelitev $(X | \Theta = \theta)$ pravimo vzorčni model.

1.3 Apriorna in „robna“ porazdelitev

Porazdelitvi fiktivnega slučajnega vektorja Θ pravimo apriorna porazdelitev, brezpogojni (robni) porazdelitveni slučajnega vektorja X pa pravimo „robna“ porazdelitev

(*) v resnici sta obe porazdelitvi robni porazdelitvi družne porazdelitve vektorja (X, Θ) z vrednostmi v \mathbb{R}^{n+r} .

Zgled. Ocenjujemo Bernoullijevo porazdelitev. Predhodno vedenje je podano z apriorno prazdelitvijo na $(0,1)$; mislimo si, da je p realizacija slučajne spremenljivke (s.s.) Π z vrednostmi v $(0,1)$. Možnosti:

- nimamo apriornega mnenja o (dejanskem) p : tedaj bi (morda) vzeli zvezno porazdelitev z gostoto enakomerna porazdelitve,
- smo „zelo“ prepričani, da je (dejanski) $p \approx \frac{1}{2}$.

Recimo, da je $f(p)$ gostota apriorne porazdelitve. Tedaj so apriorne verjetnosti

$$P(\Pi \in (a,b)) = \int_a^b f(p) dp$$

in apriorna pričakovana vrednost

$$E(\Pi) = \int_0^1 p f(p) dp.$$

Pripomnimo, da pri $\Pi \sim U(0,1)$ dobimo $E(U(0,1)) = \frac{1}{2}$.

Privzemimo, da smo „vzorčili“ p , potem pa „neodvisno“ n -krat vržemo p -kovanec ($P(\text{cifra} = p)$), gre za slučajne spremenljivke $X_1, X_2 \dots X_n$, za katere je $(X_i \mid \Pi = p) \sim \text{Bernoulli}(p)$ in so $X_1 \dots X_n$ neodvisne pogojno na p . To ne pomeni, da do $X_1 \dots X_n$ brezpogojno neodvisne.

Za $i \neq j$ je

$$\begin{aligned} P(X_i = 1 \wedge X_j = 1) &= \int_0^1 P(X_i = 1 \wedge X_j = 1 \mid \Pi = p) f(p) dp = \\ &\stackrel{\text{pogojno neodvisne}}{=} \int_0^1 P(X_i = 1 \mid \Pi = p) P(X_j = 1 \mid \Pi = p) f(p) dp = \\ &= \int_0^1 p^2 f(p) dp = \\ &= E(\Pi^2). \end{aligned}$$

Ker je $P(X_i = 1) = \int_0^1 P(X_i = 1 \mid p) f(p) dp = \int_0^1 p f(p) dp = E(\Pi)$, je

$$\text{Cov}(X_i, X_j) = E(\Pi^2) - E(\Pi)^2 = D(\Pi)$$

za $i \neq j$, torej so X_i brezpogojno neodvisne $\iff \Pi = \text{konstantna}$ (slučajna spremenljivka).

Tvorimo $X = X_1 + \dots + X_n \in \{0, 1 \dots n\}$. To je „preučevana“ slučajna spremenljivka. Velja $(X \mid \Pi = p) \sim B(n, p)$. To je vzorčna porazdelitev; vzročni model je parametriziran s prostorom parametrov $(0,1) = \Theta$. Robna porazdelitev je podana z verjetnostmi

$$\begin{aligned} P(X = k) &= \int_0^1 P(X = k \mid p) f(p) dp = \\ &= \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} f(p) dp. \end{aligned}$$

Recimo, da „opazimo“ $X = k$. Aposteriorna porazdelitev (osveženo vedenje o p) je sestavljeno iz verjetnosti

$$\begin{aligned} P(X \in (a,b) \mid X = k) &= \frac{P(X = k \wedge \Pi \in (a,b))}{P(X = k)} = \\ &= \frac{\int_0^1 P(X = k \wedge \Pi \in (a,b) \mid \Pi = p) f(p) dp}{P(X = k)} = \\ &= \int_a^b \frac{P(X = k \mid \Pi = p)}{P(X = k)} f(p) dp. \end{aligned}$$

Opazimo, da ima aposteriorna porazdelitev $(\Pi \mid X = k)$ gostoto

$$f_{(\pi|X)}(p \mid k) = \frac{P(X = k \mid p)f(p)}{P(X = k)}.$$

Zgornji formuli pravimo Bayesova formula.

Za številsko oceno za p bi lahko vzeli pričakovano vrednost aposteriorne porazdelitve

$$\hat{p} = E(\Pi \mid X = k) = \int_0^1 p \cdot f(p \mid k) dp.$$

Pravimo ji aposteriorna pričakovana vrednost.

Posebej priročna družina apriornih porazdelitev (za binomske vzorčne porazdelitve) je t.i. $Beta = \{Beta(a, b) \mid a, b \in (0, \infty)\}$

$$f_{Beta(a,b)}(p) = \frac{1}{B(a,b)} p^{a-1} (1-p)^{b-1} 1_{(0,1)}(p)$$

(tu je $B(a, b) = \int_0^1 p^{a-1} (1-p)^{b-1} dp$).

$$E(Beta(a, b)) = \frac{a}{a+b}$$

$$D(Beta(a, b)) = \frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)}.$$

$D(Beta(a, b))$ predstavlja „težo“ apriornega prepričanja; večji - manj sigurni smo.

$$E(Beta(a, b)) = 0.7.$$

Aposteriorna porazdelitev ima gostoto (če je $f(p) = f_{Beta(a,b)}(p)$)

$$\begin{aligned} f(p \mid k) &= \frac{\binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \cdot \frac{1}{B(a,b)} p^{a-1} (1-p)^{b-1}}{P(X = k)} = \\ &= \text{konst.} \cdot p^{a+k-1} (1-p)^{b+n-k-1}. \end{aligned}$$

Vidimo, da je $(\Pi \mid X = k) \sim Beta(a+k, b+n-k)$.

Aposteriorna pričakovana vrednost (p.v.) je

$$\begin{aligned} \frac{a+k}{a+b+n} &= \frac{(a+b) \frac{a}{a+b} + n \frac{k}{n}}{a+b+n} = \\ &= \frac{a+b}{a+b+n} \cdot \frac{a}{a+b} + \frac{n}{a+b+n} \cdot \frac{k}{n}. \end{aligned}$$

Tukaj je

- $\frac{a}{a+b}$ apriorna ocena,
- $\frac{k}{n}$ vzorčna ocena in
- $\frac{a+b}{a+b+n}$ in $\frac{n}{a+b+n}$ faktorja pri konveksni kombinaciji obeh ocen.

Vzorec velik \rightarrow prevlada mnenje vzorca.

1.4 Disperzija aposteriornih porazdelitev

Gre pravzaprav za disperzijo pogojnih porazdelitev. Naj bosta $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ in $Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ in naj ima (X, Y) gostoto $f_{(X,Y)}$ glede na $\mu \times \nu$. Sledita gostoti $f_X(x) = \int f_{(X,Y)}(x, y) d\nu(y)$ za X glede na μ in $f_Y(y) = \int f_{(X,Y)}(x, y) d\mu(x)$ za Y glede na ν . Dalje definiramo pogojni porazdelitvi ($Y \mid X = x$) in ($X \mid Y = y$) preko gostot

$$f_{(Y|X)}(y \mid x) = \frac{f_{(X,Y)}(x, y)}{f_X(x)}$$

glede na ν : gostota v $X \rightarrow \mu$ in simetrično za $f_{(X|Y)}(x \mid y)$.

$P(Y \in B \mid X = x) = \int_B f_{(Y|X)}(y \mid x) d\nu(y)$ - porazdelitev, opremljena z gostoto.

Definicija 1.4.1.

$$E(Y \mid X = x) = \int y f_{(Y|X)}(y \mid x) d\nu(y).$$

y lahko zamenjamo s $h(y)$.

Pišemo $E(Y \mid X = x) = u(X)$ - h je identiteta.

Definicija 1.4.2.

$$E(Y \mid X) = u(X) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n.$$

Slučajni vektor \rightarrow pogojna pričakovana vrednost,

oz.

$$E(Y \mid X)(\omega) = u(X(\omega)) = E(Y \mid X = X(\omega)).$$

$E(Y \mid X)(\omega)$: funkcija na X , kompozitum.

$X(\omega)$: vrednost.

Definicija 1.4.3. Pogojno varianco slučajnega vektorja Y , pogojno na $X = x$ definiramo kot varianco pogojne porazdelitve ($Y \mid X = x$), t.j.

$$E((Y - u(X))(Y - u(X))^T \mid X = x) =: \text{Var}(Y \mid X = x).$$

Ker je E aditivna, velja

$$E((Y - u(X))(Y - u(X))^T \mid X = x) = E(YY^T \mid X = x) - u(X)u(X)^T =: v(X).$$

$v(X)$ je $n \times n$ matrika.

Definicija 1.4.4. Pogojna varianca slučajnega vektorja Y pogojno na slučajni vektor X je

$$\text{Var}(Y \mid X) = v(X).$$

Zadnjič: beta-binomski model: proučevana s.s. T ; vzorčne porazdelitve ($T \mid p$) $\sim B(n, p)$ za $p \in \Theta = (0, 1)$. Če je apriorna porazdelitev $Beta(a, b)$, je aposteriorna pri $T = k$ enaka $Beta(a + k, b + n - k)$.

Disperzija porazdelitve ($\Pi \mid T = k$) je enaka $\frac{(a-k)(b+n-k)}{(a+b+k)^2(a+b+n+1)}$ (in je odvisna od realizacije k).

DN: za katere k je $D(\text{aposteriorne}) > D(\text{apriorne})$.

Izkaže se, da je za nekatere k manjša, za nekatere k pa večja od disperzije apriorne porazdelitve. Vendar pa velja t.i. „zakon popolne porazdelitve“

$$\text{Var}(\Theta) = E(\text{Var}(\Theta \mid X)) + \text{Var}(E(\Theta \mid X)),$$

kjer sta seveda

$$E(\text{Var}(\Theta \mid X)) \geq 0 \text{ in}$$

$$\text{Var}(E(\Theta \mid X)) \geq 0,$$

(X vzorčni), iz katerega sledi $E(\text{Var}(\Pi \mid X)) \leq \text{Var}(\Theta)$ (apriori). V konkretnem primeru je

$$E(\text{Var}(\Pi \mid T)) \leq \text{Var}(\Pi).$$

Opomba.

$$E(Var(\Pi | T)) = \sum_{k=0}^n Var(\Pi | k) \cdot P(T = k);$$

T vzorčimo, T je robna porazdelitev (binomska pogojna?).

(V povprečju aposteriorna varianca boljša.)

1.4.1 Aposteriorni kredibilnostni interval

(Bayesova različica intervala zaupanja).

V konkretnem zgledu „iščemo“ funkciji realizacije $L(k), U(k)$, za kateri velja

$$\forall k \ P(L(k) \leq p \leq U(k)) \geq 1 - \alpha.$$

p je slučajen.

Ker za $\Pi \sim Beta(a, b)$, vemo $(\Pi | T = k) \sim Beta(a + k, b + n - k)$, lahko izberemo

$$\begin{aligned} L(k) &= F_{Beta(a+k, b+n-k)}^{-1} \left(\frac{\alpha}{2} \right), \\ U(k) &= F_{Beta(a+k, b+n-k)}^{-1} \left(1 - \frac{\alpha}{2} \right) \end{aligned}$$

in v aposteriori kredibilnostni interval (AKI) dobimo $= 1 - \alpha$. Taki konstrukciji pravimo centralni kredibilnostni interval. V praksi pogosto uporabljamo tudi t.i. kredibilnostni interval največje gostote, kjer zahtevamo

$$f_{(\Pi|T=k)}(L(k)) = f_{(\Pi|T=k)}(U(k)).$$

To ima smisel za unimodalne aposteriorne porazdelitve.

1.4.2 Splošne oznake

X - proučevalni vektor (z vrednostmi v \mathbb{R}^n).

x - realizacija vektorja $X(x \in \mathbb{R}^n)$.

$\Theta \subset \mathbb{R}^n$ - parametrični prostor.

Θ - (fiktivni) vektor z realizacijo $\theta \in \Theta$.

$P = \{P_\theta = (X \mid \Pi = \theta) \mid \theta \in \Theta\}$ - družina vzorčnih porazdelitev (vzorčni model).

$f(x \mid \theta)$ - gostota (ali verjetnostna funkcija) porazdelitve $(X \mid \Theta = \theta)$ (izračunano v x).

Opomba. $f(x \mid \theta) = f_{X|\Theta}(x \mid \theta)$ - spuščamo.

V istem smislu gostota (ali verjetnostna funkcija) apriorne porazdelitve. Za aposteriorno gostoto (ali verjetnostno funkcijo) velja Bayesova formula (BF)

$$f(\theta \mid x) = \frac{f(x \mid \theta)f(\theta)}{f(x)} \propto f(x \mid \theta)f(\theta).$$

$f(x)$ je normalizacijski faktor.

Poglavje 2

Enoparametrični modeli

2.1 Beta-binomski model

Uvodni beta-binomski model je enoparametričen.

2.2 Poissonov model (gama-poissonov model)

Naj bo parametrični prostor $\Theta = (0, \infty)$ in naj bo $X = (X_1 \dots X_n)$, kjer so $(X_i \mid \lambda) \stackrel{\text{NEP}}{\sim} \text{Poisson}(\lambda)$. Za proučevano s.s. vzamemo $T = \sum_{i=1}^n X_i$; seveda je $(T \mid \lambda) \sim \text{Poisson}(n\lambda)$.

Privzemimo apriorno porazdelitev

$$f(\lambda) = f_{\text{Gama}(a,b)}(\lambda) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} \lambda^{a-1} e^{-b\lambda} \cdot 1_{(0,\infty)}(\lambda).$$

$(0,\infty)$ je parametrični prostor, a in b sta pozitivni konstanti.

Izkaže se:

$$\begin{aligned} E(\text{Gama}(a,b)) &= \frac{a}{b}, \\ D(\text{Gama}(a,b)) &= \frac{a}{b^2}. \end{aligned}$$

DN.

$$P(T = k \mid \lambda) = e^{-n\lambda} \frac{(n\lambda)^k}{k!}.$$

Bayesova formula se glasi

$$\begin{aligned} f(\lambda \mid T = k) &\propto P(T = k \mid \lambda) \cdot f(\lambda) \\ &\propto e^{-n\lambda} \lambda^k \cdot \lambda^{a-1} e^{-b\lambda} \\ &= \lambda^{a+k-1} e^{-(b+n)\lambda} \end{aligned}$$

$$\implies (\Lambda \mid T = k) \sim \text{Gama}(a + k, b + n).$$

Definicija 2.2.1. Naj bo podan vzorčni model P in naj bo K družina porazdelitev na parametričnem prostoru Θ . Pravimo, da je K konjugirana k P , če vedno velja

$$f(\theta \mid x) \in K \implies \forall x : (\Theta \mid X = x) \in K.$$

$f(\theta \mid x)$ je porazdelitev na Θ . Rečemo lahko tudi, da sta P in K konjugiran par.

2.3 Normalni model z znano disperzijo

Tu je σ^2 znana disperzija, vzorec $X = (X_1 \dots X_n)$ pa zadošča $(X_i \mid \mu) \stackrel{\text{NEP}}{\sim} N(\mu, \sigma^2)$, kjer je $\mu \in \Theta = \mathbb{R}$. S katero porazdelitvijo bi zakodirali apriorno informacijo?

Recimo, da je apriorno mnenje: $\mu \approx \mu_0$. Vzemimo za apriorno porazdelitev kar $N(\mu_0, \tau_0^2)$.

Vzorčna:

$$\begin{aligned} f(x \mid \mu) &= f(x_1 \dots x_n \mid \mu) \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}. \end{aligned}$$

Pripomnimo, da je

$$\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 = n \cdot (\mu - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2,$$

kjer je $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$. (Vzorčna: jih je več, apriorna: ena.)

Apriorna:

$$f(\mu) = (2\pi\sigma_0^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\mu-\mu_0)^2}.$$

Opazimo, da je

$$f(\mu) = e^{\text{kvadratni polinom}(\mu)}.$$

Velja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a\mu^2+b\mu+c} d\mu < \infty \iff a < 0.$$

DN (kako se narobe lotiti): drugače koliko apriorna gostota (integral robne gostote, Bayesova formula).

V tem duhu

$$f(\mu | x) \propto e^{-\frac{1}{2} \left(\left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2} \right) \mu^2 - 2 \left(\frac{n\bar{x}}{\sigma^2} + \frac{\mu_0}{\tau_0^2} \right) \mu \right)}.$$

Prepoznamo kot normalno porazdelitev. Označimo jo $N(\mu_1, \tau_1^2)$.

Velja

$$f_{N(\mu_1, \tau_1^2)}(\mu) \propto e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tau_1^2} \mu^2 - 2 \frac{\mu_1}{\tau_1^2} \mu \right)}.$$

Sledi

$$\begin{aligned} [\mu^2] : \frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2} &= \frac{1}{\tau_1^2} \text{ in} \\ [\mu] : \frac{n\bar{x}}{\sigma^2} + \frac{\mu_0}{\tau_0^2} &= \frac{\mu_1}{\tau_1^2}. \end{aligned}$$

Tukaj je:

- $\frac{n}{\sigma^2}$ vzorčna preciznost,
- $\frac{1}{\tau_0^2}$ apriorna preciznost,
- $\frac{1}{\tau_1^2}$ aposteriorna preciznost,
- preciznosti se pri seštevanju neodvisnih normalnih porazdelitev seštevajo.

Preciznost je $\frac{1}{D(\cdot)}$.

To pomeni

$$\tau_1^2 = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2} \right)^{-1}$$

in

$$\begin{aligned}
 \mu_1^2 &= \tau_1^2 \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2} \right) \\
 &= \frac{\left(\frac{n}{\sigma^2} \bar{x} + \frac{1}{\tau_0^2} \mu_0 \right) \cdot \frac{\tau_0^2 \sigma^2}{n}}{\left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_1^2} \right) \cdot \frac{\tau_0^2 \sigma^2}{n}} \\
 &= \frac{\tau_0^2 \bar{x} + \frac{\sigma^2 \mu_0}{n}}{\tau_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} \\
 &= \frac{\tau_0^2}{\tau_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} \bar{x} + \frac{\frac{\sigma^2}{n}}{\tau_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} \mu_0
 \end{aligned}$$

2.4 Eksponentne družine porazdelitev

Vzorčni model pripada eksponentni družini porazdelitev, če velja

$$\begin{aligned}
 f(x \mid \theta) &= c(\theta) \cdot e^{\langle Q(\theta), T(x) \rangle} \cdot h(x) \\
 &= e^{-\psi(\theta)} e^{\langle Q(\theta), T(x) \rangle} \cdot h(x),
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

kjer je

$$\begin{aligned}
 \tau &: \Theta \rightarrow \mathbb{R} \\
 T &: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \\
 Q &: \Theta \rightarrow \mathbb{R}^m \text{ in} \\
 h &: \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty].
 \end{aligned}$$

Zgled.

① NEP Bernoullijev model:

$$\begin{aligned}
 (X_i \mid p) &\stackrel{\text{NEP}}{\sim} \text{Bernoulli}(p) = B(1, p) \\
 f(x_1 \dots x_n \mid p) &= p^{\sum_{i=1}^n x_i} (1-p)^{n-\sum_{i=1}^n x_i} \cdot 1_{\{0,1\}^n}(x_1 \dots x_n) \\
 f(x_1 \dots x_n \mid p) &= P(X_1 = x_1 \dots X_n = x_n \mid p)
 \end{aligned}$$

Preoblikujemo v:

$$(1-p)^n \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\sum_{i=1}^n x_i} \cdot 1_{\{0,1\}^n}(x_1 \dots x_n) = e^{\ln(\frac{p}{1-p}) \sum_{i=1}^n x_i} \cdot 1_{\{0,1\}^n}(x_1 \dots x_n).$$

② Normalni model z znano σ^2 :

$$\Theta = \mathbb{R}, \mu \in \mathbb{R}$$

$$\begin{aligned} (EXP) f(x_1 \dots x_n \mid \mu) &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2} \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^2 + \frac{\mu}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i - \frac{n\mu^2}{2\sigma^2}} \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{\frac{\mu}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i} \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^2}. \end{aligned}$$

Tukaj je

$$\begin{aligned} c(\mu) &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}} \\ Q(\mu) &= e^{-\frac{\mu}{\sigma^2}} \\ T(x) &= e^{\sum_{i=1}^n x_i} \\ h(x) &= e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^2} \end{aligned}$$

③ Normalni model z neznano disperzijo:

$$\Theta = \mathbb{R} \times (0, \infty) = (\mu, \sigma^2)$$

Zapišemo

$$f(x_1 \dots x_n \mid \mu, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}} e^{\langle (\frac{\mu}{\sigma^2}, -\frac{1}{2\sigma^2}), (\sum_{i=1}^n x_i, \sum_{i=1}^n x_i^2) \rangle}.$$

Tukaj je

$$\begin{aligned} c(\mu) &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}} \\ Q(\mu) &= \left(\frac{\mu}{\sigma^2}, -\frac{1}{2\sigma^2} \right) \\ T(x) &= \left(\sum_{i=1}^n x_i, \sum_{i=1}^n x_i^2 \right). \end{aligned}$$

$m = 2$.

Preimenujemo (EXP) in definirajmo apriorne gostote

$$f(\eta, v) = \frac{1}{K(\eta, v)} \cdot e^{\langle Q(\theta), \eta \rangle - v\psi(\theta)}. \quad (2.2)$$

Tukaj je $\mu \in \mathbb{R}^n$ in $v \in \mathbb{R}$.

(Upoštevati moramo morebitne omejitve zaradi zahteve $\int F = 1$).

Seveda je

$$K(\eta, v) = \int e^{\langle Q(\theta), v \rangle - v\psi(\theta)} d\theta.$$

Aposteriorna gostota?

$$f(\theta \mid x) \propto e^{-(v+1)\psi(\theta) + \langle Q(\theta), \eta + T(x) \rangle}$$

Tukaj smo zmožili nekonstantne faktorje iz 2.1 in 2.2.

Vidimo:

$$f(\theta \mid x) = f_{(\eta+T(x), v+1)}(\theta).$$

Gre za konjugirano družino.

Zgled. Aplicirajmo to konstrukcijo na modelu ②. Dobimo konjugirano družino

$$f_{(\eta, v)}(\mu) \propto e^{\frac{\mu}{\sigma^2 \eta} - \tau \frac{n\mu^2}{2\sigma^2}},$$

kjer sta $\eta, v \in \mathbb{R}$.

Vidimo, da mora biti $v > 0$.

DN: $\eta, v \rightarrow \mu_0, \tau_0^2$ - reparametrizacija.

2.5 Neinformirane apriorne porazdelitve

Neinformirana apriorna porazdelitev je taka, ki „ne vsebuje predhodne informacije“ o parametru. Tovrsten koncept je šibko-informativna apriorna porazdelitev. Izkaže se, da s statistični praksi (tudi v aplikacija frekventistične statistike) potrebujemo ta koncept.

Zgled. V Beta-binomskem modelu (..) je Laplace predlagal $U(0,1) = \text{Beta}(1,1)$ kot neinformirano porazdelitev.

Učinek reparametrizacije

Zgled. Binomski vzorčni model: $f(k | p) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$, $p \in (0,1)$.

Reparametrizirajmo s parametrom $q = \ln\left(\frac{p}{1-p}\right) = \text{logit}(p)$. Dobimo

$$\begin{aligned}\tilde{f}(k | q) &= f(k | \text{logit}^{-1}(q)) \\ &= f\left(k | \frac{e^q}{1+e^q}\right) \\ &= \binom{n}{k} \left(\frac{e^q}{1+e^q}\right)^k \left(\frac{1}{1+e^q}\right)^{n-k} \\ &= \binom{n}{k} (1+e^q)^{-n} e^{kq} \quad (q \in \mathbb{R}).\end{aligned}$$

Kako je s transformacijo apriorne porazdelitve?

Naj bo Π slučajna spremenljivka z realizacijo p in Q slučajna spremenljivka z realizacijo q ; velja $Q = \text{logit} \circ \Pi = \text{logit}(\Pi)$:

$$\begin{aligned}f_Q(q) &= f_{\text{logit}(\Pi)}(q) = f_{\Pi}(\text{logit}^{-1}(q)) \cdot \left| \frac{d}{dq} \text{logit}^{-1}(q) \right| \\ \text{logit}^{-1}(q) &= 1 - \frac{1}{1+e^q} \implies \frac{d}{dq} \text{logit}^{-1}(q) = (1+e^q)^{-2} e^q.\end{aligned}$$

Sledi: če je $\Pi \in (0,1)$, je

$$f_Q(q) = \frac{e^q}{(1+e^q)^2};$$

ali je to še ploščata porazdelitev?

Jeffreys je kot privzeto neinformativno porazdelitev predlagal

$$f(\theta) \propto \sqrt{|\det(FI(\theta))|}. \quad (2.3)$$

Tu je $FI(\theta)$ t.i. Fisherjeva informacija:

$$\begin{aligned}FI(\theta) &= E_{(X|\Theta)}(\text{grad}_{\theta} \ln(f(x | \theta)) \cdot \text{grad}_{\theta} \ln(f(x | \theta))^T) \\ &= \text{Var}_{(X|\Theta)}(\text{grad}_{\theta} \ln(f(x | \theta))) \\ &= -E_{(X|\Theta)}(H_{\theta}(\ln f)(x | \theta)).\end{aligned}$$

Za $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^r$ je $\text{grad}_{\theta} \ln(f(x | \theta))$ vektor s komponentami $\frac{\partial}{\partial \theta_i} \ln(f(x | \theta))$ za $1 \leq i \leq r$.

Učinek reparametrizacije na Jeffreysovo apriorno porazdelitev

Reparametrizirajmo s parametrom $\lambda = \phi(\theta)$, kjer je

$$\phi : \Theta \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \Lambda \subset \mathbb{R}^n$$

diferenciabilen; sledi

$$\tilde{f}(x | \lambda) = f(x | \phi^{-1}(\lambda)).$$

Odvajajmo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \ln(\tilde{f}(x | \lambda)) &= \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial \lambda_j} \ln(f(x | \lambda_j)) \cdot \frac{\partial(\psi^{-1})_j(\lambda)}{\partial \lambda_i} \right) \\ &= \left[\frac{\partial(\psi^{-1})_j}{\partial \lambda_i} \right]_{j=1}^n \cdot \text{grad}_{\theta}(\ln f)(x | \phi^{-1}(\lambda)) \end{aligned}$$

$$\text{grad}_{\lambda} f(x | \lambda) = [J(\phi^{-1}(\lambda))]^T \cdot \text{grad}_{\theta} \ln f(x | \phi^{-1}(\lambda))$$

J : Jacobijeva matrika.

$$\begin{aligned} \ln \tilde{f}(x | \lambda) &= \ln(f(x | \phi^{-1}(\lambda))) \cdot \text{grad}_{\lambda} \ln(f(x | \lambda)) \cdot \text{grad}_{\lambda} \ln(f(x | \lambda))^T \\ &= [J\phi^{-1}(\lambda)]^T \cdot \text{grad}_{\theta} \ln f(x | \phi^{-1}(\lambda)) \cdot \text{grad}_{\theta} \ln f(x | \phi^{-1}(\lambda))^T \cdot [J\phi^{-1}(\lambda)] \\ &\implies \widetilde{FI}(\lambda) = (J\phi^{-1}(\lambda))^T \cdot FI(\phi^{-1}(\lambda)) \cdot J\phi^{-1}(\lambda). \end{aligned}$$

Kaj je Jeffreysova apriorna porazdelitev na λ ?

$$\begin{aligned} f_{\text{Jeffrey}}(\lambda) &= c \sqrt{\det \widetilde{FI}(\lambda)} = \\ &= c \sqrt{\det FI(\phi^{-1}(\lambda))} = c |\det J(\phi^{-1}(\lambda))|; \end{aligned}$$

to je transformirana Jeffreysova apriorna porazdelitev (transformirana sama vase).

Poglavje 3

Monte-Carlo integracija in metode vzorčenja

Proučujemo (neznani) parameter vzorčnega povprečja, recimo da nas zanima realnoštevilska funkcija $h(\theta)$.

Zgled.

Morda nas zanima „ $E(X^2)$ “ naše preučevane slučajne spremenljivke. Če imamo normalni model s parametrom $\theta = (\mu, \sigma^2)$, nas torej zanima $h(\mu, \sigma^2) = (\mu^2, \sigma^2)$. V Bayesovem okviru iz apriorne porazdelitve in vzorca dobimo aposteriorno porazdelitev z gostoto

$$f(\theta | x) = \frac{f(x | \theta)f(\theta)}{f(x)},$$

kot oceno za $h(\theta)$ vzamemo npr. aposteriorno pričakovano vrednost

$$E(h(\theta) | X = x) = \int h(\theta)f(\theta | x)d\theta.$$

Problemi:

- $h(\theta)f(\theta | x)$ je lahko zahtevna za integracijo - numerično,
- morda je „že“ $f(x | \theta)f(\theta)$ zahtevna za integracijo in $f(x)$ sploh ne „poznamo“.

Odgovor na to je integracija Monte-Carlo z Markovskimi verigami.

3.1 Klasična integracija Monte-Carlo

Zgled. „Integrirajte“ $\int_0^1 |\sin(100 \sin(\pi x))| dx$.

Spomnimo se na KZVŠ: če so $X_1, X_2 \dots$ NEP slučajni vektorji s pričakovano vrednostjo μ , velja

$$\frac{x_1 + \dots + x_n}{n} \rightarrow \mu = \int x f(x) dx$$

skoraj gotovo (s.g.).

Če je h taka realnoštevilska funkcija, da obstaja $E(h(X_i))$, so tudi $h(X_1), h(X_2) \dots$ NEP s pričakovano vrednostjo $E(h(X_i))$ in zato

$$\frac{h(x_1) + \dots + h(x_n)}{n} \rightarrow E(h(X_i)) = \int h(x) f(x) dx$$

skoraj gotovo.

S pomočjo KZVŠ lahko ocenimo integral dane funkcije $h : (0,1) \rightarrow \mathbb{R}$ na naslednji način: privzamemo zaporedje NEP $X_i \sim N(0,1)$, torej velja

$$\frac{h(x_1) + \dots + h(x_n)}{n} \rightarrow \int h(x) \cdot | \cdot | dx$$

skoraj gotovo.

Kaj to pomeni?

Verjetnost tistih zaporedij $(X_1, X_2 \dots)$, pri katerih limita $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$ obstaja in je enaka $\cdot | \cdot$.

Tu manjka ocena za natančnost ocene.

DN: implementirajmo.

NEP - izziv.

Izkaže se, da s psevdonaključnimi števili znamo izvrstno simulirati NEP. Vzorčenje iz $(0,1)$ (za razumno velike vzorce).

Oceno natančnosti lahko dobimo s pomočjo CLI: privzemino obstoj disperzije slučajne spremenljivke X_i ($\iff \int h(x)^2 f(x) dx < \infty$).

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (h(X_i) - \overline{h(X_i)})^2.$$

Po CLI velja

$$\frac{h(X_i) - E(h(X_i))}{\frac{S}{\sqrt{n}}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{D} N(0,1).$$

Za $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ sledi

$$P\left(\frac{\overline{h(X_i)} - E(h(X_i))}{\frac{S}{\sqrt{n}}} \in [-z_{\frac{\alpha}{2}}, z_{\frac{\alpha}{2}}]\right) = 1 - \alpha$$

Verjamemo, da se ocena $\overline{h(x_i)}$ razlikuje od dejanskega integrala $E(h(x_i))$ za kvečjemu $z_{\frac{\alpha}{2}} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}}$.

3.2 Simulacija vzorčenja z inverzno kumulativno porazdelitveno funkcijo

Privzemimo, da je „ciljna“ kumulativna porazdelitvena funkcija (k.p.f.)

$F : \mathbb{R} \rightarrow [0,1]$ zvezna bijekcija $\mathbb{R} \rightarrow (0,1)$. Velja trditev.

Trditev 3.2.1. Naj bo $U \sim U(0,1)$. Tedaj je $F^{-1}(U) \sim F$.

Posledica 3.2.2. Če „poznamo“ F^{-1} , znamo simulirati vzorčenje „iz F “.

Dokaz 3.2.3. $P(F^{-1}(U) \leq x) = P(U \leq F(x)) = F(x)$.

Zgled. „Poznamo“ Φ^{-1} , kjer je $\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt$.

Zgornja trditev je standardna metoda za vzorčenje iz $N(0,1)$ ($\xrightarrow{\text{vaja}}$ znamo vzorčiti iz $N(\mu, \Sigma)$ za poljubne $\mu \in \mathbb{R}^d$ in $\sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ s.p.d.).

V splošnem, če definiramo posplošeni inverz

$$F^{-}(U) = \inf F^{-1}([u, \infty)),$$

je (še vedno) $F^{-1}(U) \sim F$. ($\xrightarrow{\text{vaja}}$ znamo vzorčiti iz končnih diskretnih porazdelitev).

3.3 Metoda sprejmi ali zavrni (A/R)

Motivacija: Naj bo $f : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ ciljna (Lebesgueova) gostota. Označimo „graf“ pod njo:

$$A_f = \{(x, u) \mid 0 \leq u \leq f(x)\} \subset \mathbb{R}^2.$$

Seveda je $S(A_f) = 1$ (ploščina).

Pripomnimo, da za $(X, U) \sim U(A_f)$ velja $X \sim f$:

$$f_X(x) = \int_{u=-\infty}^{\infty} f_{(X,U)}(x, u) du = \int_0^{f(x)} du = f(x).$$

A/R #1: privzemimo $\{x \mid f(x) > 0\} \subset (a, b)$, kjer $-\infty < a < b < \infty$ in $\exists m : f(x) < m$ za vse x .

Simulacijo vzorčenja $X \sim f$ implementiramo takole:

- (i) vzorčimo $Y = y$, kjer $Y \sim (a, b)$ - „ x “,
- (ii) vzorčimo $(V \mid Y = y) = v$ (realizacija) iz $U(0, m)$ - „ y “,
- (iii) če je $v < f(y)$ sprejmemo $X = y$, če je $v \geq f(y)$ zavrnemo y in ponovimo (i).

Preverimo $X \sim f$. Za $I \subset (a, b)$ je

$$\begin{aligned} P(X \in I) &\stackrel{\text{vaja}}{=} P(Y \in I \mid v < f(y)) \\ &= \frac{\int_{\mathbb{R}} P(Y \in I \wedge v < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(v < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy} \\ &\stackrel{\text{pogojna}}{=} \frac{\int_{\mathbb{R}} P(y \in I \wedge v < f(y)) \cdot f_Y(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(v < f(y)) \cdot f_Y(y) dy} \\ &\stackrel{I \subset (a,b)}{=} \frac{\int_I P(v < f(y)) \cdot \frac{1}{b-a} dy}{\int_{(a,b)} P(v < f(y)) \cdot \frac{1}{b-a} dy} \\ &= \frac{\int_I f(y) dy}{\int_{(a,b)} f(y) dy} \\ &= \int_I f(y) dy, \end{aligned}$$

kjer smo v zadnjem koraku upoštevali $P(V < f(y)) = \frac{f(y)}{m}$ na (a, b) .
 $\int_I f(y) dy$ je gostota X .

A/R #2: Privzemimo, da znamo vzorčiti iz gostote $g : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ in da je $f(x) < M \cdot g(x)$ za vse x (za neki M). Simulacijo vzorčenja $X \sim f$ implementiramo takole:

- (i) vzorčimo $Y = y$, kjer $Y \sim g$,
- (ii) vzorčimo $(V \mid Y = y) = v$ iz $U(0, M \cdot g(y))$. Lahko vzamemo $W \sim U(0, 1)$ in $V \sim M \cdot g(y) \cdot W$,
- (iii) če je $v < f(y)$ sprejmemo $X = y$, če je $v \geq f(y)$ zavrnemo in ponovimo (i).

Preverimo $X \sim f$. Za $I \subset \mathbb{R}$ je

$$\begin{aligned}
 P(X \in I) &\stackrel{\text{vaja}}{=} P(Y \in I \mid M \cdot g(y) \cdot w < f(y)) \\
 &= \frac{\int_{\mathbb{R}} P(Y \in I \wedge M \cdot g(y) \cdot w < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(M \cdot g(y) \cdot w < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy} \\
 &\stackrel{\text{pogojna}}{=} \frac{\int_I P(W < \frac{f(y)}{Mg(y)}) \cdot g(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(W < \frac{f(y)}{Mg(y)}) \cdot g(y) dy} \\
 &= \dots = \int_I f(y) dy,
 \end{aligned}$$

kjer smo v upoštevali $P(W < \frac{f(y)}{Mg(y)}) = \frac{f(y)}{Mg(y)}$. Opazimo da je $M \cdot g(y)$ namesto m od prej (na nek način).

Pripomnimo, da je verjetnost sprejetja tu enaka

$$P(M \cdot g(y)W < f(y)) = \frac{1}{M} \int_{\mathbb{R}} f(y) dy = \frac{1}{M}.$$

Želimo M čim bližje 1.

Zgled. Oglejmo si $f = F_{N(0,1)}$ in $g = F_{Cauchy}$ ($g(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$).

$$\begin{aligned}
 F_{Cauchy}(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\pi(1+t^2)} = \frac{1}{\pi} \arctan(x) + \frac{1}{2} \\
 F_{Cauchy}^{-1}(u) &= \tan\left(\pi\left(u - \frac{1}{2}\right)\right).
 \end{aligned}$$

u smo izrazili iz $x = \frac{1}{\pi} \arctan(x) + \frac{1}{2}$.

Vzorčenje iz Cauchyja je $\tan\left(\pi\left(U - \frac{1}{\pi}\right)\right)$, U enakomerna na $(0, 1)$.

DN: optimiziraj M .

3.4 Metode MCMC (Monte Carlo z markovskimi verigami)

Okvir:

Želeli bi simulirati vzorčenje iz „ciljne“ spremenljivke z gostoto f (ki jo morda poznamo le do multiplikativne konstante natančno). Izkaže se, da za ocenjevanje pričakovane vrednosti

$$E(h(X)) = \int h(x)f(x)dx \quad (\text{nevtralne črke})$$

pravzaprav ne potrebujemo simulacije neodvisnega vzorčenja.

Aproksimacija z vzročnim povprečjem

$$E_f(h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m h(X^{(i)})$$

dobro funkcionira tudi v primeru, ko je $X^{(0)}, X^{(1)}, X^{(2)} \dots$ primerna markovska veriga (z vrednostmi tam, kjer $f > 0$ - prostor „stanj“) s stacionarno porazdelitvijo z gostoto f .

Definicija 3.4.1 (Markovska veriga). Markovska veriga je zaporedje s.v. (na prostoru stanj), ki ima lastnost, da je

(i) $\forall n :$

$$(X^{(n)} \mid X^{(n-1)} = x^{(n-1)} \dots X^{(0)} = x^{(0)}) = (X^{(n)} \mid X^{(n-1)} = x^{(n-1)})$$

- markovska lastnost (neodvisno od n),

(ii) porazdelitve $(X^{(n)} \mid X^{(n-1)} = x)$ so za vse n enake (za vsak x imamo eno porazdelitev).

Tehnično gledano to pomeni, da Markovska veriga nastane tako, da ob času n vrednost $X^{(n)}$ dobimo z vzorčenjem iz cele porazdelitve, ki je odvisna le od stanja $x^{(n-1)}$.

$X^{(i)}$ - členi markovske verige,

$(X^{(n)} \mid X^{(n-1)} = x)$ - prehodne porazdelitve.

Markovska veriga (M.v.) ima stacionarno porazdelitev (...) f , če vedno velja sklep $(X^{(n-1)}) \sim f \implies X^{(n)} \sim f$.

(!! nista pa $X^{(n-1)}$ in $X^{(n)}$ neodvisna s.v.)

Za ocenjevanje potrebujemo t.i. ergodične markovske verige:

- (a) EZVŠ (ergodični zakon veliikih števil): če za vsako integrabilno funkcijo h velja

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} h(X^{(i)}) = E_f(h)$$

skoraj gotovo (s.g.) za (skoraj) vse začetne vrednosti $x^{(0)}$ (ustrezne dobimo z verjetnostjo 1),

- (b) ECLI (ergodični CLI): za vsako funkcijo h , za katero obstaja $\int h^2(x)f(x)dx$, obstaja konstanta γ_n (MCMC disperzija), za katero

$$\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X^{(i)}) - \int h(x)f(x)dx}{\frac{\gamma_n}{\sqrt{n}}} \xrightarrow{D} N(0,1).$$

(!! γ_n je potrebno oceniti iz vzorca, kar je težko.)

Privzamemo (i) in naj bo $A \subset \{f > 0\}$ vsako območje, za katero

$$P(„X“ \in A) = \int_A f(x)dx = a > 0.$$

Vzenimo $a := 1_A$.

Tedaj $\frac{\text{število členov (do } n\text{-tega, ki padejo v } A)}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int 1_A(x)f(x)dx = a$.

3.4.1 Metropolisov algoritem

Naj bo f ciljna gostota in naj bo $\{q(y | x) \mid y, x \text{ iz prostora stanj}\}$ družina „predlaganih“ gostot: za vsak x (iz katerih pa znamo simulirati NEP vzorčenje) je $q(_ | x)$ gostota neke porazdelitve. Naj bo še $q(y | x) = q(x | y)$ za vse pare (če smo v stanju x , predlagamo y „z enako verjetnsotjo“, kot če bi predlagali x , če smo v stanju y).

Opis algoritma:

- (i) od nekod dobimo $x^{(0)}$,

(ii) privzamemo, da že imamo realizacijo $X^{(n-1)} = x^{(n-1)}$. Vzorčimo kandidata y za naslednjo realizacijo iz $q(_ | x^{(n-1)})$.

Če velja $f(y) \geq f(x^{(n-1)})$, vzamemo $X^{(n)} = y$ (realizacija).

Če je $f(y) < f(x^{(n-1)})$, vzamemo

$$\begin{cases} X^{(n)} = y \text{ z verjetnostjo } \rho = \frac{f(y)}{f(x^{(n-1)})} \\ X^{(n)} = x^{(n-1)} \text{ z verjetnostjo } 1 - \rho \end{cases}$$

Naenkrat. $X^{(n)} = y$ z verjetnostjo $\rho = \min\{\frac{f(y)}{f(x^{(n-1)})}, 1\}$ (*)

(*): če $f(x^{(n-1)}) = 0$, vedno vzamemo y .

Ta korak implementiramo z realizacijo $u \in U(0,1)$, vzamemo $X^{(n)} = y$, če $u \leq \rho$, oz. $X^{(n)} = x^{(n-1)}$, če $u > \rho$.

Izkaže se, da ta opis določa markovsko verigo s stacionarno porazdelitvijo f .

Če velja sklep $f(y) > 0 \implies \forall x : q(y | x) > 0$, ima veriga EZVŠ.

Bayesova aplikacija.

Ciljna gostota je $f(\theta | x)(v \theta)$.

Če je $\theta^{(n-1)}$ stanje v času $n - 1$, za implementacijo koraka (ii) potrebujemo

$$\frac{f(\theta^* | x)}{f(\theta^{(n-1)} | x)} = \frac{f(x | \theta^*)f(\theta^{(*)})}{f(x | \theta^{(n-1)})f(\theta^{(n-1)})};$$

v resnici ne potrebujemo normalizacijske konstante v Bayesovi formuli.

Tipični primeri predlaganih gostot:

1. $(Y | X^{(n-1)} = x^{(n-1)}) \sim U(K_\delta(x^{(n-1)}))$ za fiksni δ (krogla s polmerom δ), v neki metiki.

(Povrnljivost - povsod, kjer neničelne verjetnosti, jemlje ∞ -krat.)

(To pomeni $q(y | x) = \frac{1}{Vol(K_\delta(x))} \cdot 1_{K_\delta(x)}(y)$ (namesto klasične uporabimo ∞ metriko).)

2. $(Y | X^{(n-1)} = x^{(n-1)}) \sim N(x^{(n-1)}, \Sigma)$ za fiksno Σ .

(To pomeni $q(y | x) = (2\pi)^{-\frac{dim}{2}} (det \Sigma)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \langle \Sigma^{-1}(y-x), (y-x) \rangle}$ - simetričnost \checkmark .)

V tem primeru je $Y | X^{(n-1)} = x^{(n-1)} \sim N(x^{(n-1)}, \Sigma)$.

Metropolisov algoritem tipično nima ECLI :(.

3.4.2 Metropolis-Hastingov algoritem

Tu predlagane gostote $q(y \mid x)$ ne zadoščajo simetričnosti. V algoritmu namesto ρ iz 3.4.1. uporabimo

$$\rho = \rho(x^{(n-1)}, y) = \min\left\{1, \frac{f(y)}{f(x^{(n-1)})} \cdot \frac{q(x^{(n-1)} \mid y)}{q(y \mid x^{(n-1)})}\right\}$$

(in $\rho = 1$ če $f(x^{(n-1)}) \cdot q(y \mid x^{(n-1)}) = 0$).

Enake lastnosti kot prej:

- vedno dobimo verigo s stacionarno porazdelitvijo f
- če $\forall x : q(_, x^{(n)})$ dopušča kandidate iz $\{f > 0\}$ (v končno korakih), velja EVZŠ (blagi pogoji).

Dobimo pa še:

- pri primernih predpostavkah na q dobimo tudi ECLI.

Zgled („Neodvisni“ Hastingov algoritem). Vedno „funkcionira“ (teoretično) $q(y \mid x) = q(y)$ za neko fiksno porazdelitev z gostoto g , kjer $g(y) > 0$ za $\forall f(y) > 0$.

3.4.3 Gibsov vzorčevalnik

Gibsov vzorčevalnik je algoritem za konstrukcijo markovske verige s ciljno gostoto $f(x, y)$ (ali $f(x_1 \dots x_n)$) na podlagi vzorčenja iz „gostot“ $f(x \mid y)$ ali $f(y \mid x)$.

Motivacija: proučujemo vzorčni model z gostotami $f(x \mid \theta_1, \theta_2) = f(x \mid \theta)$, ki je tak, da znamo simulirati neko vzorčenje iz $f(\theta_1 \mid \theta_2, x)$ in $f(\theta_2 \mid \theta_1, x)$, ne pa (neposredno) iz $f(\theta_1, \theta_2 \mid x)$.

Opis algoritma.

- Vzorčimo y_0 iz neke porazdelitve ali pa y_0 določimo.

Vzorčimo x_0 iz pogojne porazdelitve $f(X \mid y_0)$.

- (ii) Če poznamo (x_{n-1}, y_{n-1}) , vzorčimo najprej y_n iz $f(x \mid x_{n-1})$, potem pa še x_n iz $f(y \mid y_n)$ (temu koraku oz. njegovim podkorakom pravimo „osveževanje“).

Dobimo zaporedje s.s. (ali DN)

$$X^{(0)} = (x_0, y_0), X^{(1)} = (x_1, y_1), X^{(2)} = (x_2, y_2) \text{ itd.}$$

Izkaže se, da so zaporedja

$$X^{(0)}, X^{(1)}, X^{(2)} \dots$$

$$X_0, X_1, X_2 \dots$$

$$Y_0, Y_1, Y_2 \dots$$

markovske verige in da ima veriga $\{X^{(i)} \mid n\}$ stacionarno porazdelitev $f(x, y)$. Pri blagih pogojih je ta veriga ergodična.

Zgled.

Tipična aplikacija v Bayesovi statistiki je:

privzemimo model $f(x \mid \theta_1, \theta_2)$ z apriorno gostoto $f(\theta_1, \theta_2) = f(\theta_1) \cdot f(\theta_2)$, kjer je $f(\theta_1)$ iz konjugirane družine k modelu $f(x \mid \theta_1, \text{KONST})$, $f(\theta_2)$ pa je iz konjugirane družine k modelu $f(x \mid \text{KONST}, \theta_2)$, iz katerih znamo simulirati NEP vzorčenje.

Polna aposteriorna porazdelitev

$$f(\theta_1, \theta_2 \mid x) = \frac{f(x \mid \theta_1, \theta_2) \cdot f(\theta_1) \cdot f(\theta_2)}{f(x)}$$

je tipično nedostopna, pač pa velja

$$f(\theta_1 \mid \theta_2, x) = \frac{f(x \mid \theta_1, \theta_2) \cdot f(\theta_1 \mid \theta_2)}{f(x \mid \theta_2)} = \frac{f(x \mid \theta_1, \theta_2) \cdot f(\theta_1)}{f(x \mid \theta_2)}, \quad (3.1)$$

kar je aposteriorna gostota Bayesovega modela z gostotami $f(x \mid \theta_1, \theta_2)$ iz apriorne gostote $f(\theta_1)$, kjer θ_2 razumemo kot konstanto. Po našem premisleku je torej $f(\theta_1 \mid \theta_2, x)$ iz „prave“ konjugirane družine. Simetrično je

$$f(\theta_2 \mid \theta_1, x) = \frac{f(x \mid \theta_1, \theta_2) \cdot f(\theta_2)}{f(x \mid \theta_1)}$$

iz „znane“ konjugirane družine.

Konkretno si oglejmo enorazsežni NEP-normalni model

$$(X \mid \mu, \sigma^2) \sim N \left(\begin{bmatrix} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{bmatrix}, \sigma^2 I \right) \quad (3.2)$$

z gostotami

$$f(x_1 \dots x_n \mid \mu, \sigma^2) = f(x \mid \mu, \sigma^2) = \left(2\pi\sigma^2\right)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \cdot \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}.$$

Vemo, da je $\{N(\mu_*, \tau_*^2) \mid \mu_* \in \mathbb{R}, \tau_*^2 \in (0, \infty)\}$ konjugirana k enoparametričnim modelom z gostotami 3.2, kjer σ^2 poznamo.

Izkaže se (vaja), da je družina $\{\text{InvGama}(a, b) \mid a, b \in (0, \infty)\}$ konjugirana k enoparametričnim modelom z gostotami 3.2, kjer μ poznamo. Tu je $Y \sim \text{InvGama}(a, b) \iff \frac{1}{Y} \sim \text{Gama}(a, b)$, velja

$$f_{\text{InvGama}(a, b)}(y) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} y^{-a-1} e^{-\frac{b}{y}}.$$

Vemo: pri $f(\mu) = f_{N(\mu_*, \tau_*^2)}(\mu)$ je

$$f(\mu \mid \sigma^2, x) \stackrel{3.1}{=} f_{N\left(\frac{\frac{\sigma^2}{n} \mu_* + \frac{\tau_*^2}{\sigma^2 + \tau_*^2} \bar{x}, \frac{\frac{\sigma^2}{n} \cdot \tau_*^2}{\frac{\sigma^2}{n} + \tau_*^2}\right)}(\mu).$$

Vidimo: pri $f(\sigma^2) = f_{\text{InvGama}(a, b)}(\sigma^2)$ je

$$f(\sigma^2 \mid \mu, x) = f_{\text{InvGama}\left(a + \frac{n}{2}, b + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right)}(\sigma^2).$$

Gibsov vzorčevalnik: ciljna porazdelitev $f(\mu, \sigma^2 \mid x)$.

(i) Določimo $\sigma_0^2 = 1$. Vzorčimo μ_0 iz

$$f_{N\left(\frac{1}{n} \mu + \frac{\tau_*^2}{1 + \tau_*^2} \bar{x}, \frac{1}{n} \frac{\tau_*^2}{1 + \tau_*^2}\right)},$$

(ii) vzorčimo σ_1^2 iz $f(\sigma^2 \mid \mu_0, x)$,

vzorčimo μ_1^2 iz ...

⋮

(Blagi pogoji so izpolnjeni, veriga ergodična.)