## Bayesova statistika - zapiski s predavanj prof. Smrekarja

Tomaž Poljanšek

študijsko leto 2023/24

## Kazalo

1	Uvo	$\operatorname{pd}$	1
	1.1	Elementarna Bayesova statistika	]
	1.2	Proučevani slučajni vektor (vzročni) parametrični model	3
	1.3	Apriorna in "robna" porazdelitev	5
	1.4	Disperzija aposteriornih porazdelitev	7
	1.5	Aposteriorni kredibilnostni interval	Ć
	1.6	Splošne oznake	1(
2	Enc	pparametrični modeli	12
	2.1	Beta-binomski model	12
	2.2	Poissonov model (gama-poissonov model)	12
	2.3	Normalni model z znano disperzijo	13
	2.4	Eksponentne družine porazdelitev	15
	2.5	Neinformirane apriorne porazdelitve	18
3	Mo	nte-Carlo integracija in metode vzorčenja	21
	3.1	Klasična integracija Monte-Carlo	22
	3.2	Simulacija vzorčenja z inverzno kumulativno porazdelitveno	
		funkcijo	23
	3.3	Metoda sprejmi ali zavrni (A/R) $\dots \dots \dots \dots \dots$	24
	3.4	Metode MCMC (Monte Carlo z markovskimi verigami)	26
	3.5	Markovske verige z zveznim prostorom stanj - appendix	32
	3.6	MCMC diagnostika	36

4	Normalni modeli		41
	4.1	Dvofazna predstavitev	41
	4.2	Hierarhični modeli	45
	4.3	Linearna regresija	50

## Seznam uporabljenih kratic

kratica	pomen
s.v.	slučajni vektor
В	binomska porazdelitev
NEP	neodvisen in enako porazdeljen
s.s.	slučajna spremenljivka
p.v.	pričakovana vrednost
AKI	aposteriorni kredibilnostni interval
$\mathbf{BF}$	Bayesova formula
s.g.	skoraj gotovo
k.p.f.	kumulativna porazdelitvena funkcija
A/R	accept or reject
M.v.	Markovska veriga
$\mathbf{EZV\check{S}}$	ergodični zakon veliikih števil
ECLI	ergodični CLI
M-H	Matropolis-Hasting
$\mathbf{H}\mathbf{M}$	hierarhični model
$\mathbf{EIZ}$	ergodični interval zaupanja
MCMC	Monte Carlo markovske verige
$\mathbf{SNK}$	?
MNK	metoda najmanjših kvadratov
VKR	vsota kvadratov residualov

## Poglavje 1

## $\mathbf{U}\mathbf{vod}$

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

 $Zgled.~1000, \approx 400 \text{\center} \rightarrow 600 \text{\center}$  (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  $P(A) = \sum_{i=1}^{m} P(A \mid E_i) \cdot P(E_i)$  (interpretacija: 2-fazni poskus).

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

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

jе

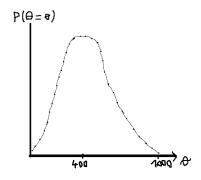
$$P(E_j \mid A) = \frac{P(A \mid E_j) \cdot P(E_j)}{P(A)}$$
 - elementarna pogojna verjetnost

oziroma

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

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

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



Privzamemo (kar!) 
$$\Theta \sim B\left(1000, \frac{4}{10}\right)$$

$$\implies P(\Theta = \theta) = \binom{1000}{\theta} \left(\frac{4}{10}\right)^{\theta} \left(1 - \frac{4}{10}\right)^{1000 - \theta}.$$

$$P(k \text{ črnih od 10 izvlečenih}|\Theta = \theta) = \frac{\binom{\theta}{k}\binom{1000 - \theta}{10 - k}}{\binom{10}{k}} \ (*)$$
(\*) pri omejitvah ( $k$  omejimo).

Osvežena porazdelitev - novo vedenje

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

Pravimo ji aposteriorna porazdelitev.

# 1.2 Proučevani slučajni vektor (vzročni) parametrični model

Naj bo  $X=(X_1,X_2...X_n)\in\mathbb{R}^n$  preučevani slučajni vektor. Pogosto so neodvisni in enako porazdeljeni (NEP) realizacija danega slučajnega eksperimenta. S pomočjo statistike lahko "ocenjujemo" porazdelitev slučajnega vektorja X. Zanjo 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.)  $\Theta$  z vrednostmi v  $\Theta$  (večinoma  $r \geq 2$ ). Porazelitvi s.v.  $X_i$  pogojno na  $\Theta = \theta$  pravimo vzorčna porazdelitev. Privzeli bomo, da imamo gostote  $f(x \mid \theta)$  ali verjetnostne funkcije

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

torej da velja

$$P(X \in B \mid \Theta = \theta) = \int_{B} f(x \mid \theta) d\nu(x)$$

(v Lebesgueovi meri) ali

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

Modelu pogojnih porazdelitev  $(X \mid \Theta = \theta)$  pravino vzorčni model.

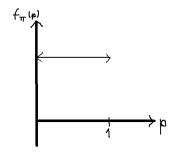
#### 1.3 Apriorna in "robna" porazdelitev

Porazdelitvi fiktivnega slučajnega vektorja  $\Theta$  pravimo apriorna porazdelitev, brezpogojni (robni) porazdelitvni slučajnega vektorja X pa pravimo "robna" porazdelitev

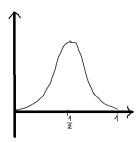
(\*) v resnici sta obe porazdelitvi robni porazdelitvi družne porazdelitve vektorja  $(X, \Theta)$  z vrednostmi v  $\mathbb{R}^{n+r}$ .

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

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

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(cifra=p)), gre za slučajne spremenljivke  $X_1,X_2...X_n$ , za katere

je  $(X_i \mid \Pi = p) \sim Bernoulli(p)$  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

$$P(X_{i} = 1 \land X_{j} = 1) = \int_{0}^{1} P(X_{i} = 1 \land X_{j} = 1 \mid \Pi = p) f(p) dp =$$

$$\stackrel{\text{pogojno neodvisne}}{=} \int_{0}^{1} P(X_{i} = 1 \mid \Pi = p) P(X_{j} = 1 \mid \Pi = p) f(p) dp =$$

$$= \int_{0}^{1} p^{2} f(p) dp =$$

$$= E(\Pi^{2}).$$

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

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

Tvorimo  $X = X_1 + \cdots + X_n \in \{0, 1 \dots n\}$ . 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

$$P(X = k) = \int_0^1 P(X = k \mid p) f(p) dp =$$

$$= \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k} f(p) dp.$$

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

$$P(X \in (a,b) \mid X = k) = \frac{P(X = k \land \Pi \in (a,b))}{P(X = k)} =$$

$$= \frac{\int_0^1 P(X = k \land \Pi \in (a,b) \mid \Pi = p) f(p) dp}{P(X = k)} =$$

$$= \int_a^b \frac{P(X = k \mid \Pi = p)}{P(X = k)} f(p) dp.$$

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 porazdelitev) je t.i.  $Beta = \{Beta(a,b) \mid a,b \in (0,\infty)\}$ 

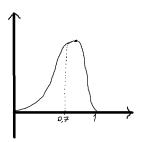
$$f_{Beta(a,b)}(p) = \frac{1}{B(a,b)} p^{a-1} (1-p)^{b-1} 1_{(0,1)}(p)$$

(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  $f(p) = f_{Beta(a,b)}(p)$ )

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

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

$$\frac{a+k}{a+b+n} = \frac{(a+b)\frac{a}{a+b} + n\frac{k}{n}}{a+b+n} =$$

$$= \frac{a+b}{a+b+n} \cdot \frac{a}{a+b} + \frac{n}{a+b+n} \cdot \frac{k}{n}.$$

Tukaj je

- $\frac{a}{a+b}$  apriorna ocena,
- $\frac{k}{n}$  vzorčna ocena in
- $\frac{a+b}{a+b+n}$  in  $\frac{n}{a+b+b}$  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  $X: \Omega \to \mathbb{R}^m$  in  $Y: \Omega \to \mathbb{R}^n$  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  $\mu$  in  $f_Y(y) = \int f_{(X,Y)}(x,y) d\mu(x)$  za Y glede na  $\nu$ . 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  $\nu$ : gostota v  $X \to \mu$  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.

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

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.

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

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

$$Var(Y \mid X) = v(X).$$

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(aposteriorne) > D(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"

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

kjer sta seveda

$$E(Var(\Theta \mid X)) \ge 0$$
 in  $Var(E(\Theta \mid X)) \ge 0$ ,

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

$$E(Var(\Pi \mid T)) \leq Var(\Pi).$$

Opomba.

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

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

(V povprečju aposteriorna varianca boljša.)

#### 1.5 Aposteriorni kredibilnostni interval

(Bayesova različica intervala zaupanja).

V konkretnem zgledu "iščemo" funkciji realizacije L(k), U(k), za kateri velja

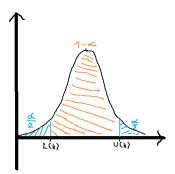
$$\forall k \ P(L(k) \le p \le U(k)) \ge 1 - \alpha.$$

p je slučajen.

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

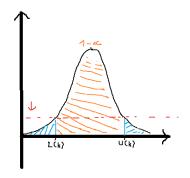
$$L(k) = F_{Beta(a+k,b+n-k)}^{-1} \left(\frac{\alpha}{2}\right),$$

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



in v aposteriorni 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.

### 1.6 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.

 $\Theta$  - (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 |  $\Theta=\theta)$  (izračunano vx).

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

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

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

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  $(X_i \mid \lambda) \stackrel{\text{NEP}}{\sim} Poisson(\lambda)$ . Za proučevano s.s. vzamemo  $T = \sum_{i=1}^n X_i$ ; seveda je  $(T \mid \lambda) \sim Poisson(n\lambda)$ .

Privzemimo apriorno porazdelitev

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

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

$$E(Gama(a,b)) = \frac{a}{b},$$
  
$$D(Gama(a,b)) = \frac{a}{b^2}.$$

DN.

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

Bayesova formula se glasi

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

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

**Definicija 2.2.1.** Naj bo podan vzorčni model P in naj bo K družina porazdelitev na parametričnem prostoru  $\Theta$ . Pravimo, da je K konjugirana kP, 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  $\Theta$ . Rečemo lahko tudi, da sta P in K konjugiran par.

#### 2.3 Normalni model z znano disperzijo

Tu je  $\sigma^2$  znana disperzija, vzorec  $X=(X_1\ldots X_n)$  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  $N(\mu_0, \tau_0^2)$ .

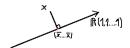
Vzorčna:

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

Pripomnimo, da je

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

kjer je  $\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$ .



 $\mathbb{R}(1,1...1)$  - prostorska diagonala.

(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

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

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

Velja

$$f_{N(\mu_1, \tau_1^2)}(\mu) \propto e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tau_1^2} \mu^2 - 2\frac{\mu_2}{\tau_1^2} \mu\right)}.$$

Sledi

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

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 porazdelitvah seštevajo.

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

To pomeni

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

in

$$\mu_1^2 = \tau_1^2 \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)$$

$$= \frac{\left(\frac{n}{\sigma^2}\overline{x} + \frac{1}{\tau_0^2}\mu_0\right) \cdot \frac{\tau_0^2 \sigma^2}{n}}{\left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_1^2}\right) \cdot \frac{\tau_0^2 \sigma^2}{n}}$$

$$= \frac{\tau_0^2 \overline{x} + \frac{\sigma^2 \mu_0}{n}}{\tau_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}}$$

$$= \frac{\tau_0^2}{\tau_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} \overline{x} + \frac{\frac{\sigma^2}{n}}{\tau_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} \mu_0$$

### 2.4 Eksponentne družine porazdelitev

Vzorčni model pripada eksponentni družini porazdelitev, če velja

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

kjer je

$$\tau: \Theta \to \mathbb{R}$$

$$T: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$$

$$Q: \Theta \to \mathbb{R}^m \text{ in }$$

$$h: \mathbb{R}^n \to [0, \infty].$$

Zgled.

(1) NEP Bernoullijev model:

$$(X_i \mid p) \stackrel{\text{NEP}}{\sim} Bernoulli(p) = B(1,p)$$

$$f(x_1 \dots x_n \mid p) = p^{\sum_{i=1}^n x_i} (1-p)^{n-\sum_{i=1}^n x_i} \cdot 1_{\{0,1\}^n} (x_1 \dots x_n)$$

$$f(x_1 \dots x_n \mid p) = P(X_1 = x_1 \dots X_n = x_n \mid p)$$

Preoblikujemo v:

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

(2) Normalni model z znano  $\sigma^2$ :

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

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

$$= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^2 + \frac{\mu}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i - \frac{n\mu^2}{2\sigma^2}}$$

$$= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{\frac{\mu}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i} \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i^2}.$$

Tukaj je

$$c(\mu) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}}$$

$$Q(\mu) = e^{-\frac{\mu}{\sigma^2}}$$

$$T(x) = e^{\sum_{i=1}^{n} x_i}$$

$$h(x) = e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} x_i^2}$$

(3) Normalni model z neznano disperzijo:

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

Zapišemo

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

Tukaj je

$$c(\mu) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{n\mu^2}{2\sigma^2}}$$

$$Q(\mu) = \left(\frac{\mu}{\sigma^2}, -\frac{1}{2\sigma^2}\right)$$

$$T(x) = \left(\sum_{i=1}^n x_i, \sum_{i=1}^n x_i^2\right).$$

m=2.

Preimenujemo (EXP) in definirajmo apriorne gostote

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

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

Aposteriorna gostota?

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

Tukaj smo zmožili nekonstantne faktorje iz 2.1 in 2.2.

Vidimo:

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

Gre za konjugirano družino.

Zgled. Aplicirajmo to konstrukcijo na modelu $\Large{\textcircled{2}}$ . Dobimo konjugirano družino

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

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

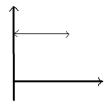
Vidimo, da mora biti v > 0.

DN:  $\eta, \upsilon \rightarrow \mu_0, \tau_0^2$  - 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) = Beta(1,1) kot neinformirano porazdelitev.



"Ploščata porazdelitev".

Učinek reparametrizacije

Zgled. Binomski vzorčni model:  $f(k \mid p) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}, \ p \in (0,1).$ Reparametrizirajmo s parametrom  $q = \ln \left( \frac{p}{1-p} \right) = logit(p)$ . Dobimo

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

Kako je s transformacijo apriorne porazdelitve?

Naj bo  $\Pi$  slučajna spremenljivka z realizacijo p in Q slučajna spremenljivka

z realizacijo q; velja  $Q = logit \circ \Pi = logit(\Pi)$ :

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

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

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

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

$$FI(\theta) = E_{(X|\Theta)}(grad_{\theta} \ln(f(x \mid \theta)) \cdot grad_{\theta} \ln(f(x \mid \theta))^{T})$$

$$= Var_{(X|\Theta)}(grad_{\theta} \ln(f(x \mid \theta)))$$

$$= -E_{(X|\Theta)}(H_{\theta}(lnf)(x \mid \theta)).$$

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

Učinek reparametrizacije na Jeffreysovo apriorno porazdelitev

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

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

diferenciabilen; sledi

$$\widetilde{f}(x \mid \lambda) = f(x \mid \phi^{-1}(\lambda)).$$

Odvajajmo

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_{i}} \ln(\widetilde{f}(x \mid \lambda)) = \sum_{j=1}^{n} (\frac{\partial}{\partial \lambda_{j}} \ln(f(x \mid \lambda_{j})) \cdot \frac{\partial(\psi^{-1})_{j}}{\partial \lambda_{i}}(\lambda))$$
$$= \left[\frac{\partial(\psi^{-1})_{j}}{\partial \lambda_{i}}\right]_{j=1}^{n} \cdot grad_{\theta}(\ln f)(x \mid \phi^{-1}(\lambda))$$

$$grad_{\lambda} f(x \mid \lambda) = [J(\phi^{-1}(\lambda))]^T \cdot grad_{\theta} \ln f(x \mid \phi^{-1}(\lambda))$$

J: Jacobijeva matrika.

$$\ln \widetilde{f}(x \mid \lambda) = \ln \left( f(x \mid \phi^{-1}(\lambda)) \right) \cdot \operatorname{grad}_{\lambda} \ln (f(x \mid \lambda)) \cdot \operatorname{grad}_{\lambda} \ln (f(x \mid \lambda))^{T}$$

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

$$\Longrightarrow \widetilde{FI}(\lambda) = (J\phi^{-1}(\lambda))^{T} \cdot FI(\phi^{-1}(\lambda)) \cdot J\phi^{-1}(\lambda).$$

Kaj je Jeffreysova apriorna porazdelitev na  $\lambda$ ?

$$f_{Jeffrey}(\lambda) = c\sqrt{det}\widetilde{FI}(\lambda) =$$

$$= c\sqrt{det}FI(\phi^{-1}(\lambda)) = c|detJ(\phi^{-1}(\lambda))|;$$

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 porazdelitve z gostoto

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

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

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

#### Problemi:

- $h(\theta)f(\theta\mid x)$  je lahko zahtevna za integracijo numerično,
- morda je "že"  $f(x\mid\theta)f(\theta)$  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  $\mu$ , velja

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

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

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

skoraj gotovo.

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

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

skoraj gotovo.

Kaj to pomeni?

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

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

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

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

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

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.)  $F: \mathbb{R} \to [0,1]$  zvezna bijekcija  $\mathbb{R} \to (0,1)$ . 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.** 
$$P(F^{-1}(U) \le x) = P(U \le F(x)) = F(x)$$
.

Zgled. "Poznamo" 
$$\Phi^{-1}$$
, 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) ( $\stackrel{\text{vaja}}{\Longrightarrow}$  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)  $F^{-1}(U) \sim F$ . ( $\stackrel{\text{vaja}}{\Longrightarrow}$  znamo vzorčiti iz končnih diskretnih porazdelitev).

#### 3.3 Metoda sprejmi ali zavrni (A/R)

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

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

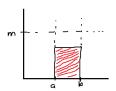
Seveda je  $S(A_f) = 1$  (ploščina).



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  $v \ge f(y)$  zavrnemo y in ponovimo (i).

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

$$P(X \in I) \stackrel{\text{vaja}}{=} P(Y \in I \mid v < f(y))$$

$$= \frac{\int_{\mathbb{R}} P(Y \in I \land v < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(v < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy}$$

$$\stackrel{\text{pogojna}}{=} \frac{\int_{\mathbb{R}} P(y \in I \land v < f(y)) \cdot f_Y(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(v < f(y)) \cdot f_Y(y) dy}$$

$$I \subset (a,b) = \frac{\int_{I} P(v < f(y)) \cdot \frac{1}{b-a} dy}{\int_{(a,b)} P(v < f(y)) \cdot \frac{1}{b-a} dy}$$

$$= \frac{\int_{I} f(y) dy}{\int_{(a,b)} f(y) dy}$$

$$= \int_{I} f(y) dy,$$

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  $g: \mathbb{R} \to [0,\infty)$  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  $W\sim U(0,1) \text{ in } V\sim M\cdot g(y)\cdot W,$
  - (iii) če je v < f(y) sprejmemo X = y, če je  $v \ge f(y)$  zavrnemo in ponovimo (i).

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

$$P(X \in I) \stackrel{\text{vaja}}{=} P(Y \in I \mid M \cdot g(y) \cdot w < f(y))$$

$$= \frac{\int_{\mathbb{R}} P(Y \in I \land M \cdot g(y) \cdot w < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(M \cdot g(y) \cdot w < f(Y) \mid Y = y) \cdot f_Y(y) dy}$$

$$\stackrel{\text{pogojna}}{=} \frac{\int_{I} P(W < \frac{f(y)}{Mg(y)}) \cdot g(y) dy}{\int_{\mathbb{R}} P(W < \frac{f(y)}{Mg(y)}) \cdot g(y) dy}$$

$$= \dots = \int_{I} f(y) dy,$$

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  $g = F_{Cauchy}$   $\left(g(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}\right)$ .

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

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

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

$$E(h(,X')) = \int h(x)f(x)dx$$
 (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  $X^{(0)}, X^{(1)}, X^{(2)}$ ... 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  $(X^{(n-1)}) \sim f \implies X^{(n)} \sim f$ .

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

Za ocenjevanje potrebujemo t.i. ergodične markovske verige:

(a) EZVŠ (ergodični zakon veli<br/>ikih števil): če za vsako integrabilno funkcijo h velja

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

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  $\gamma_n$  (MCMC disperzija), za katero

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

 $(\mathfrak{S} \gamma_n$ 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 <u>število členov (do n-tega, ki padejo v )A</u>  $\stackrel{n\to\infty}{\to} \int 1_A(x) f(x) dx = a.$ 

#### 3.4.1 Metropolisov algoritem

Naj bo f ciljna gostota in naj bo  $\{q(y\mid x)\mid y,x \text{ iz prostora stanj}\}$  družina "predlaganih" gostot: za vsak x (iz katerih pa znamo simulirati NEP vzorčenje) je  $q(\_\mid x)$  gostota neke porazdelitve. Naj bo še  $q(y\mid x)=q(x\mid y)$  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  $f(y) \ge f(x^{(n-1)})$ , vzamemo  $X^{(n)} = y$  (realizacija).

Če je  $f(y) < f(x^{(n-1)})$ , vzamemo

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

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

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

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

Izkaže se, da ta opis določa markovsko verigo s stacionarno porazdelitvijo f. Če velja sklep  $f(y)>0 \implies \forall x: q(y\mid x)>0$ , ima veriga EZVŠ.

Bayesova aplikacija.

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

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

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

v resnici ne potrebujemo normalizacijske konstante v Bayesovi formuli. Tipični primeri predlaganih gostot:

1.  $(Y \mid X^{(n-1)} = x^{(n-1)}) \sim U(K_{\delta}(X^{(n-1)}))$  za fiksen  $\delta$  (krogla s polmerom  $\delta$ ), v neki metriki.



(Povrnljivost - povsod, kjer neničelne verjetnosti, jemlje  $\infty$ -krat.) (To pomeni  $q(y \mid x) = \frac{1}{Vol(K_{\delta}(x))} \cdot 1_{K_{\delta}(x)}(y)$  (namesto klasične uporabimo  $\infty$  metriko).)

2.  $(Y \mid X^{(n-1)} = x^{(n-1)}) \sim N\left(x^{(n-1)}, \Sigma\right)$  za fiksno  $\Sigma$ . (To pomeni  $q(y \mid x) = (2\pi)^{-\frac{dim}{2}} (det\Sigma)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\langle \Sigma^{-1}(y-x), (y-x) \rangle}$  - simetričnost  $\checkmark$ .) V tem primeru je  $Y \mid X^{(n-1)} = X^{(n-1)} + N(0, \Sigma)$ .

Metropolisov algoritem tipično nima ECLI: (.

#### 3.4.2 Metropolis-Hastingov algoritem

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

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

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

Enake lastnosti kot prej:

- $\bullet$  vedno dobimo verigo s stacionarno porazdelitvijo f
- če  $\forall x: q(\underline{\ }, x^{(n)})$  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  $f(x_1...x_n)$ ) na podlagi vzorčenja iz "gostot"  $f(x \mid y)$  ali  $f(y \mid x)$ .

<u>Motivacija</u>: 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.

- (i) 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.

Zqled.

Tipična aplikacija v Bayesovi statistiki je:

privzemimo model  $f(x \mid \theta_1, \theta_2)$  z apriorno gostoto  $f(\theta_1, \theta_2) = f(\theta_1), f(\theta_2)$ , kjer je  $f(\theta_1)$  iz konjugirane družine k modelu  $f(x \mid \theta_1, KONST), f(\theta_2)$  pa je iz konjugirane družine k modelu  $f(x \mid KONST, \theta_2)$ , 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

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

kar je aposteriorna gostota Bayesovega modela z gostotami  $f(x \mid \theta_1, \theta_2)$  iz apriorne gostote  $f(\theta_1)$ , kjer  $\theta_2$  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

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

z gostotami

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

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  $\sigma^2$  poznamo.

Izkaže se (vaja), da je družina {InvGama $(a,b) \mid a,b \in (0,\infty)$ } konjugirana k enoparametričnim modelom z gostotami 3.2, kjer  $\mu$  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

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

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

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

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

(i) Določimo  $\sigma_0^2=1.$  Vzorčimo  $\mu_0$ iz

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

(ii) vzorčimo  $\sigma_1^2$  iz  $f(\sigma^2 \mid \mu_0, x)$ , vzorčimo  $\mu_1^2$  iz . . . :

(Blagi pogoji so izpolnjeni, veriga ergodična.)

# 3.5 Markovske verige z zveznim prostorom stanj - appendix

Markovska veriga "na"  $\Sigma$  v diskretnem času je zaporedje merljivih preslikav  $X_i: \Omega \to \Sigma \ (i=0,1,2\dots)$ , kjer je  $\Omega$  verjetnostni prostor,  $\Sigma$  merljiv prostor

in velja

$$P(X_n \in A \mid X_{n-1} = x_{n-1} \dots X_0 = x_0) = P(X_n \in A \mid X_{n-1} = x_{n-1})$$
 (3.3)

za vse  $n \in \mathbb{N}, A \subset \Sigma$  in vse n-terice  $x_0 \dots x_{n-1} \in \Sigma$ .

Tu je  $\{P(\_ \mid x) \mid x \in \Sigma\}$  družina verjetnostnih mer na  $\Sigma$ , za katero velja, da je za vsako merljivo množico  $A \subset \Sigma$  preslikava  $\Sigma \to [0,1], x \mapsto \P(A \mid x)$  merljiva.

Prostoru  $\Sigma$  pravimo parameter stanj,  $X_i$  so členi verige, lastnosti 3.3 pa pravimo markovska lastnost.

Tu se bomo omejili na Borelove množice  $\Sigma \subset \mathbb{R}^r$  (z Borelovo  $\sigma$ -algebro.) Poudarimo, da so verjetnosti P(|x|) (pravimo jim "prehodne verjetnosti") neodvisne od n (torej za vse n enake).

#### Zqled.

Če ima  $X_0$  neko porazdelitev in velja  $X_n = X_{n-1} + \varepsilon_n$  (kjer so  $X_0, \varepsilon_1 \dots$  neodvisne in  $\epsilon_0 \sim N(0, V)$  za  $V \in \P(r)$  (V je s.p.d.)) in  $X_0, X_1, X_2 \dots$  markovska veriga in velja

$$P(A \mid x) = P(N(x, V) \in A).$$

Zqled. Metropolis-Hastingovova veriga:

- (1) imamo  $X_0 = x_0$ ,
- (2) če je  $X_{n-1} = x$ , potem realizacijo od  $X_n$  dobimo takole:
  - (i) vzorčimo y iz predlagane porazdelitve  $dP_{(Y|x)} = q(y \mid x)d\nu(y)$
  - (ii) vzorčimo  $u = U \sim U(0,1)$  in sprejmemo  $X_n = y$ , če  $u \leq \rho(x,y)$  oz.  $X_n = x$ , če  $u > \rho(x,y)$ , kjer

$$\rho(x,y) = \begin{cases} \min\{1, \frac{f(y)}{f(x)} \cdot \frac{q(x|y)}{q(y|x)}\}; f(x)q(y \mid x) \neq 0\\ 1; f(x)q(y \mid x) = 0 \end{cases}$$

Tu je f ciljna gostota (glede na  $\nu$ ),

(3)

$$P(X_{n} \in A \mid X_{n-1} = x)$$

$$= \int_{y \in \Sigma} P(X_{n} \in A \mid Y = y, X_{n-1} = x) dP_{(Y|x)}(x)$$

$$= \int_{y \in \Sigma} \int_{u=0}^{1} P(X_{n} \in A \mid U = u, Y = y, X_{n-1} = x) \cdot dP_{(U|Y=y, X_{n-1}=x)}(u) d\nu(y)$$

$$= \int_{y \in \Sigma} \left( \int_{u=0}^{\rho(x,y)} \dots du + \int_{u=\rho(x,y)}^{1} \dots du \right) q(y \mid x) d\nu(y)$$

$$= \int_{y \in \Sigma} \left( 1_{A}(y) \cdot q(y \mid x) + 1_{A}(x) \cdot (1 - \rho(x,y)) \right) q(y \mid x) d\nu(y)$$

$$= \int_{y \in A} \rho(x,y) q(y \mid x) d\nu(y) + 1_{A}(x) \int_{y \in \Sigma} (1 - \rho(x,y)) q(y \mid x) d\nu(y).$$

Privzemimo, da  $\nu$  nima atomov:  $\nu(x) = 0$  za vsak x:

$$\implies P(X_n \in A \mid X_{n-1} = x) = \int_{y \in \Sigma} (1 - \rho(x, y)) q(y \mid x) d\nu(y).$$

To je tipično u pozitivna verjetnost. To pomeni, da imajo prehodne verjetnosti atome u:  $P(x \mid x) > 0$  (vsaj za nekatere x).

#### Definicija 3.5.1.

Porazdelitev  $\pi$  je stacionarna za verigo  $\{X_i\}$ , če iz  $X_{n-1} \sim \pi$  sledi  $X_n \sim \pi$ .

#### Trditev 3.5.2.

Porazdelitev  $fd\nu$  je stacionarna porazdelitev M-H verige.

#### Dokaz 3.5.3.

Privzemimo  $dP_{X_{n-1}} = f d\nu$  in računajmo

$$P(X_n \in A) = \int_{x \in \Sigma} P(X_n \in A \mid X_{n-1} = x) dP_{X_{n-1}}(x)$$

$$= \int_{x \in \Sigma} \int_{y \in A} \rho(x, y) q(y \mid x) f(y) d\nu(y) d\nu(x)$$

$$+ \int_{x \in A} \int_{y \in \Sigma} q(x \mid y) d\nu(y) f(x) d\nu(x)$$

$$- \int_{x \in A} \int_{y \in \Sigma} \rho(x, y) q(x \mid y) f(x) d\nu(y) d\nu(x).$$

Upoštevamo

$$\int_{y \in \Sigma} q(x \mid y) f(x) d\nu(y) = 1.$$

Spomnimo se:

$$\rho(x,y) = \begin{cases} \min\{1, \frac{f(y)}{f(x)} \cdot \frac{q(x|y)}{q(y|x)}\}; f(x)q(y \mid x) \neq 0\\ 1; f(x)q(y \mid x) = 0 \end{cases}$$

Vidimo, da velja enakost (za  $\forall x, y$ )

$$\rho(x,y)q(y\mid x)f(x) = \rho(y,x)q(x\mid y)f(y)$$

in

$$\int_{x\in\Sigma}\int_{y\in A}\rho(x,y)q(y\mid x)f(y)d\nu(y)d\nu(x)=\int_{y\in\Sigma}\int_{x\in A}\rho(y,x)q(x\mid y)f(x)d\nu(x)d\nu(y).$$
 Zato je

$$P(X_n \in A) = \int_{x \in A} f(x) d\nu(y).$$

Prehodne verjetnosti P(|x) generirajo verigo prehodnih verjetnosti  $P(A \mid x) = P(X_n \in A \mid X_0 = x)$ .

To verjetnost, da veriga obišče A v času n ob pogoju, da je začela v x, želeni lastnosti (ki implicirata ustrezna ERVŠ) sta

- $||P^n(|x) \pi|| \stackrel{n \to \infty}{\to} 0$  za skoraj vse x,
- $||P^n(|x) \pi|| \stackrel{n \to \infty}{\to} 0$  enakomerno v x,

kjer za predznačeno mero  $\mu$  definiramo normo totalne variacije

$$||u|| = \sup_{A} |\mu(A)|.$$

Za osnovne lastnosti  $P^n(A \mid x)$  izračunajmo

$$P(X_{n} \in A_{n}, X_{n-1} \in A_{n-1} \dots X_{1} \in A_{1} \mid X_{0} = x_{0})$$

$$= \int_{x_{1} \in \sigma} P(X_{n} \in A_{n} \dots X_{1} \in A_{1} \mid X_{1} = x_{1}, X_{0} = x_{0}) dP_{(X_{1} \mid X_{0} = x_{0})}(x_{1})$$

$$= \int_{x_{1} \in A_{1}} P(X_{n} \in A_{n} \dots X_{2} \in A_{2} \mid X_{1} = x_{1}, X_{0} = x_{0}) dP_{(X_{1} \mid X_{0} = x_{0})}(x_{1} \mid x_{0})$$

$$= \int_{x_{1} \in A_{1}} \int_{x_{2} \in \Sigma} P(X_{n} \in A_{n} \dots X_{2} \in A_{2} \mid X_{2} = x_{2}, X_{1} = x_{1}, X_{0} = x_{0}) dP(x_{2} \mid x_{1}) dP(x_{1} \mid x_{0})$$

$$= \dots$$

$$= \int_{x_{1} \in A_{1}} \dots \int_{x_{n} \in A_{n}} dP(x_{n} \mid x_{n-1}) \dots dP(x_{1} \mid x_{0}).$$

Posebej:

$$P^{n}(A \mid x) = \int_{x_{1} \in \Sigma} \cdots \int_{x_{n-1} \in \Sigma} \int_{x_{n} \in A} dP(x_{n} \mid x_{n-1}) \dots dP(x_{1} \mid x).$$

Od tod sledi

$$P^{n}(A \mid x) = \int_{x_{1} \in \Sigma} \cdots \int_{x_{m} \in \Sigma} \left( \int_{x_{m+1} \in \Sigma} \cdots \int_{x_{n} \in A} dP(x_{n} \mid x_{n-1} \dots dP(x_{m+1} \mid x_{m})) \right) dP(x_{m} \mid x_{m-1}) \dots dP(x_{1} \mid x_{0}).$$

Tukaj je

$$\int_{x_{m+1} \in \Sigma} \cdots \int_{x_n \in A} dP(x_n \mid x_{m-1} \dots dP(x_{m+1} \mid x_m)) = P^{n-m}(A \mid x_m)$$

in zato

$$P^{n}(A \mid x) = \int_{x_1 \in \Sigma} P^{n-m}(A \mid x_m) \cdot dP^{m}(x_m \mid x).$$

Tej enakosti rečemo enakost Chapman-Kolmogorova.

## 3.6 MCMC diagnostika

#### 3.6.1 MCMC varianca

Želimo oceniti  $E_f(h) = \int h(x)f(x)dx$ .

Privzemimo, da je  $X_0, X_1 \dots$  markovska veriga s stacionarno porazdelitvijo "f", ki ima primerne ergodične lastnosti.

Označimo  $E_f(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i)$  (standardna MCMC cenilka za  $E_f(h)$  za veriga do časa n).

Definirajmo 
$$D_{MCMC}\left(\widehat{E_f(h)(x)}\right) = E\left(\left(\widehat{E_f(h)(x)}\right) - E_f(h)\right)^2\right).$$

(To je v resnici SNK glede na ocenjeno karakteristiko  $E_f(h)$ . V splošnem  $\widehat{E_f(h)}$  ni nepristranska cenilka za  $E_f(h)$ .)

Tu je 
$$\widehat{E_f(h)} - E_f(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h(X_i) - E_f(h))$$
, velja

$$D_{MCMC}\left(\widehat{E_f(h)}\right) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^k E((h(X_i) - E_f(h))^2) + \frac{1}{n^2} \sum_{i \neq j} E((h(X_i) - E_f(h))(h(X_j) - E_f(h))).$$

Privzemimo, da je veriga STACIONARNA, t.j.  $X_i \sim f$  za vse i (to sledi iz  $X_0 \sim f$ ). Tedaj je

- (i)  $E((h(X_i) E_f(h))^2) =: \sigma^2$  varianca ("s.s."  $h(X_i)$ ) (enaka za vse i) in
- (ii)  $\sigma_{i,j} = E((h(X_i) E_f(h))(h(X_j) E_f(h)))$  kovarianca "s.s."  $h(X_i)$  in  $h(X_j)$ , ki je odvisna le od |i-j|: če je npr i < j, je

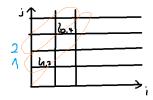
$$E(h(X_i)h(X_j)) = \int E(h(x_i)h(x_j) \mid X_{i-1} = x_{i-1})dx_{i-1}.$$

Sledi 
$$D_{MCMC}\left(\widehat{E_f(h)}\right) = \frac{\sigma^2}{n} + \frac{2}{n^2} \sum_{i < j} \sigma_{i,j}$$
 oziroma

$$nD_{MCMC}\left(\widehat{E_f(h)}\right) = \sigma^2 + \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} \sigma_{i,j}$$

$$= \sigma^2 + \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)\sigma_{0,k}$$

$$= \sigma^2 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} \sigma_{0,k} - \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n-1} k\sigma_{0,k}.$$



Izkaže se, da pri primernih ergodičnih lastnostih velja  $\sum_{k=1}^{\infty} |\sigma_{0,k}| < \infty$  in posledično  $\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} k\sigma_{0,k} = 0$ .

Zato definiramo asimptotično MCMC varianco kot

$$\gamma_k^2 = \sigma^2 + 2\sum_{k=1}^{\infty} \sigma_{0,k},$$

kjer je  $\sigma^2$  "stacionarna" varianca,  $\sigma_{0,k}$  pa so "stacionarne rang-k" avtokorelacijske verige.

Izrek 3.6.1. Pri primernih ergodičnih lastnostih velja

(ECLI): 
$$\frac{\widehat{E_f(h)} - E_f(h)}{\frac{\gamma_k}{\sqrt{n}}} \longrightarrow N(0,1)$$

(za KATEROKOLI začetno porazdelitev).

Je to že dovolj za konstrukcijo (asimptotičnega) intervala zaupanja za  $E_f(h)$ ? Teoretično da:

$$\lim_{n\to\infty} P\left(E_f(h)\in\left[\widehat{E_f(h)}-z_{\frac{\alpha}{2}}\cdot\frac{\gamma_k}{\sqrt{n}},\widehat{E_f(h)}+z_{\frac{\alpha}{2}}\cdot\frac{\gamma_k}{\sqrt{n}}\right]\right)=1-\alpha.$$

Za praktično rabo je treba  $\gamma_k^2$  oceniti iz vzorca. Preprosto je oceniti  $\sigma^2$ ; vzamemo kar

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

Vsoto vrste  $\sum_{k=1}^n \sigma_{0,k}$  je zahtevno oceniti.

Za neposredno ocenjevanje  $\gamma_k^2$  si oglejmo metodo povprečij neprikrivajočih se serij.

Privzemimo, da velja n=ab za neki  $a,b\in\mathbb{N}$ . Veriga  $X_1\ldots X_n=X_{ab}$  razdelimo v serije ("batches")

$$X_1 \dots X_b \stackrel{\text{povprečimo}}{\longrightarrow} \widehat{\mu_{b,1}}$$

$$X_{b+1} \dots X_{2b} \longrightarrow \widehat{\mu_{b,2}}$$

. . .

$$X_{(a-1)b+1} \dots X_{ab} \longrightarrow \widehat{\mu_{b,a}}.$$

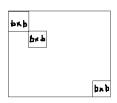
Pripomnimo, da je  $\widehat{\mu_{b,k}} = \frac{1}{b} \sum_{i=(k-1)b+1}^{kb} h(X_i)$ .

Tudi to je MCMC ocena za  $E_f(h)$ . Pišimo še  $\widehat{\mu_n} = \widehat{\mu_{ab}} = \frac{1}{a} \sum_{i=1}^n h(X_i)$ .

Potem je
$$\widehat{\gamma_k^2} = \frac{b}{a} \sum_{k=1}^a (\widehat{\mu_{b,k}} - \widehat{\mu_k})^2$$
ocena za  $\gamma_k^2$ 

Pišimo  $\mu = E_f(h)$ . Če začnemo z  $\widehat{\gamma}_k^2 = \frac{b}{a} \sum_{k=1}^a (\widehat{\mu_{b,k}} - \mu + \mu - \widehat{\mu_b})^2$ , račun pripelje

$$\widehat{\gamma_k^2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (h(X_i) - \mu)^2 + \frac{1}{a} \sum_{k=1}^a \frac{1}{b} \sum_{i=(k-1)b+1, i \neq j}^{kb} ((h(X_i) - \mu)(h(X_j) - \mu))$$
$$- \frac{1}{an} \left( \sum_{i=1}^n (h(X_i) - \mu)^2 + \sum_{i \neq j} (h(X_i) - \mu)(h(X_j) - \mu) \right).$$



$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (h(X_i) - \mu)^2 \stackrel{n \to \infty}{\longrightarrow} \sigma^2 \text{ (EZVŠ)},$$

$$\frac{1}{a} \sum_{k=1}^{a} \frac{1}{b} \sum_{i=(k-1)b+1, i \neq j}^{kb} ((h(X_i) - \mu)(h(X_j) - \mu)) \xrightarrow{a \to \infty, b \to \infty} 2 \sum_{k=1}^{\infty} \sigma_{0,k}, \\
\text{ostalo} \xrightarrow{a \to \infty, b \to \infty} 0.$$

Priporočeni izbiri sta  $a = \sqrt{n}$ ,  $a = \sqrt[3]{n}$ .

V praksi to realiziramo kot  $a(k) \cdot b(k) = n(k) = k \cdot k^2 \ k = 1, 2 \dots$ 

Sledi želeni ECLI: 
$$\lim_{n\to\infty} \frac{\widehat{F_f(h)}n(k) - E_f(h)}{\sqrt{\widehat{\gamma_k^2}(a(k),b(k))}/\sqrt{n}} \stackrel{D}{=} N(0,1)$$
in še EIZ (ergodični interval zauj

in še EIZ (ergodični interval zaupanja) (stopnje zaupanje  $1-\alpha)$ 

$$\left[\widehat{E_f(h)} - z_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widehat{\gamma_k^2(a(k),b(k))} \over a(k) \cdot b(k)}, \widehat{E_f(h)} + z_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\widehat{\gamma_k^2(a(k),b(k))} \over a(k) \cdot b(k)}\right].$$

Ēfektivna velikost vzorca.

Naj bo  $\sigma^2 = \int (h(x) - E_f(x))^2 f(x) dx$  kot prej.

Če bi znali vzorčiti (NEP) iz f, bi vzorčno povprečje imelo varianco  $\frac{\sigma^2}{n}$ .

Za MCMC vzorčenje imamo  $D_{MCMC}(\widehat{E_f(h)}) \approx \frac{\gamma_k^2}{n}$ .

 Definicija 3.6.2. Efektivna velikost vzorca  $n_{eff}$  za dejansko velikost vzorca n je rešitev enačbe  $\frac{\gamma_k^2}{n} = \frac{\sigma^2}{n_{eff}}$ .

Pri danem vzorcu seveda  $n_{eff}$  ocenimo z

$$\widehat{n_{eff}} = n \frac{\widehat{\sigma^2}}{\gamma_k^2} = \frac{\widehat{\sigma^2}}{\gamma_k^2/n}.$$

#### 3.6.2 Mešanje

Kvaliteto konvergence dane markovske verige za dano velikost vzorca n lahko ocenimo tudi z "mešanjem" neodvisnih verig, ki začnejo v "mešano" različnih točkah prostora stanj.

Privzemimo torej, da so  $X_{ij}$   $1 \le i \le n$  neodvisne markovske verige z začetkom v  $X_{01} \dots X_{0m}$  (torej  $1 \leq j \leq m$ ).

Tu so  $X_{0j}$   $(1 \le j \le m)$  lahko konstruirani "ročno" ali pa jih vzorčimo iz neke fiksne porazdelitve z veliko disperzijo.

Povzemimo: skupine  $(X_{1j} ... X_{nj})$  so med seboj neodvisne  $(1 \le j \le m)$ ,

 $X_{i-1,j} \to X_{i,j}$  pa so dani z prehodno verjetnostjo.

Označimo

$$W = \frac{1}{m(n-1)} \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n} \left( h(X_{ij}) - \overline{h(X_{.j})} \right)^2$$
 (variance "znotraj" skupin),

$$B = \frac{n}{m-1} \sum_{j=1}^{m} \left( \overline{h(X_{.j})} - \overline{h(X_{..})} \right)^2 \text{ (varianca "med" skupinami)}.$$
 Končno definiramo še  $\widehat{\sigma^{2+}} = \widehat{D_f(h)^+} = \frac{n}{n-1}W + \frac{1}{n}B$ . Izkaže se, da  $\widehat{\sigma^{2+}}$  precenjuje  $\sigma^2$ , medtem ko  $W$  podcenjuje  $\sigma^2$ .

Končno definiramo še 
$$\widehat{\sigma^{2+}} = \widehat{D_f(h)^+} = \frac{n}{n-1}W + \frac{1}{n}B$$
.

Velja 
$$\lim_{n\to\infty} \sqrt{\frac{\widehat{\sigma^{2+}}}{W}} = 1;$$

če imamo za dami k  $\frac{\widehat{\sigma^{2+}}}{W} >> 1, n$  povečujemo.

## Poglavje 4

## Normalni modeli

<u>Uvodni zgled:</u> 1-razsežni "NEP-normalni" model, kjer je  $(X \mid \mu, \sigma^2) \sim N(([\mu : \mu], \sigma^2 I_{n \times n}))$  z vzorčnimi gostotami

$$f(x \mid \mu, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} (\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2)}.$$
 (4.1)

Izkaže se, da je konjugirana družina apriornih gostot podana kot

$$f(\mu, \sigma^2) = f_{\text{InvGama}(a,b)}(\sigma^2) \cdot f_{N(\mu_0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0})}(\mu). \tag{4.2}$$

(Za vajo lahko izpeljete; razcepite  $\psi = \psi_1 + \psi_2$  (log?)  $\to \tau_1, \tau_2$  namesto  $\tau$ ). Tu so  $\mu_0 \in \mathbb{R}, a, b, \kappa_0 \in (0, \infty)$  parametri konjugirane družine;  $\kappa_0$  interpretiramo kot število prostorskih stopenj (fiktivno).

## 4.1 Dvofazna predstavitev

Privzemimo razcep $\vartheta=(\vartheta_1,\vartheta_2)$ in zapišimo

$$f(\vartheta_1,\vartheta_2) = f(\vartheta_1 \mid \vartheta_2) \cdot f(\vartheta_2).$$

Za aposteriorno gostoto pri X = x velja

$$f(\vartheta_1, \vartheta_2 \mid x) = \frac{f(x \mid \vartheta_1, \vartheta_2) \cdot f(\vartheta_1 \mid \vartheta_2)}{f(x \mid \vartheta_2)} \cdot \frac{f(x \mid \vartheta_2) \cdot f(\vartheta_2)}{f(x)}$$

oz.

$$f(\vartheta_1, \vartheta_2 \mid x) = f(\vartheta_1 \mid \vartheta_2, x) \cdot f(\vartheta_2 \mid x).$$

Tu je  $f(\vartheta_1 \mid \vartheta_2, x)$  aposteriorna gostota modela z vzorčnimi gostotami  $f(x \mid \vartheta_2)$  in apriorno gostoto  $f(\vartheta_2)$ .

Tipično je  $f(\vartheta_1 \mid \vartheta_2, x)$  enostavneje izračunati (eksplicitno) kot  $f(\vartheta_2 \mid x)$ , ker za slednje potrebujemo še  $f(x \mid \vartheta_2)$ .

Načeloma lahko  $f(x \mid \vartheta_2)$  izračunamo z integriranjem:

$$f(x \mid \vartheta_2) = \int f(x \mid \vartheta_1, \vartheta_2) \cdot f(\vartheta_1 \mid \vartheta_2) d\vartheta_1,$$

vendar:(

Aplicirajmo na vzorčne gostote z 4.1 z apriorno 4.2.

(i) 
$$f(\mu \mid \sigma^2, x)$$
 "pripada" modelu  $(X \mid \mu) \sim N \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{bmatrix}, \sigma^2 I \end{pmatrix}$   $(\sigma^2 \text{ konst.})$  za apriorno  $M \sim N \left(\mu_0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0}\right) = N(\mu_0, \tau_0^2).$  To pomeni  $f(\mu \mid \sigma^2, x) \leftrightarrow N(\mu, \tau_0^2)$ , kjer je

$$\mu_1 = \frac{\frac{\sigma^2}{n}}{\frac{\sigma^2}{n} + \tau_0^2} \mu_0 + \frac{\tau_0^2}{\frac{\sigma^2}{n} + \tau_0^2} \overline{x}$$

in

$$\tau_1^2 = \frac{\frac{\sigma^2}{n} \cdot \tau_0^2}{\frac{\sigma^2}{n} + \tau_0^2} = \frac{\sigma^2}{n + \kappa_0}.$$

Interpretacija variance: več primerov.

(ii) Za  $f(\sigma^2 \mid x)$  potrebujemo  $f(x \mid \sigma^2)$ . DN: intergirajte. Oglejmo si raje

$$f(x, \mu \mid \sigma^{2}) = f(x \mid \mu, \sigma^{2}) \cdot f(\mu \mid \sigma^{2})$$

$$\propto e^{-\frac{1}{2\sigma^{2}} \sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \mu)^{2}} \cdot e^{-\frac{1}{2\left(\frac{\sigma^{2}}{\kappa_{0}}\right)} (\mu - \mu_{0})^{2}}$$

$$= e^{-\frac{1}{2\sigma^{2}} \left\langle W \begin{bmatrix} x_{1} \\ \vdots \\ x_{n} \\ \mu \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_{1} \\ \vdots \\ x_{n} \\ \mu \end{bmatrix} \right\rangle},$$

kjer je

$$W = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma^2} & \dots & 0 & -\frac{1}{\sigma^2} \\ 0 & \dots & \vdots & -\frac{1}{\sigma^2} \\ \vdots & \vdots & \frac{1}{\sigma^2} & -\frac{1}{\sigma^2} \\ -\frac{1}{\sigma^2} & \frac{1}{\sigma^2} & \dots & \frac{\kappa_0 + n}{\sigma^2} \end{bmatrix}.$$

Vidimo, da je  $(X, M \mid V \sim \sigma^2)$  normalna porazdelitev  $\implies (X \mid V \sim \sigma^2)$  je kot robna tudi normalna.

 $\stackrel{\text{!!}}{\Longrightarrow}$  potrebujemo le  $E(X \mid V \sim \sigma^2)$  in  $Var(X \mid V \sim \sigma^2)$ .

Vemo:

$$\begin{split} E(X \mid V \sim \sigma^2) = & E(E(X \mid M, V) \mid V \sim \sigma^2) \text{ in} \\ Var(X \mid V \sim \sigma^2) = & E(Var(X \mid M, V) \mid V \sim \sigma^2) + \\ & Var(E(X \mid M, V) \mid V \sim \sigma^2). \end{split}$$

Naprej:

$$\begin{split} E(X\mid M=\mu, V\sim\sigma^2) &= \mu\cdot \begin{bmatrix} 1\\ \vdots\\ 1 \end{bmatrix} \implies E(X\mid M, V) = \begin{bmatrix} 1\\ \vdots\\ 1 \end{bmatrix} \cdot M \\ Var(X\mid M=\mu, V\sim\sigma^2) &= \sigma^2 I \implies Var(X\mid M, V) = V\cdot I. \end{split}$$

Sledi:

$$E(X \mid V \sim \sigma^2) = E\left(\begin{bmatrix} 1\\ \vdots\\ 1 \end{bmatrix} M \mid V \sim \sigma\right) = \begin{bmatrix} 1\\ \vdots\\ 1 \end{bmatrix} \mu_0 \text{ in}$$

$$Var(X \mid V \sim \sigma^2) = \sigma^2 I + \begin{bmatrix} 1\\ \vdots\\ 1 \end{bmatrix} Var(M \mid V \sim \sigma^2) \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \sigma^2 \left(I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1\\ \vdots & & \vdots\\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}\right).$$

Lahko zapišemo

$$f(x \mid \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot \det \left( I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1}$$

$$-\frac{1}{2\sigma^2} \left\langle \left( \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \left( x - \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \vdots \\ \mu_0 \end{bmatrix} \right)_{,x} - \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \vdots \\ \mu_0 \\ \mu_0 \end{bmatrix} \right\rangle$$

$$\cdot e$$

Velja še

$$f(\sigma^{2}) = f_{\text{InvGama}}(\sigma^{2}) = \frac{b^{a}}{\gamma(a)} \cdot (\sigma^{2})^{-a-1} \cdot e^{-\frac{b}{\sigma^{2}}}$$

$$\Longrightarrow f(\sigma^{2} \mid x) \propto (\sigma^{2})^{-\frac{n}{2}} \cdot e^{-\frac{1}{\sigma^{2}} \frac{1}{2} (\langle \dots, \dots \rangle)} \cdot (\sigma^{2})^{-a-1} e^{-\frac{b}{\sigma^{2}}}$$

$$\leftrightarrow \text{InvGama} \left( a + \frac{n}{2}, b + \frac{1}{2} \left\langle \left( I + \frac{1}{\kappa_{0}} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \left( x - \begin{bmatrix} \mu_{0} \\ \vdots \\ \mu_{0} \end{bmatrix} \right), x - \begin{bmatrix} \mu_{0} \\ \vdots \\ \mu_{0} \end{bmatrix} \right\rangle$$

 $\leftrightarrow$ : konjugirana porazdelitev.

Prepričali smo se, da je opisana družina apriornih porazdelitev konjugirana, in sicer

- $a \rightarrow a + \frac{n}{2}$
- $b \to b + \frac{1}{2} \langle \dots, \dots \rangle$
- $\mu_0 \to \frac{\kappa_0}{\kappa_0 + n} \mu_0 + \frac{n}{\kappa_0 + n} \overline{x}$
- $\kappa_0 \to \kappa_0 + n$ .

Nova b in  $\mu_0$  sta odvisna od realizacije  $(x_1 \dots x_n)$ .

$$b + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2 + \frac{n \cdot \kappa_0}{\kappa_0 + n} (\overline{x} - \mu_0)^2 \right)$$

### 4.2 Hierarhični modeli

Spomnimo se na normalni model "preizkušnja m terapij". Frekvencistično gledamo neodvisne skupine s.s.

$$X_{1,1}$$
  $X_{1,2}$   $\dots$   $X_{1,m}$ 

$$\vdots$$
 
$$\vdots$$
 
$$X_{n_m,m}$$

$$X_{n_1,1}$$
 
$$\vdots$$

$$X_{n_2,2}$$

Velikosti  $n_1 + \cdots + n_m = n$ .

Funkcija neodvisnosti:  $X_{ij} \sim N(\mu_j, \sigma^2)$ .

Vse variance so enaka (homoskelastičnost) zaradi "preprostosti".

Najbolj nas zanimajo (ocene) za  $\mu_j$  in  $\sigma^2$ , "optimalne" frekventistične cenilke so:

$$\hat{\mu}_{j} = \frac{1}{n_{j}} \sum_{i=1}^{n_{j}} X_{ij} = \overline{X}_{.j}$$

$$\hat{\sigma} = \frac{1}{n-m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n_{j}} (X_{ij} - \overline{X}_{.j})^{2}.$$

Zadnjič: model m terapij  $N(\mu_j, \sigma^2)$   $(1 \le j \le m)$ .

Po preizkušnju domnev je glavna t.i. domneva homogenosti

$$\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_m.$$

V pridruženem Bayesovem modelu začnemo z idejo, da so  $\mu_j$  "poustvarjanje" nekega "izhodiščnega"  $\mu_0$ .

 $\sigma^2$ našega homoskelastičnega modela je znana.  $\mu_0, \tau_0^2, a, b$   $\downarrow \\ \mu, \eta^2 \in N(\mu_0, \tau_0^2) \times \text{InvGama}(a, b) - \text{Bayesov parameter}$   $\downarrow \\ \mu_1 \dots \mu_m \in N(\mu, \eta^2) \times \dots \times N(\mu, \eta^2) - \phi - \text{Bayesov parameter}$   $\downarrow \text{(neodvisno)}$   $x_{i_1} \in N(\mu_1, \sigma^2) \ (1 \leq i \leq n_1) \dots x_{i_m} \in N(\mu_m, \sigma^2) \ (1 \leq i \leq n_m) - \vartheta - \text{vzorec}$  (večji  $\tau^2$ , bolj  $\mu_i$  različni).

### 4.2.1 Abstraktna opredelitev hierarhičnega modela

Bayesov parameter je oblike  $(\vartheta, \phi)$  kjer  $\phi$  imenujemo hiperparameter,  $\vartheta$  pa populacijski parameter. Za vzorčne gostote velja temeljni privzetek (HM - hierarhični model)  $f(x \mid \vartheta, \phi) = f(x \mid \vartheta)$ . Aposteriorne gostote bi lahko predstavili kot

$$f(\vartheta \mid \phi, x) = \frac{f(x \mid \vartheta, \phi) f(\vartheta \mid \phi) f(\phi)}{f(x)}$$
$$= \frac{f(x \mid \vartheta) f(\vartheta)}{f(x)} \cdot \frac{f(\vartheta \mid \phi) f(\phi)}{f(\vartheta)}$$
$$= f(\vartheta \mid x) f(\phi \mid \vartheta).$$

Ta predstavitev tipično ni uporabna, ker ne poznamo  $f(\vartheta)$ . Zato raje

- $f(\vartheta \mid \phi, x) = \frac{f(x|\vartheta, \phi)f(\vartheta|\phi)}{f(x|\phi)}$ : aposteriorna gostota modela z vzorčnimi  $f(x \mid \vartheta)$  in apriornimi  $f(\vartheta \mid \phi)$ ,
- $f(\phi \mid \vartheta, x) = \frac{f(x|\vartheta)f(\phi|\vartheta)}{f(x|\vartheta)}$ : aposteriorna gostota modela z vzorčnimi  $f(\vartheta \mid \phi)$  in apriornimi  $f(\phi)$

 $(\implies$  z Gibsom  $f(\vartheta, \phi \mid x))$ . Aplicirajmo na naš zgled:  $\phi = (\mu, \eta^2)$ 

$$n = \sum_{j=1}^{m} n_j$$
$$\vartheta = (\mu_1 \dots \mu_m)$$

$$f([x_{ij}] \mid \mu_1 \dots \mu_m) = \prod_{j=1}^m (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ij} - \mu_j)^2}$$
$$= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ij} - \mu_j)^2}$$

$$j=1\ldots m,\ i=1\ldots n_j.$$

Populacijska apriorna:

$$f(\mu_1 \dots \mu_m \mid \mu, \eta^2) = (2\pi\eta^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\eta^2} \sum_{j=1}^m (\mu_j - \mu)^2},$$

hiperapriorna:

$$f(\mu, \sigma^2) = f_{N(\mu_0, \tau_0^2)}(\mu) \cdot f_{\text{InvGama}(a,b)}(\eta^2).$$

$$f(\mu_1 \dots \mu_m \mid \mu, \eta^2, [x_{ij}])$$

$$\propto \prod_{i=1}^m e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ij} - \mu_j)^2} \cdot e^{-\frac{1}{2\eta^2} (\mu_j - \mu)^2}.$$

Analogije z aposteriornim NEP-normalnim modelom:

- $\sigma^2 \sigma^2$
- $x_{ij} x_i$
- $\mu_i \mu$
- $\eta^2 \tau_0^2$
- $\mu_j \mu$
- $\mu \mu_0$ .

Ta pogojna aposteriorna porazdelitev je

$$\prod_{j=1}^{m} N\left(\frac{\frac{\sigma^2}{n_j}}{\frac{\sigma^2}{n_i} + \eta^2} \mu + \frac{\eta^2}{\frac{\sigma^2}{n_i} + \eta^2} \overline{x_{.j}}, \frac{\frac{\sigma^2}{n_j} \cdot \eta^2}{\frac{\sigma^2}{n_j} + \eta^2}\right).$$

 $f(\mu, \eta^2 \mid \mu_1 \dots \mu_m)$  1-razsežni NEP-normalni model s polkonjugirano apriorno porazdelitvijo

$$f(\mu \mid \eta^{2}, \mu_{1} \dots \mu_{m}) \dots N\left(\frac{\frac{\tau_{0}^{2}}{m}}{\frac{\tau_{0}^{2}}{m} + \tau_{0}^{2}} \mu_{0} + \frac{\tau_{0}^{2}}{\frac{\tau_{0}^{2}}{m} + \tau_{0}^{2}} \overline{\mu}, \frac{\frac{\tau_{0}^{2}}{m} \cdot \tau_{0}^{2}}{\frac{\tau_{0}^{2}}{m} + \tau_{0}^{2}}\right)$$
$$f(\tau^{2} \mid \mu, \mu_{1} \dots \mu_{m}) \dots \text{InvGama}\left(a + \frac{m}{2}, b + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (\mu_{j} - \mu)^{2}\right).$$

**Definicija 4.2.1.** Naj bo  $\nu$  mera na  $B(\Sigma)$ . Tedaj je veriga  $\{X_n\}$   $\nu$ -ireducibilna, če iz  $\nu(A) > 0$  sledi

$$\forall x \; \exists m = n_n : \; P^n(A \mid x) = P(X_m \in A \mid X_0 = x) > 0.$$

Če naj velja EZVŠ, moramo vsako množico A, za katero

$$\pi(A) = \int_A d\pi(y) = \int_A f(y)dy > 0$$

obiskati neskončno-mnogokrat. Torej nas v našem kontekstu zanima  $\pi$ -ireducibilnost, kjer je  $\pi$  stacionarna porazdelitev.

Primer. Če iz f(y) > 0 sledi  $q(y \mid x) > 0$ , je M-H (Metropolis-Hastingova) veriga  $\pi$ -ireducibilna.

<u>Komentar</u>: zgornji pogoj je za praktične namene pogosto pomešan? (neuporaben?).

**Definicija 4.2.2.** Naj bo  $\pi$  stacionarna porazdelitev verige  $\{X_n\}$ , ki je  $\pi$ -ireducibilna. Veriga  $\{X_n\}$  je periodična s periodo  $d \geq 2$ , če obstajajo paroma disjunktne Borelove množice  $E_0 \dots E_{d-1}$ , za katere velja

$$\forall i \in \{0 \dots d-1\} \ \forall x \in E_i : \ P(E_{i+1 \bmod d} \mid x) = 1.$$

Pripomnimo, da tedaj sledi

$$\forall x \in E_i : P^d(E_i \mid x) = 1.$$

(Naj bo  $x \in E_i$ . Tedaj

$$P^{2}(E_{i+2 \mod d} \mid x) = \int_{\Sigma} P(E_{i+2 \mod d} \mid y) dP(y \mid x)$$

$$\geq \int_{y \in E_{i+1 \mod d}} \dots$$

$$= \int_{y \in E_{i+1 \mod d}} dP(y \mid x) = 1.$$

Če veriga ni periodična, je aperiodična.

**Trditev 4.2.3.** Če sta f(y) in  $q(y \mid x)$  pozitivni in zvezni povsod na  $\Sigma = \mathbb{R}^r$  oz  $\Sigma \times \Sigma = \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^r$ , je  $\pi$ -ireducibilna M-H veriga tudi aperiodična.

Izrek 4.2.4. Če je M-H veriga  $\pi$ -ireducibilna in aperiodična, velja

$$\lim_{n \to \infty} \sup_{A \in B(\mathbb{R}^r)} |P^n(A \mid x) - \pi(A)| = 0$$

 $\pi = s.s.[x]$  (za s.g. vsak x).

Izrek 4.2.5. Privzemimo  $q(y \mid x) = q(y)$  za  $\forall x$  (neodvisni M-H) in q(y) > 0 ter f(y) > 0. Če obstaja konstanta M, za katero je  $\forall y : f(y) < Mq(y)$ , je M-H veriga ENAKOMERNO ERGODIČNA, obstaja zaporedje  $r(n) \stackrel{n \to \infty}{\longrightarrow} 0$ , za katero velja  $\sup_A |P^n(A \mid x) - \pi(A)| \le r(n)$ . Tu obstaja eksplicitni izraz za r(n).

Opomba. Pri predpostavkah izreka zmano s A/R simulirati NEODVISNO vzorčenje iz $\pi.$ 

**Definicija 4.2.6.** Naj bo  $\pi$  stacionarna oprazdelitev verige  $\{X_n\}$ , ki je  $\pi$ ireducibilna. Tedaj je ta veriga POVRNLJIVA, če iz  $\pi(A) > 0$  sledi

- (i)  $P(X_n \in A \text{ neskončno mnogokrat } | x) > 0 \text{ za } \forall x,$
- (ii)  $P(X_n \in A$ neskončno mnogokrat $\mid x) = 1$  za  $\pi\text{-skoraj}$  vse x.

**Definicija 4.2.7.** Veriga je Harrisov povrnljiva, če velja (ii) za  $\forall x$ .

Izrek 4.2.8. Naj bo $\pi$  stacionarna porazdelitev verige  $\{X_n\}$ , ki je  $\pi$ -ireducibilna. Tedaj je veriga povrnljiva.

- Če je veriga še aperiodična, velja  $\lim_{n\to\infty} \sup_A |P^n(A\mid x) \pi(A)| = 0$  za vsak x ( $\pi$ -s.g. [x]).
- Če je veriga Harrisov povrnljiva, velja  $\lim_{n\to\infty} \sup_A B\left(P^n(A\mid x) \pi(A)\right) = 0$  za vsak x.

Poleg tega v tem primeru velja EZVŠ v obliki:  $\forall x \forall$  integrabilna h:

$$P\left(\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^nh(x_i)=\int h(u)f(u)du\right)=P\left(\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^nh(x_i)=\int h(u)d\pi(u)\mid x\right)=1.$$

**Trditev 4.2.9.**  $\pi$ -ireducibilna M-H veriga je Harrisov povrnljiva.

Izrek 4.2.10. Privzemimo Metropolisovo verigo oblike  $q(y \mid x) = q(y - x)$ , kjer je q simetrična okrog 0. Naj bo  $\Sigma = \mathbb{R}^r$ . Tedaj pridružena veriga "nikdar" ni enakomerno ergodična.

## 4.3 Linearna regresija

## 4.3.1 Večrazsežna normalna porazdelitev

Pravimo  $X \sim N(\mu, \Sigma)$  za  $\mu \in \mathbb{R}^n$  in  $\sigma \in P(n)$  (pozitivna definitna  $n \times n$ ) matrika), če ima  $P_X$  Lebesgueovo gostoto

$$f(\mu, \Sigma) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (det\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\langle \Sigma^{-1}(x-\mu), x-\mu \rangle}.$$

Posebej  $f(0,I)=(2\pi)^{-\frac{n}{2}}e^{-\frac{1}{2}\|x\|^2}$  je gostota t.i. STANDARDNE n-razsežne normalne porazdeliteve.

<u>Transformacija</u>. Če je  $A: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$  linearna surjekcija in je  $X \sim N(\mu, \Sigma)$ , je za  $v \in \mathbb{R}^m$   $Ax + v \sim N(A\mu + v, A\Sigma A^T)$  (tu vzamemo  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ).

<u>Posebej</u>. Če je  $Z \sim N(0, I)$  in je  $\Sigma = AA^T$  (za  $\Sigma, A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ), je  $Az + \mu \sim N(\mu, \Sigma)$ ; torej vzorčenje  $X \in N(\mu, \Sigma)$  realiziramo z vzorčenjem  $z \in N(0, I_{n \times n})$  in transformacijo  $x = Az + \mu$ .

### 4.3.2 Klasična standardna linearna regresija in MNK

MNK: metoda najmanjših kvadratov.

Pri linearni regresiji skušamo "proučevano" s.s. Y (ki jo je drago meriti ali pa je rezultat okoliščin v prihodnosti) napovedati na podlagi vrednosti "cenejših" t.i. pojasnjevalnih / napovedovalnih s.s.  $X_1 \dots X_p$  s pomočjo zveze

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p.$$

Zgled. Še vedno je v uporabi t.i. Frideualdova formula

$$LDL \approx THC - HDL - \frac{1}{2.4}TRI$$
 v mmd/l.

Zgornjo linearno zvezo (v  $\beta$ ) bi formalizirali v

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon,$$

kjer ima  $\epsilon$  vlogo slučajnega odstopanja oz. meritvene napake.

Tega "modela" ni mogoče parametrizirati zaradi (neznanih) porazdelitev prediktorja  $X_1 \dots X_p$ .

Da dobimo dober parametrični model, uvedemo fikcijo laboratorijskega eksperimenta

$$Y_1 = \beta_0 + X_{11}\beta_1 + \dots + X_{1p}\beta_p + \epsilon_1$$

$$\vdots$$

$$Y_n = \beta_0 + X_{n1}\beta_1 + \dots + X_{np}\beta_p + \epsilon_n.$$

Tu do  $X_{ij}$  ( $1 \le i \le n, 1 \le j \le p$ ) ZNANE (nastavljene) konstante,  $\epsilon_1 \dots \epsilon_n$  pa so slučajne SPREMENLJIVKE.

Če označimo

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}_{n \times 1} X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ & \vdots & & \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}_{n \times (p+1)} \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}_{p \times 1} \epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}_{n \times 1}$$

sledi enačba linearne regresije  $y = X\beta + \epsilon$ .

#### **MNK**

Privzemimo meritev y; pri danem vektorju  $\hat{\beta}$  tvorimo "napoved"  $\hat{y}=X\hat{\beta}$ . Kvaliteto vektorje  $\hat{\beta}$  merimo preko

$$\|\hat{y} - y\|^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = VKR = VKR(\beta)$$

VKR: vsota kvadratov residualov.

Pišimo

$$VKR(\beta) = \|y - X\beta\|^2 = \langle y - X\beta, y - X\beta \rangle = \langle X\beta, X\beta \rangle - 2\langle y, X\beta \rangle + \langle y, y \rangle,$$
  
$$dVKR(\beta) = \beta^T X^t X - 2y^T X.$$

Pogoj za ekstrem je

$$X^T(y - X\beta) = 0$$
 oz.  $X^TX = X^Ty$ 



Privzemimo  $p+1 \leq n$ ; tedaj je  $X^TX$  obr<br/>nljva matrika natanko tedaj, ko je rankX=p+1. Tedaj ima v<br/>  $\hat{\beta}=(X^TX)^{-1}X^Ty$  funkcija VKR (enoličen) minimum.

Pravimo, da je  $\hat{\beta} = \hat{\beta}(y)$  ocena za  $\beta$  po MNK.

Zadnjič: ocena za  $\beta$  po MNK (linearna algebra).

Verjetnostni model(i) standardne linearne regresije:

$$y = X\beta + \epsilon$$
;

y: proučevani slučajni vektor,

 $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$  matrika konstant,

 $\beta \in \mathbb{R}^d$  (delni) parameter,

 $\epsilon$  slučajen s porazdelitvijo v nekem modelu.

Vedno privzamemo  $E(\epsilon) = 0 \in \mathbb{R}^m$  (če  $\neq 0$ : sistemska napaka).

Za variančno-kovariančno matriko  $Var(\epsilon)$  tipično prizamemo, da je

 $Var(\epsilon) = \sigma^2 I$  (homoskelastičnost + nekoreliranost).

Boljše modele dobimo z dodatnimi zahtevami na  $\epsilon.$ 

Tedaj postane  $\hat{\beta} = \hat{\beta}(y) = (X^T X)^{-1} X^T y$  slučajni vektor, ki je cenilka za  $\beta$ . (Privzamemo  $rangX = d \leq n$ ; X polnega ranga,  $(X^T X)^{-1} \exists$ ).

Velja  $E(\hat{\beta}(y)) = (X^TX)^{-1}X^TE(Y) = (X^TX)^{-1}X^TX\beta = \beta$ ; torej je  $\beta$  nepristranska (linearna) cenilka za  $\beta$ .

Zgled.

$$X = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \beta \in \mathbb{R}(d=1); \text{ pišimo } Var(\epsilon_i) = \sigma^2$$

(vzamemo  $Var(\epsilon) = \sigma^2 I$ ).

Tedaj je  $Y_i = \mu + \epsilon_i$ ,  $E(Y_i) = \mu$ ,  $Var(Y_i) = \sigma^2$  ( $\Longrightarrow$  NEP vzorčenje).

V tem modelu (vemo) je standardna cenilka za  $\sigma^2$  seveda

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

Očitno  $\hat{\mu}(y) = \overline{y}$  (vstavimo  $\beta$ ).

Standardna cenilka za  $\sigma^2$  je  $\sigma^2 = \frac{1}{n-d} ||y - X\hat{\beta}||^2 (X\hat{\beta}$  "vzame" d prostorskih stopenj).

Trdimo, da je nepristranska pri pogojih  $E(\epsilon)=0, Var(\epsilon)=\sigma^2I.$ 

Za dokaz najprej razcepimo  $X=S\cdot P$ , kjer je  $S\in\mathbb{R}^{n\times d}$  matrika z ortonormiranimi stolpci,  $P\in\mathbb{R}^{d\times d}$  obrnljiva ("neprehodna") matrika.

To pomeni, da stolpci matrike S tvorijo ON bazo za im X.

Najpreprosteje je izpeljati GS ortogonalizacijo na stolpcih matrike X.

$$\begin{split} S^1 &= \frac{X^1}{\|X^1\|} \\ S^2 &= \frac{X^2 - \langle X^2, S^1 \rangle S^1}{\| \dots \|}. \end{split}$$

Iz 
$$[X^1 \dots X^d] = [S^1 \dots S^d] \begin{bmatrix} ||X^1||^2 & * & \dots & * \\ & ||\dots|| & * \\ & & ||| > 0 \\ \vdots & & & |||| > 0 \end{bmatrix}$$

preberemo, da je pri ("direktni") GS ortogonalizaciji P zgornje trikotna ma-

trika s pozitivnimi diagonalnimi elementi.

Izračunajmo 
$$X^TX = P^TS^TSP = P^TI_{d\times d}P = P^TP$$
; sledi

$$\hat{\beta} = (P^{-1}P^{-T}P^TS^Ty) = P^{-1}S^Ty$$
 in

 $X\hat{\beta} = SS^Ty$  (pravokotna projekcija na  $X, SS^T$  projektor:  $(SS^T)(SS^T) =$  $SS^{T}$ ).

Zato je 
$$y - X\hat{\beta} = (I - SS^T)y$$
; velja  $E(y - X\hat{\beta}) = 0 \in \mathbb{R}^n$ .

Zato je 
$$y - X\hat{\beta} = (I - SS^T)y;$$
 velja  $E(y - X\hat{\beta}) = 0 \in \mathbb{R}^n.$  Pripomnimo, da za  $\forall a = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$  velja  $\|a^2\| = \sum_{a_i^2} = tr(aa^T).$ 

Zato lahko izrazimo

$$\begin{split} E(VKR) &= E(tr((y-X\hat{\beta})(y-X\hat{\beta})^T)) \\ &= tr(Var(y-X\hat{\beta})) \\ &= tr(Var((I-SS^T)y)) \\ &= tr((I-SS^T)Var(Y)(I-SS^T)^T) \\ &= \sigma^2 tr(I) + \sigma^2 tr(SS^T) \\ &= \sigma^2 (n-d). \end{split}$$

Normalni standardni linearni model

$$Y = X\beta + \epsilon$$
, kjer je  $\epsilon \in N(0, \sigma^2 I)$ .

To je parametrični model s  $\Theta = \mathbb{R}^d \times (0, \infty) = (\beta, \sigma^2)$ .

Seveda sledi  $Y \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$ .

Lastnosti cenilk  $\hat{\beta}, \hat{\sigma}^2$ :

- seveda je  $\hat{\beta}$  normalno porazdeljen; velja  $Var(\hat{\beta}) = (X^T X)^{-1} X^T Var(\beta) \left( (X^T X)^{-1} X^T \right)^{-1} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$  $\implies \beta \sim N\left(\beta, \sigma^2(X^TX)^{-1}\right) = N(\beta, \sigma^2P^{-1}P^{-T}),$
- dopolnimo S do ortogonalne matrike  $Q = \begin{bmatrix} S' & S \end{bmatrix} \in O^{n \times n}$  (ortogonalna  $n\times n$ matrika) (tu je Smatrika $\in \mathbb{R}^{n\times (n-\bar{d})}$ z ON stoplci, ki razpenjajo

$$VKR = \|y - X\hat{\beta}\|^2$$

$$= \langle (I - SS^T)y, (I - SS^T)y \rangle$$

$$\stackrel{\text{projekcija}}{=} \langle (I - SS^T)y, y \rangle$$

$$\stackrel{\text{ortog.}}{=} \langle Q^T(I - SS^T)(QQ^T)y, Q^Ty \rangle$$

$$(i) \ Q^TS = \begin{bmatrix} (S')^T \\ S^T \end{bmatrix} S = \begin{bmatrix} (S')^TS \\ S^TS \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix}$$

$$(Q^TS)(Q^TS)^T = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{d \times d} \end{bmatrix}$$

$$\implies Q^T(I - SS^T)Q = \begin{bmatrix} I_{(n-d)\times(n-d)} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(ii) \ Q^Ty \sim N\left(\begin{bmatrix} (S')^T \\ S^T \end{bmatrix} X\beta, Q^T\sigma^2IQ\right) = N\left(\begin{bmatrix} 0_{n-d} \\ P\beta \end{bmatrix}, \sigma^2I\right).$$
Pišimo  $z = Q^Ty = \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix},$ 
sledi  $\frac{VKR}{\sigma^2} = \sum_{i=1}^{n-d} \frac{z_i^2}{\sigma^2}$  in zato je
$$\frac{VKR}{\sigma^2} \sim \chi_{n-d}^2 = \operatorname{Gama}\left(\frac{n-d}{2}, \frac{1}{2}\right).$$

# 4.3.3 Standardna neinformativna normalna porazdelitev

(Uporabljamo pri t.i. večkratni imputaciji.)

Gre za model  $(X \sim \beta, \sigma^2) \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$  z NEPRAVO apriorno gostoto  $f(\beta, \sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^2}$  (to je "ploščata" gostota v spremenljivki  $\ln(\sigma^2)$  (vaja/dn)). Vzorčna gostota je

$$f(y \mid \beta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} ||y - X\beta||^2}$$

Razcepimo

$$||y - X\beta||^2 = ||y - X\hat{\beta} + X\hat{\beta} + X\beta||^2 = ||y - X\hat{\beta}||^2 + \langle X(\hat{\beta} - \beta), \hat{\beta} - \beta \rangle;$$

$$X\hat{\beta} - X\beta \in \operatorname{im} X, \ y - X\hat{\beta} \in (\operatorname{im} X^{\perp}).$$

Aposteriorna gostota

$$\begin{split} f(\beta,\sigma^2\mid y) &\propto (\sigma^2)^{-1-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{\sigma^2}\cdot\frac{VKR}{2}-\frac{1}{2}\langle\frac{X^TX}{\sigma^2}(\hat{\beta}-\beta),\hat{\beta}-\beta\rangle} \\ &\propto (\sigma^2)^{-\frac{n}{2}-1} e^{-\frac{VKR}{2\sigma^2}} (\sigma^2)^{\frac{d}{2}} \sqrt{\det\left(\frac{X^TX}{\sigma^2}\right)} e^{-\frac{1}{2}\langle\frac{X^TX}{\sigma^2}(\beta-\hat{\beta}),\beta-\hat{\beta}\rangle}. \end{split}$$

$$\frac{X^TX}{\sigma^2} = (\text{var-kovar})^{-1}$$
.

Vidimo:  $\int_{\sigma^2} \int_{\beta \in \mathbb{R}^d} \dots < \infty$ , če n - d > 0.

Sledi, da imamo pri n-d>0 prabo aposteriorno porazdelitev

$$f(\beta, \sigma^2 \mid y) = f_{\operatorname{InvGama}\left(\frac{n-d}{2}, \frac{VKR}{2}\right)}(\sigma^2) \cdot f_{N(\hat{\beta}, \sigma^2(X^TX)^{-1})}(\beta).$$

V praksi mas zanima VZORČENJE iz te aposteriorne porazdelitve.

Najprej vzorčimo  $\sigma^2 \in \text{InvGama}\left(\frac{n-d}{2}, \frac{VKR(y)}{2}\right)$ , potem vzorčimo (pogojno na dobljeni  $\sigma^2$ ) iz

$$N(\hat{\beta}, \sigma^2(X^T X)^{-1}) = N(\hat{\beta}, \sigma^2 P^{-1} P^{-T}).$$

To realiziramo na slednji način:

- (i) vzorčimo  $g\in\chi^2_{n-d}$ , za realizacijo  $\sigma^2\in\text{InvGama}\left(\frac{n-d}{2},\frac{VKR}{2}\right)$  vzamemo  $\frac{VKR}{g}$ ,
- (ii) vzorčimo  $z \in N(0, I_{d \times d})$  in za realizacijo  $\beta \in (\beta, \sigma^2, y)$  vzamemo

$$\begin{split} \hat{\beta} + \sigma^2 P^{-1}z &= P^{-1}S^T y + \sqrt{\frac{VKR(y)}{g}}P^{-1}z \\ &= P^{-1}\left(S^T y + \sqrt{\frac{VKR(y)}{g}}z\right). \end{split}$$

Ta postopek je numerično učinkovit.

Pripomnimo še:  $E(\text{InvGama}(a,b)) = \frac{b}{a-1}$   $\Longrightarrow E\left(\text{InvGama}\left(\frac{n-d}{2},\frac{VKR}{2}\right)\right) = \frac{\frac{VKR}{2}}{\frac{n-d}{2}-1} = \frac{VKR}{n-d-2} \stackrel{\text{asimptotično}}{\sim} \frac{VKR}{n-d}$  - nepristranska.

# 4.3.4 Bayesovi modeli linearne regresije z znano varianco

(in informativno apriorno porazdelitvijo v  $\beta$ ).

$$(y \mid \beta) \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$$

Izkaže se, da je konjugirana družina porazdelitev ravno  $\{N(\beta_0, T_0) \mid \beta_0 \in \mathbb{R}^d, T_0 \in P(d)\}.$ 

V praksi pogosto uoprabljamo tudi konjugirano (pod)družino  $\{N\left(\beta_0, \tau_0^2(X^TX)^{-1}\right) \mid \beta_0 \in \mathbb{R}^d, \tau_0 \in (0, \infty)\}.$ 

Aposteriorna porazdelitev

 $N(\beta_1, T_1)$ , kjer je

$$T_1^{-1} = T_0^{-1} + \frac{X^T X}{\sigma^2}$$

$$= \frac{X^T X}{\tau_0^2} + \frac{X^T X}{\sigma^2}$$

$$= \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right) X^T X$$

frekventistična preciznost vzorca in

$$\beta_{1} = T_{1}(T_{0}^{-1}\beta_{0} + (X^{T}X)^{-1}(X^{T}X)X^{T}y)$$

$$= \left(T_{0}^{-1} + \frac{X^{T}X}{\sigma^{2}}\right)^{-1} \cdot \left(T_{0}^{-1}\beta_{0} + \frac{X^{T}X}{\sigma^{2}}\hat{\beta}\right)$$

$$= \left(T_{0}^{-1} + \frac{X^{T}X}{\sigma^{2}}\right)^{-1} \cdot \left(\frac{1}{\tau_{0}^{2}}\beta_{0} + \frac{1}{\sigma^{2}}\hat{\beta}\right)$$

(daljica med  $\beta_0$  in  $\hat{\beta}$ ) ( $\equiv \frac{a\beta_0 + b\hat{\beta}}{a+b}$ .)