

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 . . .	3
1.3	Apriorna in „robna“ porazdelitev	3
1.4	Disperzija aposteriornih porazdelitev	7
1.5	Aposteriorni kredibilnostni interval	9
1.6	Splošne oznake	10
2	Enoparametrični 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	Monte-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)	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
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 veliikih števil
ECLI	ergodični CLI
M-H	Matropolis-Hasting
HM	hierarhični model
EIZ	ergodični interval zaupanja
MCMC	Monte Carlo markovske verige
SNK	?
MNK	metoda najmanjših kvadratov
VKR	vsota kvadratov residualov
UNK	uteženi najmanjši kvadrati

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

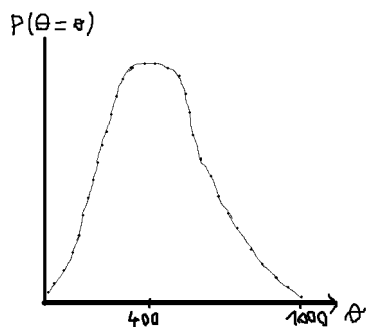
$$P(E_j | A) = \frac{P(A | E_j) \cdot P(E_j)}{P(A)} \quad \text{- elementarna pogojna verjetnost}$$

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 $E(\Theta) = 400$.



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

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

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

(*) pri omejitvah (k omejimo).

Osvežena porazdelitev - novo vedenje

$$P(\Theta = \theta | 6 \text{ črnih od } 10 \text{ izvlečenih}) =$$

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

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 $r \geq 2$). Porazdelitvi 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.

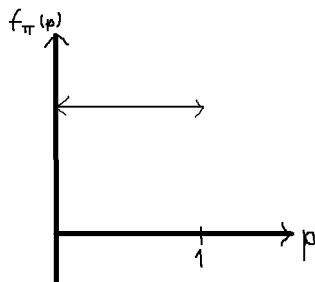
1.3 Apriorna in „robna“ porazdelitev

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

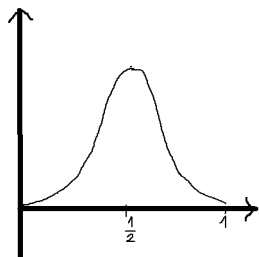
(*) v resnici sta obe porazdelitvi robni porazdelitvi družne porazdelitve vektorja (X, Θ) z vrednostmi v \mathbb{R}^{n+r} .

Zgled. Ocenjujemo Bernoullijevo porazdelitev. Predhodno vedenje je podano z apriorno porazdelitvijo 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. $Beta = \{Beta(a,b) \mid a,b \in (0, \infty)\}$

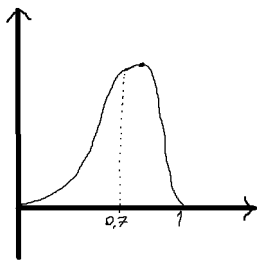
$$f_{Beta(a,b)}(p) = \frac{1}{B(a,b)} p^{a-1} (1-p)^{b-1} 1_{(0,1)}(p)$$

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

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

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

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 $(Y | X = x)$ in $(X | Y = y)$ preko gostot

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

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

$P(Y \in B) | X = x = \int_B f_{(Y|X)}(y | x) d\nu(y)$ - 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.

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

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 $D(\text{aposteriorne}) > D(\text{apriorne})$.

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“

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

kjer sta seveda

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

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

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

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

Opomba.

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

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

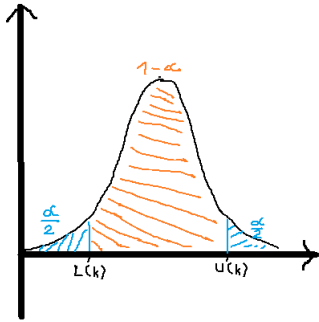
$$\forall k \ P(L(k) \leq p \leq U(k)) \geq 1 - \alpha.$$

p je slučajen.

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

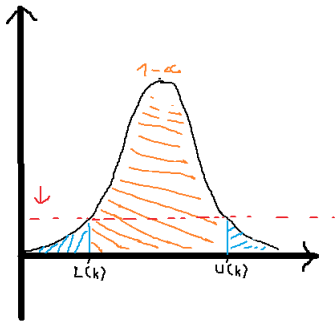
$$L(k) = F_{\text{Beta}(a+k, b+n-k)}^{-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right),$$

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



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.

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)

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

$f(x)$ 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 $(X_i \mid \lambda) \stackrel{\text{NEP}}{\sim} \text{Poisson}(\lambda)$. 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 $N(\mu_0, \tau_0^2)$.

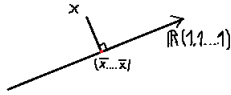
Vzorčna:

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

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 $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$.



$\mathbb{R}(1,1 \dots 1)$ - 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

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

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 seštevajanju 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

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

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

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

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

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

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

Zgled.

① NEP Bernoullijev model:

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

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

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

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 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

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

Tukaj je

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

$m = 2$.

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

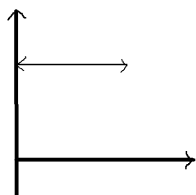
Vidimo, da mora biti $v > 0$.

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. Tvrsten 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.



„Ploščata 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

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

Kako je s transformacijo apriorne porazdelitve?

Naj bo Π slučajna spremenljivka z realizacijo p in Q slučajna spremenljivka

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

$$f_Q(q) = f_{\text{logit}(\Pi)}(q) = f_\Pi(\text{logit}^{-1}(q)) \cdot \left| \frac{d}{dq} \text{logit}^{-1}(q) \right|$$

$$\text{logit}^{-1}(q) = 1 - \frac{1}{1 + e^q} \implies \frac{d}{dq} \text{logit}^{-1}(q) = (1 + e^q)^{-2} e^q.$$

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

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

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

J : Jacobijeva matrika.

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

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 $\int \cdot$.

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:

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

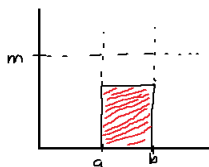
Seveda je $S(A_f) = 1$ (ploščina).



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 $v \geq f(y)$ zavrնemo 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 $g = F_{Cauchy}$ ($g(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$).

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

$$F_{Cauchy}^{-1}(u) = \tan\left(\pi\left(u - \frac{1}{2}\right)\right).$$

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

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

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

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 $(\dots)f$, 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 verjetnostjo“, 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 $f(\theta | x)(v \theta)$.

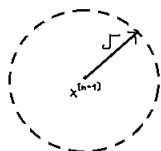
Če je $\theta^{(n-1)}$ stanje v času $n - 1$, za implementacijo koraka (ii) potrebujemo

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

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 metriki.



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

(To pomeni $q(y | x) = \frac{1}{\text{Vol}(K_\delta(x))} \cdot 1_{K_\delta(x)}(y)$ (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 ✓.)

V tem primeru je $Y | X^{(n-1)} = X^{(n-1)} + N(0, \Sigma)$.

Metropolisov algoritem tipično nima ECLI :(.

3.4.2 Metropolis-Hastingov algoritem

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

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

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

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) $q(y | x) = q(y)$ 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“ $f(x | y)$ ali $f(y | x)$.

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

Opis algoritma.

(i) Vzorčimo y_0 iz neke porazdelitve ali pa y_0 določimo.

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

(ii) Če poznamo (x_{n-1}, y_{n-1}) , vzorčimo najprej y_n iz $f(x | x_{n-1})$, potem pa še x_n iz $f(y | y_n)$ (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

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

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

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

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

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

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

vzorčimo μ_1^2 iz ...

⋮

(Blagi pogoji so izpolnjeni, veriga ergodična.)

3.5 Markovske verige z zveznim prostorom stanj - appendix

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

in velja

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

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 Σ , za katero velja, da je za vsako merljivo množico $A \subset \Sigma$ preslikava $\Sigma \rightarrow [0,1]$, $x \mapsto \P(A \mid x)$ merljiva.

Prostoru Σ 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 σ -algebro.)

Poudarimo, da so verjetnosti $P(_ \mid x)$ (pravimo jim „prehodne verjetnosti“) neodvisne od n (torej za vse n enake).

Zgled.

Če ima X_0 neko porazdelitev in velja $X_n = X_{n-1} + \varepsilon_n$ (kjer so $X_0, \varepsilon_1 \dots$ neodvisne in $\varepsilon_0 \sim N(0, V)$ za $V \in \P(r)$ (V je s.p.d.)) in $X_0, X_1, X_2 \dots$ markovska veriga in velja

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

Zgled. 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 $dP_{(Y \mid x)} = q(y \mid x) d\nu(y)$

(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

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

Tu je f ciljna gostota (glede na ν),

(3)

$$\begin{aligned}
& P(X_n \in A \mid X_{n-1} = x) \\
&= \int_{y \in \Sigma} P(X_n \in A \mid Y = y, X_{n-1} = x) dP_{(Y|x)}(x) \\
&= \int_{y \in \Sigma} \int_{u=0}^1 P(X_n \in A \mid U = u, Y = y, X_{n-1} = x) \cdot dP_{(U|Y=y, X_{n-1}=x)}(u) d\nu(y) \\
&= \int_{y \in \Sigma} \left(\int_{u=0}^{\rho(x,y)} \dots du + \int_{u=\rho(x,y)}^1 \dots du \right) q(y \mid x) d\nu(y) \\
&= \int_{y \in \Sigma} (1_A(y) \cdot q(y \mid x) + 1_A(x) \cdot (1 - \rho(x,y))) q(y \mid x) d\nu(y) \\
&= \int_{y \in A} \rho(x,y) q(y \mid x) d\nu(y) + 1_A(x) \int_{y \in \Sigma} (1 - \rho(x,y)) q(y \mid x) d\nu(y).
\end{aligned}$$

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

Trditev 3.5.2.

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

Dokaz 3.5.3.

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

$$\begin{aligned}
P(X_n \in A) &= \int_{x \in \Sigma} P(X_n \in A \mid X_{n-1} = x) dP_{X_{n-1}}(x) \\
&= \int_{x \in \Sigma} \int_{y \in A} \rho(x,y) q(y \mid x) f(y) d\nu(y) d\nu(x) \\
&\quad + \int_{x \in A} \int_{y \in \Sigma} q(x \mid y) d\nu(y) f(x) d\nu(x) \\
&\quad - \int_{x \in A} \int_{y \in \Sigma} \rho(x,y) q(x \mid y) f(x) d\nu(y) d\nu(x).
\end{aligned}$$

Upoštevamo

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

Spomnimo se:

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

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

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

in

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

Zato je

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

Prehodne verjetnosti $P(\cdot|x)$ generirajo verigo prehodnih verjetnosti

$$P(A|x) = P(X_n \in A | X_0 = x).$$

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

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

kjer za predznačeno mero μ definiramo normo totalne variacije

$$\|u\| = \sup_A |\mu(A)|.$$

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

$$\begin{aligned} & P(X_n \in A_n, X_{n-1} \in A_{n-1} \dots X_1 \in A_1 | X_0 = x_0) \\ &= \int_{x_1 \in \sigma} P(X_n \in A_n \dots X_1 \in A_1 | X_1 = x_1, X_0 = x_0) dP_{(X_1|X_0=x_0)}(x_1) \\ &= \int_{x_1 \in A_1} P(X_n \in A_n \dots X_2 \in A_2 | X_1 = x_1, X_0 = x_0) dP_{(X_1|X_0=x_0)}(x_1 | x_0) \\ &= \int_{x_1 \in A_1} \int_{x_2 \in \Sigma} P(X_n \in A_n \dots X_2 \in A_2 | X_2 = x_2, X_1 = x_1, X_0 = x_0) dP(x_2 | x_1) dP(x_1 | x_0) \\ &= \dots \\ &= \int_{x_1 \in A_1} \dots \int_{x_n \in A_n} dP(x_n | x_{n-1}) \dots dP(x_1 | x_0). \end{aligned}$$

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

$$P^n(A \mid x) = \int_{x_1 \in \Sigma} \cdots \int_{x_m \in \Sigma} \left(\int_{x_{m+1} \in \Sigma} \cdots \int_{x_n \in A} dP(x_n \mid x_{n-1}) \dots dP(x_{m+1} \mid x_m) \right) \\ \cdot dP(x_m \mid x_{m-1}) \dots dP(x_1 \mid x_0).$$

Tukaj je

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

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

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

(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

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

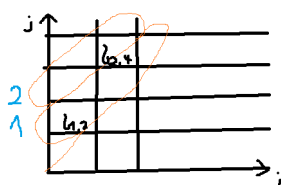
Privzemimo, da je veriga STACIONARNA, t.j. $X_i \sim f$ za vse i (to sledi iz $X_0 \sim f$). Tedaj je

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

$$\begin{aligned} nD_{MCMC}(\widehat{E_f(h)}) &= \sigma^2 + \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \sigma_{i,j} \\ &= \sigma^2 + \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \sigma_{0,k} \\ &= \sigma^2 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} \sigma_{0,k} - \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n-1} k \sigma_{0,k}. \end{aligned}$$



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

Zato definiramo asimptotično MCMC varianco kot

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

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

Izrek 3.6.1. Pri primernih ergodičnih lastnostih velja

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

(za KATEROKOLI začetno porazdelitev).

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

Teoretično da:

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

Za praktično rabo je treba γ_k^2 oceniti iz vzorca. Preprosto je oceniti σ^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 γ_k^2 si oglejmo metodo povprečij neprikrivajočih se serij.

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

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

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

...

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

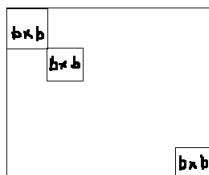
Pripomnimo, da je $\widehat{\mu_{b,k}} = \frac{1}{b} \sum_{i=(k-1)b+1}^{kb} h(X_i)$.

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 γ_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

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



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

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

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:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_f(h)n(k) - E_f(h)}{\sqrt{\gamma_k^2(a(k), b(k))/\sqrt{n}}} \stackrel{D}{=} N(0, 1)$$

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

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

Efektivna 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} $1 \leq i \leq n$ neodvisne markovske verige z začetkom v $X_{01} \dots X_{0m}$ (torej $1 \leq j \leq m$).

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

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

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

Označimo

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

$B = \frac{n}{m-1} \sum_{j=1}^m \left(\overline{h(X_{\cdot j})} - \overline{h(X_{\cdot})} \right)^2$ (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 σ^2 , medtem ko W podcenjuje σ^2 .

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

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

Poglavje 4

Normalni modeli

Uvodni zgled: 1-razsežni „NEP-normalni“ model, kjer je $(X \mid \mu, \sigma^2) \sim N\left(\begin{bmatrix} \mu & \vdots & \mu \end{bmatrix}, \sigma^2 I_{n \times n}\right)$ z vzorčnimi gostotami

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

Izkaže se, da je konjugirana družina apriornih gostot podana kot

$$f(\mu, \sigma^2) = f_{\text{InvGama}(a,b)}(\sigma^2) \cdot f_{N(\mu_0, \frac{\sigma_0^2}{\kappa_0})}(\mu). \quad (4.2)$$

(Za vajo lahko izpeljete; razcepite $\psi = \psi_1 + \psi_2$ ($\log ?$) $\rightarrow \tau_1, \tau_2$ namesto τ). Tu so $\mu_0 \in \mathbb{R}$, $a, b, \kappa_0 \in (0, \infty)$ parametri konjugirane družine; κ_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 aposteriornost 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.

$$(i) \quad f(\mu \mid \sigma^2, x) \text{ „pripada“ modelu } (X \mid \mu) \sim N \left(\begin{bmatrix} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{bmatrix}, \sigma^2 I \right) \quad (\sigma^2 \text{ konst.})$$

za apriorno $M \sim N(\mu_0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0}) = N(\mu_0, \tau_0^2)$.

To pomeni $f(\mu \mid \sigma^2, x) \leftrightarrow N(\mu, \tau_0^2)$, kjer je

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

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

$$\begin{aligned}
 f(x, \mu \mid \sigma^2) &= f(x \mid \mu, \sigma^2) \cdot f(\mu \mid \sigma^2) \\
 &\propto e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2} \cdot e^{-\frac{1}{2\left(\frac{\sigma^2}{\kappa_0}\right)} (\mu - \mu_0)^2} \\
 &= e^{-\frac{1}{2} \left\langle W \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \\ \mu \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \\ \mu \end{bmatrix} \right\rangle},
 \end{aligned}$$

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.

\implies potrebujemo le $E(X \mid V \sim \sigma^2)$ in $Var(X \mid V \sim \sigma^2)$.

Vemo:

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

Naprej:

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

Sledi:

$$\begin{aligned}
 E(X \mid V \sim \sigma^2) &= E \left(\begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} M \mid V \sim \sigma \right) = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \mu_0 \text{ in} \\
 \text{Var}(X \mid V \sim \sigma^2) &= \sigma^2 I + \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \text{Var}(M \mid V \sim \sigma^2) \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \\
 &= \sigma^2 \left(I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right).
 \end{aligned}$$

Lahko zapišemo

$$\begin{aligned}
 f(x \mid \sigma^2) &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot \det \left(I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \\
 &\quad \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \left\langle \left(I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \left(x - \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \vdots \\ \mu_0 \end{bmatrix} \right), x - \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \vdots \\ \mu_0 \end{bmatrix} \right\rangle}.
 \end{aligned}$$

Velja še

$$\begin{aligned}
 f(\sigma^2) &= f_{\text{InvGama}}(\sigma^2) = \frac{b^a}{\gamma(a)} \cdot (\sigma^2)^{-a-1} \cdot e^{-\frac{b}{\sigma^2}} \\
 \implies f(\sigma^2 \mid x) &\propto (\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot e^{-\frac{1}{\sigma^2} \frac{1}{2} \langle (\dots, \dots) \rangle} \cdot (\sigma^2)^{-a-1} e^{-\frac{b}{\sigma^2}} \\
 &\Leftrightarrow \text{InvGama} \left(a + \frac{n}{2}, b + \frac{1}{2} \left\langle \left(I + \frac{1}{\kappa_0} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \left(x - \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \vdots \\ \mu_0 \end{bmatrix} \right), x - \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \vdots \\ \mu_0 \end{bmatrix} \right\rangle \right)
 \end{aligned}$$

\Leftrightarrow : konjugirana porazdelitev.

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

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

Nova b in μ_0 sta odvisna od realizacije $(x_1 \dots x_n)$.

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

4.2 Hierarhični modeli

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

$$\begin{array}{cccc} X_{1,1} & X_{1,2} & \dots & X_{1,m} \\ \vdots & \vdots & & X_{n_m,m} \\ X_{n_1,1} & \vdots & & \\ & X_{n_2,2} & & \end{array}.$$

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

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

Vse variance so enaka (homoskelastičnost) zaradi „preprostosti“.

Najbolj nas zanimajo (ocene) za μ_j in σ^2 , „optimalne“ frekvencistične cenilke so:

$$\hat{\mu}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} X_{ij} = \bar{X}_{\cdot j}$$

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

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

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 μ_j „poustvarjanje“ nekega „izhodiščnega“ μ_0 .

σ^2 našega homoskelastičnega modela je znana.

$$\mu_0, \tau_0^2, a, b$$

↓

$\mu, \eta^2 \in N(\mu_0, \tau_0^2) \times \text{InvGama}(a, b)$ - Bayesov parameter

↓

$\mu_1 \dots \mu_m \in N(\mu, \eta^2) \times \dots \times N(\mu, \eta^2)$ - ϕ - Bayesov parameter

↓ (neodvisno)

$x_{i_1} \in N(\mu_1, \sigma^2) \ (1 \leq i \leq n_1) \dots x_{i_m} \in N(\mu_m, \sigma^2) \ (1 \leq i \leq n_m)$ - ϑ - vzorec
(večji τ^2 , bolj μ_i različni).

4.2.1 Abstraktna opredelitev hierarhičnega modela

Bayesov parameter je oblike (ϑ, ϕ) kjer ϕ imenujemo hiperparameter, ϑ pa populacijski parameter. Za vzorčne gostote velja temeljni privzetek

(HM - hierarhični model) $f(x | \vartheta, \phi) = f(x | \vartheta)$.

Aposteriorne gostote bi lahko predstavili kot

$$\begin{aligned} f(\vartheta | \phi, x) &= \frac{f(x | \vartheta, \phi) f(\vartheta | \phi) f(\phi)}{f(x)} \\ &= \frac{f(x | \vartheta) f(\vartheta)}{f(x)} \cdot \frac{f(\vartheta | \phi) f(\phi)}{f(\vartheta)} \\ &= f(\vartheta | x) f(\phi | \vartheta). \end{aligned}$$

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

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

(\implies z Gibbsom $f(\vartheta, \phi | x)$).

Aplicirajmo na naš zgled:

$$\phi = (\mu, \eta^2)$$

$$n = \sum_{j=1}^m n_j$$

$$\vartheta = (\mu_1 \dots \mu_m)$$

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

$$= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ij} - \mu_j)^2}$$

$$j = 1 \dots m, \quad i = 1 \dots n_j.$$

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:

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

Ta pogojna aposteriora porazdelitev je

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

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

$$f(\mu \mid \eta^2, \mu_1 \dots \mu_m) \dots N \left(\frac{\frac{\tau_0^2}{m}}{\frac{\tau_0^2}{m} + \tau_0^2} \mu_0 + \frac{\tau_0^2}{\frac{\tau_0^2}{m} + \tau_0^2} \bar{\mu}, \frac{\frac{\tau_0^2}{m} \cdot \tau_0^2}{\frac{\tau_0^2}{m} + \tau_0^2} \right) \\ f(\tau^2 \mid \mu, \mu_1 \dots \mu_m) \dots \text{InvGama} \left(a + \frac{m}{2}, b + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (\mu_j - \mu)^2 \right).$$

Definicija 4.2.1. Naj bo ν mera na $B(\Sigma)$. Tedaj je veriga $\{X_n\}$ ν -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 π -ireducibilnost, kjer je π stacionarna porazdelitev.

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

Komentar: zgornji pogoj je za praktične namene pogosto pomešan? (neuporaben?).

Definicija 4.2.2. Naj bo π stacionarna porazdelitev verige $\{X_n\}$, ki je π -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

$$\begin{aligned} P^2(E_{i+2 \bmod d} \mid x) &= \int_{\Sigma} P(E_{i+2 \bmod d} \mid y) dP(y \mid x) \\ &\geq \int_{y \in E_{i+1 \bmod d}} \cdots \\ &= \int_{y \in E_{i+1 \bmod d}} dP(y \mid x) = 1. \end{aligned}$$

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 π -ireducibilna M-H veriga tudi aperiodična.

Izrek 4.2.4. Če je M-H veriga π -ireducibilna in aperiodična, velja

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

$\pi = s.s.[x]$ (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 $r(n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$, za katero velja $\sup_A |P^n(A \mid x) - \pi(A)| \leq r(n)$. Tu obstaja eksplcitični izraz za $r(n)$.

Opomba. Pri predpostavkah izreka zmano s A/R simulirati NEODVISNO vzorčenje iz π .

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

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

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

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

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

Poleg tega v tem primeru velja EZVŠ v obliki:

$\forall x \forall$ integrabilna h :

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

Trditev 4.2.9. π -ireducibilna M-H veriga je Harrisov povrnjljiva.

Izrek 4.2.10. Privzemimo Metropolisovo verigo oblike $q(y | x) = q(y - x)$, 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.

Transformacija. Če je $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ 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 $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$).

Posebej. 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. Friedwaldova formula

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

Zgornjo linearno zvezo (v β) bi formalizirali v

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

kjer ima ϵ 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

$$\begin{aligned} Y_1 &= \beta_0 + X_{11}\beta_1 + \dots + X_{1p}\beta_p + \epsilon_1 \\ &\vdots \\ Y_n &= \beta_0 + X_{n1}\beta_1 + \dots + X_{np}\beta_p + \epsilon_n. \end{aligned}$$

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

Če označimo

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ & \vdots & & \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}_{n \times (p+1)} \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}_{p+1} \quad \epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}_{n \times 1}$$

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.

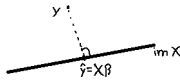
Pišimo

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

$$dVKR(\beta) = \beta^T X^T X - 2y^T X.$$

Pogoj za ekstrem je

$$X^T(y - X\beta) = 0 \text{ oz. } X^T X = X^T y.$$



Privzemimo $p + 1 \leq n$; tedaj je $X^T X$ obrnljva matrika natanko tedaj, ko je $\text{rank} X = p + 1$. Tedaj ima v $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y$ funkcija VKR (enoličen) minimum.

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

Zadnjič: ocena za β 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,

ϵ 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 ϵ .

Tedaj postane $\hat{\beta} = \hat{\beta}(y) = (X^T X)^{-1} X^T y$ slučajni vektor, ki je cenilka za β .

(Privzamemo $rang X = d \leq n$; X polnega ranga, $(X^T X)^{-1} \exists$).

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

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

V tem modelu (vemo) je standardna cenilka za σ^2 seveda

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

Očitno $\hat{\mu}(y) = \bar{y}$ (vstavimo β).

Standardna cenilka za σ^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 $E(\epsilon) = 0$, $Var(\epsilon) = \sigma^2 I$.

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 .

$$S^1 = \frac{X^1}{\|X^1\|}$$

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

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

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

trika s pozitivnimi diagonalnimi elementi.

Izračunajmo $X^T X = P^T S^T S P = P^T I_{d \times d} P = P^T P$; sledi

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

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

Zato je $y - X \hat{\beta} = (I - S S^T)y$; 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 $\|a\|^2 = \sum a_i^2 = \text{tr}(a a^T)$.

Zato lahko izrazimo

$$\begin{aligned} E(V K R) &= E(\text{tr}((y - X \hat{\beta})(y - X \hat{\beta})^T)) \\ &= \text{tr}(\text{Var}(y - X \hat{\beta})) \\ &= \text{tr}(\text{Var}((I - S S^T)y)) \\ &= \text{tr}((I - S S^T) \text{Var}(Y) (I - S S^T)^T) \\ &= \sigma^2 \text{tr}(I) + \sigma^2 \text{tr}(S S^T) \\ &= \sigma^2(n - d). \end{aligned}$$

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 $\text{Var}(\hat{\beta}) = (X^T X)^{-1} X^T \text{Var}(\beta) ((X^T X)^{-1} X^T)^{-1} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$
 $\implies \beta \sim N(\beta, \sigma^2 (X^T X)^{-1}) = N(\beta, \sigma^2 P^{-1} P^{-T})$,
- dopolnimo S do ortogonalne matrike $Q = \begin{bmatrix} S' & S \end{bmatrix} \in O^{n \times n}$ (ortogonalna $n \times n$ matrika) (tu je S matrika $\in \mathbb{R}^{n \times (n-d)}$ z ON stolpci, ki razpenjajo

$$(im, X)^\perp$$

$$\begin{aligned} VKR &= \|y - X\hat{\beta}\|^2 \\ &= \langle (I - SS^T)y, (I - SS^T)y \rangle \\ &\stackrel{\text{projekcija}}{=} \langle (I - SS^T)y, y \rangle \\ &\stackrel{\text{ortog.}}{=} \langle Q^T(I - SS^T)(QQ^T)y, Q^T y \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad Q^T S &= \begin{bmatrix} (S')^T \\ S^T \end{bmatrix} S = \begin{bmatrix} (S')^T S \\ S^T S \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix} \\ (Q^T S)(Q^T S)^T &= \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{d \times d} \end{bmatrix} \\ \implies Q^T(I - SS^T)Q &= \begin{bmatrix} I_{(n-d) \times (n-d)} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \text{(ii)} \quad Q^T y &\sim N \left(\begin{bmatrix} (S')^T \\ S^T \end{bmatrix} X\beta, Q^T \sigma^2 I Q \right) = N \left(\begin{bmatrix} 0_{n-d} \\ P\beta \end{bmatrix}, \sigma^2 I \right). \end{aligned}$$

$$\text{Pišimo } z = Q^T y = \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix},$$

sledi $\frac{VKR}{\sigma^2} = \sum_{i=1}^{n-d} \frac{z_i^2}{\sigma^2}$ in zato je
 $\frac{VKR}{\sigma^2} \sim \chi_{n-d}^2 = \text{Gama} \left(\frac{n-d}{2}, \frac{1}{2} \right).$

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

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

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

Aposteriorna gostota

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

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

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

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

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

V praksi nas zanima VZORČENJE iz te aposteriorne porazdelitve.

Najprej vzorčimo $\sigma^2 \in \text{InvGama}(\frac{n-d}{2}, \frac{VKR(y)}{2})$, potem vzorčimo (pogojno na dobljeni σ^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 $g \in \chi_{n-d}^2$, za realizacijo $\sigma^2 \in \text{InvGama}(\frac{n-d}{2}, \frac{VKR}{2})$ vzamemo $\frac{VKR}{g}$,
- (ii) vzorčimo $z \in N(0, I_{d \times d})$ in za realizacijo $\beta \in (\beta, \sigma^2, y)$ vzamemo

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

Ta postopek je numerično učinkovit.

Pripomnimo še: $E(\text{InvGama}(a, b)) = \frac{b}{a-1}$

$\implies E(\text{InvGama}(\frac{n-d}{2}, \frac{VKR}{2})) = \frac{\frac{VKR}{2}}{\frac{n-d}{2}-1} = \frac{VKR}{n-d-2} \stackrel{\text{asimptotično}}{\sim} \frac{VKR}{n-d}$ - nepri-
stranska.

4.3.4 Bayesovi modeli linearne regresije z znano varianco

(in informativno apriorno porazdelitvijo v β).

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

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 uporabljamo tudi konjugirano (pod)družino

$$\{N(\beta_0, \tau_0^2(X^T X)^{-1}) \mid \beta_0 \in \mathbb{R}^d, \tau_0 \in (0, \infty)\}.$$

Aposteriorna porazdelitev

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

$$\begin{aligned} T_1^{-1} &= T_0^{-1} + \frac{X^T X}{\sigma^2} \\ &= \frac{X^T X}{\tau_0^2} + \frac{X^T X}{\sigma^2} \\ &= \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2} \right) X^T X \end{aligned}$$

frekventistična preciznost vzorca in

$$\begin{aligned} \beta_1 &= T_1(T_0^{-1}\beta_0 + (X^T X)^{-1}(X^T X)X^T y) \\ &= \left(T_0^{-1} + \frac{X^T X}{\sigma^2} \right)^{-1} \cdot \left(T_0^{-1}\beta_0 + \frac{X^T X}{\sigma^2}\hat{\beta} \right) \\ &= \left(T_0^{-1} + \frac{X^T X}{\sigma^2} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{1}{\tau_0^2}\beta_0 + \frac{1}{\sigma^2}\hat{\beta} \right) \end{aligned}$$

(daljica med β_0 in $\hat{\beta}$)

$$\left(\equiv \frac{a\beta_0 + b\hat{\beta}}{a+b} \right).$$

$$(Y \mid \beta) \sim N(X\beta, V)$$

V je znana vzorčno-kovariančna matrika.

Za $Z = V^{-\frac{1}{2}}Y$ velja $(Z \mid \beta) \sim N(V^{-\frac{1}{2}}X\beta, I)$;

$$W = V^{-\frac{1}{2}}X\beta.$$

Ocena za β po MNK je zato

$$\widehat{\beta}(z) = (W^T W)^{-1} W^T z \text{ oz.}$$

$$\widehat{\beta}(y) = (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} y \text{ (UNK - uteženi najmanjši kvadrati).}$$

Konjugirana družina apriornih porazdelitev je seveda normalna

$$\{N(\beta_0, T_0) \mid \beta_0 \in \mathbb{R}^d, T_0 \in P(d)\}.$$

Aposteriorna (apriorna?) porazdelitev pri opaženem y je tedaj $N(\beta_1, T_1)$,

kjer

$$T_1^{-1} = T_0^{-1} + X^T V^{-1} X \text{ in}$$

$$\beta_1 = (T_0^{-1} + X^T V^{-1} X)(T_0^{-1} \beta_0 + X^T V^{-1} y).$$

4.3.5 Vključevanje apriorne informacije glede variance

Uvodoma si oglejmo model $(Y \mid \sigma^2) \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$

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

Konjugirana družina apriornih porazdelitev je očitno InvGama.

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

realizacije y je aposteriorna porazdelitev

$$\text{InvGama}(a + \frac{n}{2}, b + \frac{1}{2} \|y - X\beta\|^2).$$

$(Y \mid \beta, \sigma^2) \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$ **s polkonjugirano apriorno porazdelitvijo**

$$\text{Tu je } f(\beta \mid \sigma^2) = f_{\text{konj.}}(\beta) \cdot f_{\text{konj.}}(\sigma^2) = f_{N(\beta_0, T_0)}(\beta) \cdot f_{\text{InvGama}(a,b)}(\sigma^2).$$

Uporabimo *Bayesovi modeli linearne regresije z znano varianco* in *Uvodoma si oglejmo model* .. in sledi

$$f(\beta \mid \sigma^2, y) = f_{N(\beta_1, T_1)}(\beta) \text{ in}$$

$$f(\sigma^2 \mid \beta, y) = f_{\text{InvGama}(a+\frac{n}{2}, b+\frac{1}{2} \|y - X\beta\|^2)}(\sigma^2)$$

za

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

$$\beta_1 = (T_0^{-1} + \frac{X^T X}{\sigma^2})^{-1} (T_0 \beta_0 + \frac{X^T Y}{\sigma^2}).$$

Do polne aposteriorne porazdelitve $f(\beta, \sigma^2 \mid y)$ dostopamo preko MCMC z Gibbsovim vzorčevalnikom.

$(Y \mid \beta, \sigma^2) \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$ s konjugirano apriorno porazdelitvijo

Izkaže se, da je konjugirana družina podana z gostoto

$$f(\beta, \sigma^2) = f(\beta \mid \sigma^2) \cdot f(\sigma^2) = f_{N(\beta_0, \sigma^2 \Lambda_0)}(\beta) \cdot f_{\text{InvGama}(a, b)}(\sigma^2).$$

(Parametri konjugirane družine so $\beta_0 \in \mathbb{R}^d$, $\Lambda_0 \in P(d)$; $a, b \in (0, \infty)$.)

Tudi aposteriorno porazdelitev pri y predstavimo dvofazno

$$f(\beta, \sigma^2 \mid y) = f(\beta \mid \sigma^2, y) \cdot f(\sigma^2 \mid y).$$

Velja $f(\beta \mid \sigma^2, y) = f_{N(\beta_1, \sigma^2 \Lambda_1)}(\beta)$, kjer

$$\Lambda_1^{-1} = \Lambda_0^{-1} + X^T X \text{ in}$$

$$\beta_1 = (\Lambda_0^{-1} + X^T X)^{-1}(\Lambda_0^{-1} \beta_0 + X^T y)$$

in

$$f(\sigma^2 \mid \beta, y) = f_{\text{InvGama}(a_1, b_1)}(\sigma^2), \text{ kjer}$$

$$a_1 = a + \frac{n}{2} \text{ in}$$

$$b_1 = b + \frac{1}{2} \langle (I + X \Lambda_0 X^T)^{-1} (y - X \beta_0), y - X \beta_0 \rangle$$

$$= b + \frac{1}{2} (\langle y, y \rangle + \langle \Lambda_0 \beta_0, \beta_0 \rangle - \langle \Lambda_1 \beta_1, \beta_1 \rangle).$$

$$(Y \mid V) \sim N(X\beta, V)$$

$$V \in P(n) = \Theta.$$

Konjugirana družina apriornih porazdelitev?

$$\text{Gostota: } f(y \mid V) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\det V)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \langle V^{-\frac{1}{2}} (y - X\beta), (y - X\beta) \rangle}.$$

Za (simetrično) matriko W in vektorja u, v je

$$\langle Wu, v \rangle = \text{sled}(v^T W u) = \text{sled}(W u v^T);$$

uv^T : matrika.

Pripomnimo, da je predpis

$$(A, B) \rightarrow \text{sled}(A \cdot B) = \langle \langle A, B \rangle \rangle$$

skalarni produkt na prostoru simetričnih matrik.

Sledi zapis

$$f(y \mid V) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2} \ln(\det V)} e^{-\frac{1}{2} \langle \langle V^{-1}, (y - X\beta)(y - X\beta)^T \rangle \rangle};$$

$$\psi(V) = \frac{1}{2} \ln(\det V),$$

$$T(y) = (y - X\beta)(y - X\beta)^T \in R^{\frac{n(n-1)}{2}} - \frac{n(n-1)}{2} \text{ prostorskih stopenj,}$$

$$Q(V) = V^{-1}.$$

Prepoznamo eksponentni model polnega ranga.

Sledi „kandidat“ za konjugirano družino oblike

$$f_{\tau,\psi}(V) \propto e^{-\frac{\tau}{2} \ln(\det V)} \cdot e^{-\frac{1}{2} \text{sled}(V^{-1}\psi)}.$$

Na $f_{\tau,\psi}$ želimo gledati kot Lebesgueovo gostoto (gostoto glede na $dv_{11} \cdot dv_{1n} dv_{22} \dots dv_{2n} \dots dv_{nn}$ na $P(n) \subset \mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}}$).

Izkaže se, da integrabilnost zahteva $\tau > 2n$ in $\psi \in P(n)$.

Vpeljimo še $\tau = \nu + n + 1$ ($\implies \nu > n - 1$) in dobimo gostoto iz konjugirane družine

$$f_{\tau,\psi}(V) = \frac{(\det \frac{\psi}{2})^{\frac{\nu}{2}}}{\Gamma_n(\frac{\nu}{2})} \cdot (\det V)^{-\frac{\nu+n+1}{2}} \cdot e^{-\text{sled}(V^{-1}\frac{\psi}{2})},$$

kjer je

$$\Gamma_n(a) = \pi^{\frac{n(n-1)}{4}} \prod_{j=1}^n \Gamma(a - \frac{j-1}{2}) \quad n\text{-razsežna funkcija gama.}$$

Zgled.

$$\begin{aligned} n = 1, \psi = [\tau] > 0, V = [\sigma^2] \\ \implies f_{\nu,\psi}(\sigma^2) = \frac{(\frac{\psi}{2})^{\frac{\nu}{2}}}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \cdot (\sigma^2)^{-\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{\psi}{2\sigma^2}}. \end{aligned}$$

To je InvGama $(\frac{\nu}{2}, \frac{\psi}{2})$;

$\nu > 0$ imenujemo posplošeno število prostorskih stopenj, število ψ pa „skalarni“ skalirni parameter.

Definicija 4.3.1. Porazdelitvi na $P(n)$ z gostoto $f_{\nu,\psi}$ ($\nu > n - 1, \psi \in P(n)$) pravimo INVERZNA WISHARTOVA PORAZDELITEV s številom prostorskih stopenj ν in skali(a?)rnim parametrom ψ . Označimo jo $\text{InvWish}(\nu, \psi)$.

Zgled. Vzorčenje je $\text{InvGama}(\frac{\nu}{2}, \frac{\psi}{2})$ pri $\nu \in \mathbb{N}$.

To pomeni

$$\sum_{i=1}^{\nu} N(0, \psi^{-1})^2 \stackrel{\text{neodv}}{=} \psi \left(\sum_{i=1}^{\nu} N(0, 1)^2 \right)^{-1} \sim \text{InvGama} \left(\frac{\nu}{2}, \frac{\psi}{2} \right).$$

Drugače povedano; če so $z_1 \dots z_{\nu} \stackrel{\text{NEP}}{\sim} N(0, \psi^{-1})$ je

$$(\sum_{i=1}^{\nu} z_i^2) \stackrel{\text{NEP}}{\sim} \text{InvGama} \left(\frac{\nu}{2}, \frac{\psi}{2} \right).$$

Izkaže se: če so $\nu \in \mathbb{N}$ in so

$$Z_1 \dots Z_n \stackrel{\text{NEP}}{\sim} N(0, \psi^{-1}) \quad (\nu > n - 1), \text{ je}$$

$$(\sum_{i=1}^{\nu} z_i^{??}) \sim \text{InvWish}(\nu, \psi).$$

Zaradi analogije definirajmo inverzno gama porazdelitev na prostoru $P(n)$

takole: če sta $a > \frac{n-1}{2}$ in $B \in P(n)$ parametra, je

$$f_{\text{InvGama}(a,B)}(V) = \frac{(\det B)^a}{\Gamma(a)} (\det V)^{-a-\frac{n+1}{2}} e^{-\text{sled}(V^{-1}B)}.$$

Aposteriorna porazdelitev pri y ?

$\text{InvWish}(\nu + 1, \psi + (y - X\beta)(y - X\beta)^T)$ oz.

$\text{InvGama}(a + \frac{n}{2}, B + \frac{1}{2}(y - X\beta)(y - X\beta)^T)$.

Izkaže se, da je konjugirana družina apriornih porazdelitev družina „inverznih Wishartovih porazdelitev“ na $P(n)$ z gostotami

$$f_{\nu,\Psi}(V) = \frac{(\det(\frac{\Psi}{2}))^n}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} (\det V)^{-\frac{\nu}{2}-\frac{n+1}{2}} e^{-\text{sled}(V^{-1}\frac{\Psi}{2})}$$

(glede na Lebeguesovo mero $dv_{11} \dots dv_{1n} dv_{22} \dots dv_{2n} \dots dv_{nn}$ na „ $\mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}}$ “).

Tu je $\Gamma_n(a) = \pi^{\frac{n(n+1)}{2}} \prod_{j=1}^n \Gamma(a - \frac{j-1}{2})$ n -razsežna funkcija gama,

$\nu > n - 1$ ($\nu \in \mathbb{R}$), $\Psi \in P(n)$ pa sta parametra.

ν : število prostorskih stopenj, Ψ : „skalirni“ parameter.

Če je $\nu \in \mathbb{N}$, potem simulacijo vzorčenja iz $\text{InvWish}(\nu, \Psi)$ implementiramo z $(\sum_{i=1}^{\nu} z_i z_i^T)^{-1}$, kjer so $z_i \stackrel{\text{NEP}}{\sim} N(0, \Psi^{-1})$.

Aposteriorna porazdelitev:

$$\begin{aligned} f(v | y) &\propto f(y | V) \cdot f(V) \\ &\propto (\det V)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\langle V^{-1}(y - X\beta), y - X\beta \rangle} \cdot f(V). \end{aligned}$$

Ker je $\langle V^{-1}(y - X\beta), y - X\beta \rangle = \text{sled}(V^{-1}(y - X\beta)(y - X\beta)^T)$, je aposteriorna porazdelitev $\text{InvWish}(\nu + 1, \Psi + (y - X\beta)(y - X\beta)^T)$.

Splošni linearni model („polni“) ($Y | \beta, V \sim N(X\beta, V)$)

- Polkonjugirana apriorna porazdelitev:

$$f(\beta, V) = f_{N(\beta_0, T_0)}(\beta) \cdot f_{\text{InvWish}(\nu, \Psi)}(V).$$

Do aposteriorne porazdelitve $f(\beta | V, y)$ pridemo preko

$$- f(\beta | V, y) \dots N(\beta_1, T_1), \text{ kjer}$$

$$T_1^{-1} = T_0^{-1} + X^T V^{-1} X,$$

$$\beta_1 = T_1 (T_0^{-1} \beta_0 + X^T V^{-1} y),$$

$$- f(y | \beta, \nu) \dots \text{InvWish}(\nu + 1, \Psi + (y - X\beta)(y - X\beta)^T)$$

z Gibbsovim vzorčevalnikom.

- Konjugirana porazdelitev za podmodele oblike $(Y \mid \beta, \Sigma) \sim N(X\beta, V(\Sigma))$:
 $\Sigma \dots \sigma^2, V(\Sigma) \dots \sigma^2 I$.

Iščemo v obliki $f(\beta, \Sigma) = f(\Sigma)f(\beta \mid \Sigma)(*)$.

(Poseben primer $\Sigma = \sigma^2 \in (0, \infty)$ in $V(\sigma^2) = \sigma^2 I$ smo že domnevali).

V splošnem za apriorno porazdelitev oblike $(*)$ velja

$f(\beta, \Sigma \mid y) = f(\Sigma \mid y)f(\beta \mid \Sigma, y)$, kjer je

$f(\beta \mid \Sigma, y)$ aposteriorna porazdelitev regresijskega modela z ZNANO variančno matriko $V(\Sigma)$,

$f(\Sigma \mid y)$ pa je aposteriorna porazdelitev modela z vzorčno gostoto $f(y \mid V(\Sigma))$ in apriorno gostoto $f(\Sigma)$.

Torej moramo izračunati $f(y \mid V(\Sigma))$.

Iz Bayesove formule $f(\beta \mid V, y) = \frac{f(y|\beta, V)f(\beta|\Sigma)}{f(y|V(\Sigma))}$

sledi $f(y \mid V(\Sigma)) = \frac{f(y|\beta, V)f(\beta|\Sigma)}{f(\beta|V, y)}$.

Če nastavimo $f(\beta \mid \Sigma) = f_{N(\beta_0(\Sigma), T_0(\Sigma))}(\beta)$

in uporabimo znano formulo za $f(\beta \mid V, y) = f_{N(\beta_1(\dots), T_1(\dots))}(\beta)$,

sledi

$$f(y \mid V(\Sigma)) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\det V)^{-\frac{1}{2}} (\det T_0)^{-\frac{1}{2}} (\det(T_0^{-1} + X^T V^{-1} X))^{-\frac{1}{2}} \\ \cdot e^{-\frac{1}{2}(\langle V^{-1} y, y \rangle + \langle T_0^{-1} \beta_0, \beta_0 \rangle - \langle (T_0^{-1} + X^T V^{-1} X) \beta_1, \beta_1 \rangle)}$$

Zgled.

$$(Y \mid \beta, \Sigma) \sim N \left(\begin{bmatrix} I \\ \vdots \\ I \end{bmatrix} \beta, \begin{bmatrix} \Sigma & & \\ & \Sigma & \\ & \vdots & \\ & & \Sigma \end{bmatrix} \right),$$

kjer $\beta \in \mathbb{R}^d$, $\Sigma \in P(d)$.

$$\text{Vidimo, da je } y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_m \end{bmatrix},$$

kjer so $Y_i \stackrel{\text{NEP}}{\sim} N(\beta, \Sigma)$.

Za apriorno porazdelitev vzamemo

$$f(\beta, \Sigma) = f_{InvWish}(\nu, \Psi)(\Sigma) f_{N(\beta_0, \frac{\Sigma}{\kappa_0})}(\beta),$$

kjer je κ_0 posplošemo število prostorskih stopenj.

Račun pokaže

$$f(\Sigma | y) \dots InvWish \left(\nu + m, \Psi + \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})(y_i - \bar{y})^T + \frac{m\kappa_0}{m + \kappa_0} (\bar{y} - \beta_0)(\bar{y} - \beta_0)^T \right)$$

ter $f(\beta | \Sigma, y) \dots N(\beta_1, T_1)$, kjer

$$\beta_1 = \frac{1}{\kappa_0 + m} (\kappa_0 \beta_0 + m \bar{y}), \text{ ter}$$

$$T_1^{-1} = (\kappa_0 + m) \Sigma^{-1}$$

(to pomeni

$$\kappa_0 \rightarrow \kappa_0 + m,$$

$$\beta_0 \rightarrow \frac{\kappa_0}{\kappa_0 + m} \beta_0 + \frac{m}{\kappa_0 + m} \bar{y},$$

$$\nu \rightarrow \nu + m,$$

$$\Psi \rightarrow \Psi + \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})(y_i - \bar{y})^T + \frac{m\kappa_0}{m + \kappa_0} (\bar{y} - \beta_0)(\bar{y} - \beta_0)^T).$$

4.3.6 Hierarhična linearna regresija

Pri standardni linearni regresiji sta pomembni (med drugim) 2 vprašanji, ki jih je mogoče obravnavati s pomočjo hierarhičnih modelov:

- pri m homoskedastičnih skupinah $(y_j | \dots) \sim N(X_j \beta, \sigma^2 I)$ nas zanima ali so pripadajoči parametri β med seboj različni,
- v „eni“ skupini $(y | \dots) \sim N(X \beta, \sigma^2 I)$ nas zanima, katere komponente parametra β so različne od 0.

Problem $\beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_m \in \mathbb{R}^d$ za m homoskedastičnih modelov $N(X_j \beta, \sigma^2 I)$

V hierarhičnem modelu nastopajo parametri

- hiperparameter $(\beta, \Sigma) = \phi \in \mathbb{R}^d \times P(d)$,
- populacijski parameter $(\beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2) = \vartheta \in \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d \times (0, \infty)$.

Shema vzorčenja

$$(\beta, \Sigma) \rightarrow (\beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2) \rightarrow (y_1 \dots y_m);$$

- $(\beta, \Sigma) \in N(\beta_0, T_0) \times \text{InvWish}(w, \Phi);$
 $\beta_0 \in \mathbb{R}^d, T_0 \in P(d), w > d - 1, \Phi \in P(d)$
 hiperapriorna porazdelitev,
- $(\beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2) \in N(\beta, \Sigma) \times \dots \times N(\beta, \Sigma) \times \text{InvGama}(a, b)$
 populacijska apriorna porazdelitev,
- $(y_1 \dots y_m) \in N(X_1 \beta_1, \sigma^2 I) \times \dots \times N(X_m \beta_m, \sigma^2 I)$
 vzorčna porazdelitev.

Formalno imamo gostote

$$\begin{aligned} f(\beta, \Sigma) &= f(\beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2 \mid \beta, \Sigma) = f(\beta_1 \dots \beta_m \mid \beta, \Sigma) \cdot f(\sigma^2) \text{ in} \\ f(y_1 \dots y_m \mid \beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2, \beta, \Sigma) &= f(y_1 \dots y_m \mid \beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2) \\ &= \prod_{j=1}^m f_{N(X_j \beta_j, \sigma^2 I)}(y_j). \end{aligned}$$

Spomnimo se abstraktnega hierarhičnega modela, kjer

$$f(x \mid \vartheta, \phi) = f(x \mid \vartheta) \text{ in}$$

$$f(\vartheta, \phi) = f(\vartheta \mid \phi) \cdot f(\phi).$$

Tedaj je

$$\begin{aligned} f(\vartheta \mid \phi, x) &= \frac{f(x \mid \vartheta, \phi) f(\vartheta \mid \phi)}{f(x \mid \phi)} \\ f(\phi \mid \vartheta, x) &= \frac{f(x \mid \vartheta, \phi) f(\phi \mid \vartheta)}{f(x \mid \vartheta)} \\ &\stackrel{f(x|\vartheta, \phi) = f(x|\vartheta)}{=} f(\vartheta) \\ &\stackrel{\text{Bayes}}{=} \frac{f(\vartheta \mid \phi) f(\phi)}{f(\vartheta)}. \end{aligned}$$

Implementiramo

$$\begin{aligned} f(\beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2 \mid \beta, \Sigma, y_1 \dots y_m) &\propto \left(\prod_{j=1}^m f_{N(X_j \beta_j, \sigma^2 I)}(y_j) \cdot f_{N(\beta, \Sigma)}(\beta_j) \right) \cdot f_{\text{InvGama}(\cdot)}(\sigma^2) \\ &\propto \prod_{j=1}^m (\sigma^2)^{-\frac{n_j}{2}-1} \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \|y_j - X_j \beta_j\|^2}. \end{aligned}$$

Prepoznamo „polkonjugirano“ apriorno porazdelitev; sledi

$$f(\beta_1 \dots \beta_m \mid \sigma^2, \beta, \Sigma, y_1 \dots y_m) = \prod_{j=1}^m f_{N(\beta^{(1)}, \Sigma_j^{(1)})}(\beta_j);$$

kjer

- $\Sigma_j^{(1)} = \Sigma_j^{-1} + \frac{X_j^T X_j}{\sigma^2}$ in
- $\beta_j^{(1)} = \Sigma_j^{(1)} \cdot \left(\Sigma^{-1} \beta + \frac{X_j^T X_j}{\sigma^2} \right)$ in

$$f(\sigma^2 \mid \beta_1 \dots \beta_m, \beta, \Sigma, y_1 \dots y_m) \dots$$

$$InvGama \left(a + \sum_{j=1}^m \frac{n_j}{2}, b + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \|y_j - X_j \beta_j\|^2 \right)$$

DN:

- $f(\beta \mid \Sigma, \beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2),$
- $f(\Sigma \mid \beta, \beta_1 \dots \beta_m, \sigma^2).$

Vprašanje neničelnosti regresijskih koeficientov v „frekventističnem“ modelu $y \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$.

Ideja: poleg populacijskega parametra (β, σ^2) vpeljemo še dodatni parameter „ ϕ “, ki zakodira predhodno informacijo o tem, kateri koeficienti so različni od 0.

Nastane hierarhični model z naslednjo shemo:

vzorčimo $z = (z_1 \dots z_d) \in \{0, 1\}^d$, kjer $z_j = 1$ pomeni vključitev parametra β_j , $z_j = 0$ pa njegovo izključitev. Hiperapriorna porazdelitev je sestavljena iz 2^d verjetnosti.

$$y \approx X_1 \beta_1 + \dots + X_d \beta_d.$$

$$(\beta, \sigma^2) \text{ iz } \left(N \left(0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0} (X_z^Z X_z)^{-1} \right) = \delta_{(0 \dots 0)} \right) \propto InvGama(a, b),$$

kjer je X_z matrika, ki jo dobimo tako, da dodamo stolpce z $z_j = 1$, $\delta_{(0 \dots 0)}$ pa je Diracova mera na $\mathbb{R}^{d - \sum_j z_j}$, skoncentrirana v $(0 \dots 0)$.

$$\frac{\sigma^2}{\kappa_0} (X_z^T X_z)^{-1} \in P(\sum_i z_i) \text{ (še permutiramo).}$$

$$y \text{ iz } N(X\beta, \sigma^2 I).$$

Pripomnimo, da ima $(\beta, V \mid Z = z)$ gostoto glede na produktno mero $Leb \left(\mathbb{R}^{\sum_i z_i} \right) = \delta_{(0 \dots 0)} \times Leb(0, \infty) =: \nu_z$.

Sledi, da imajo tudi aposteriorne porazdelitve $(B, V \mid Y = y, Z = z)$ gostote glede na ν_z .

Ponovno se spomnimo na abstraktni hierarhični model, kjer

$$(1) \quad f(\vartheta \mid x, \phi) = \frac{f(x|\vartheta)f(\vartheta|\phi)}{f(x|\phi)},$$

$$(2) \quad f(\phi \mid x, \vartheta) = f(\phi \mid \vartheta) = \frac{f(\vartheta|\phi)f(\phi)}{f(\vartheta)}.$$

Apliciramo in sledi, da apriorna gostota $\propto f(y \mid \beta, \sigma^2) \cdot f(\beta, \sigma^2 \mid z)$ glede na ν_z ustreza produktu Diracove mere $\delta_{(0 \dots 0)}$ na $\mathbb{R}^{d - \sum_j z_j}$ in aposteriorne porazdelitve modela z vzorčno porazdelitvijo $N(X_z \beta_z, \sigma^2 I)$ in apriorno porazdelitvijo $N\left(0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0} (X_z^T X_z)^{-1}\right) \propto \text{InvGama}(a, b)$.

Ta aposteriorna porazdelitev ima torej gostoto (glede na ν_z)

$$f_{N\left(\frac{\hat{\beta}_z}{\kappa_0+1}, \frac{\sigma^2}{\kappa_0+1} (X_z^T X_z)^{-1}\right)}(\beta_z) \cdot \delta_{(0 \dots 0)}(\beta_z^c) \cdot f_{\text{InvGama}\left(a + \frac{n}{2}, b + \frac{1}{2} \langle M_z y, y \rangle\right)}(\sigma^2),$$

β_z^c „drugi“ iz β ,

kjer je

$$M_z = I - \frac{1}{\kappa_0+1} X_z (X_z^T X_z)^{-1} X_z \text{ in}$$

$$\beta_z = (X_z^T X_z)^{-1} X_z^T y.$$

Obravnavajmo

$$\begin{aligned} P(Y \in C \mid Z = z) &= \int_{\mathbb{R}^d \times (0, \infty)} P(Y \in C \mid \beta, \sigma^2, Z = z) dP_{(\beta, V|Z=z)}(\beta, \sigma^2) \\ &\stackrel{*}{=} \int_{\mathbb{R}^d \times (0, \infty)} \int_C f_{N(X\beta, \sigma^2 I)}(y) dy \cdot dP_{(\beta, V|Z=z)}(\beta, \sigma^2) \\ &= \int_C \left(\int_{\mathbb{R}^d \times (0, \infty)} f_{N(X\beta, \sigma^2 I)}(y) dP_{(\beta, V|Z=z)}(\beta, \sigma^2) \right) dy \end{aligned}$$

\Rightarrow porazdelitev $(Y \mid Z = z)$ ima Lebeguesovo gostoto

$$\begin{aligned} f(y \mid z) &= \int_{\mathbb{R}^d \times (0, \infty)} f_{N(X\beta, \sigma^2 I)}(y) dP_{(\beta, V|Z=z)}(\beta, \sigma^2) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d \times (0, \infty)} f_{N(X\beta, \sigma^2 I)}(y) f(\beta, \sigma^2) d\nu_z(\beta, \sigma^2) \\ &= \dots \\ &\stackrel{**}{=} \int_{\mathbb{R}^{\sum_j z_j} \times (0, \infty)} f_{N(X_z \beta_z, \sigma^2 I)}(y) \cdot f_{N\left(0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0} (X_z^T X_z)^{-1}\right)}(\beta) \cdot \\ &\quad f_{\text{InvGama}(a, b)}(\sigma^2) d\beta_z d\sigma^2. \end{aligned}$$

*: f hierarhični model (izpustimo $Z = z$) + vzorčna porazdelitev (N),

** : $\int f(y | \vartheta) f(\vartheta) d\vartheta = f(y)$.

(Bayesova formula $f(\vartheta | y) = \frac{f(y|\vartheta)f(\vartheta)}{f(y)}$).

To prepoznamo kot robno porazdelitev Bayesovega modela z vzorčno porazdelitvijo $N(X_z \beta_z, \sigma^2 I)$ in apriorno (v (β, σ^2)) $N(0, \frac{\sigma^2}{\kappa_0} (X_z^T X_z)^{-1}) \rtimes InvGama(a, b)$.

Vemo (vaje), da sledi

$$f(y | z) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \frac{\Gamma(a + \frac{n}{2})}{\Gamma(a)} \cdot \frac{b^a}{(b + \frac{1}{2} \langle M_z y, y \rangle)^{a + \frac{n}{2}}} \cdot \left(\frac{\kappa_0}{\kappa_0 + 1} \right)^{\frac{\sum_j z_j}{2}}.$$

Glede na izhodiščni problem nas zelo zanimajo aposteriorne verjetnosti

$P(Z = z | Y = y)$; seveda velja

$$P(Z = z | Y = y) = \frac{f(y | z) P(Z = z)}{f(y)} = \frac{f(y | z) P(Z = z)}{\sum_{\xi \in \{0,1\}^d} f(y | \xi) P(Z = \xi)}.$$

Pri velikem d (in zato zelo velikem 2^d) do k aposteriorne porazdelitve dostopamo preko Gibbsovega vzorčevalnika, kjer osveževanje poteka z vzorčevanjem iz pogojnih porazdelitev $P(Z_j = 1 | Z'_j = z'_j, Y = y)$.

Tu sta Z'_j in z'_j „preostanka“ komponent vektorjev Z in z .

$f(x_1 \dots x_d)$, $f(x_d | x_1 \dots x_{d-1})$, $f(x_{d-1} | x_1 \dots x_{d-2}, x_d)$.

Velja

$$\begin{aligned} P(Z_j = 1 | Z'_j = z'_j, Y = y) &= \frac{P(Z = [0 \dots z'_j] | Y = y)}{P(Z'_j = z'_j | Y = y)} \\ &= \frac{P(Z = [0 \dots z'_j] | Y = y)}{P(Z = [0 \dots z'_j] | Y = y) + P(Z = [1 \dots z'_j] | Y = y)} \\ &= \left(1 + \frac{f(y)[0, z'_j] \cdot P([0 \dots z'_j])}{P([1 \dots z'_j])} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

„ $y \sim N(X\beta, \sigma^2 I)$ “

$(Y | \beta, \sigma^2, z) = (y | \beta, \sigma^2) = \dots$