4. sklop: Algoritem Metropolis-Hastings

Nina Ruzic Gorenjec

Imamo nek model, za katerega poznamo verjetje $L(\theta \mid x)$ (θ je lahko vektor parametrov, podatki x pa matrika). Odlocimo se za apriorno porazdelitev $\pi(\theta)$, njeno formulo torej poznamo.

Izracunamo torej *le se* aposteriorno porazdelitev $\pi(\theta \mid x)$ preko Bayesove formule

$$\pi(\theta \mid x) \propto L(\theta \mid x)\, \pi(\theta).$$

Preko aposteriorne porazdelitve izracunamo *vse, kar nam srce pozeli*: za tockovno oceno vzamemo povprecje ali pa mediano, za interval zaupanja izracunamo primerne kvantile, izracunamo verjetnosti nasih domnev.

Kaj je tu problem?

1 MCMC (Markov Chain Monte Carlo)

Zelimo aposteriorno porazdelitev za parameter θ, natancneje vzorec iz aposteriorne porazdelitve.

Ideja algoritma:

1. Izberemo si zacetno vrednost $\theta^{(0)}$.
2. *Najdemo primerno* porazdelitev $p(\cdot|\cdot)$, tako da bomo lahko na vsakem koraku i dobili $\theta^{(i+1)}$ kot simulacijo iz porazdelitve $p(\theta^{(i+1)}|\theta^{(i)})$.
3. Po n korakih dobimo realizacijo $\theta^{(0)}, \theta^{(1)}, \ldots, \theta^{(n)}$. Postopek ponavljamo *dokler ne dosezemo zeljene konvergence*, pri cemer v koncnem vzorcu izpustimo zacetnih nekaj vrednosti (*burn-in*, npr. m).
4. Izbrani vzorec $\theta^{(m+1)}, \theta^{(m+2)}, \ldots, \theta^{(n)}$ je vzorec iz aposteriorne porazdelitve.
5. Preizkusimo razlicne zacetne vrednosti in primerjamo dobljene rezultate.

(6. Preizkusimo razlicne apriorne porazdelitve in primerjamo dobljene rezultate.)

2 Algoritem Metropolis-Hastings

Algoritem Metropolis-Hastings je eden izmed MCMC algoritmov.

Najprej si izberemo *proposal distribution* $q(\cdot|\cdot)$, ki je *primerne* oblike.

En korak Metropolis-Hastings algoritma, ko imamo iz prejsnjega koraka na voljo $\theta^{(i)}$:

1. Simuliramo kandidata θ^* iz porazdelitve $q(\cdot|\theta^{(i)})$.
2. Izracunamo verjetnost sprejetja (*acceptance probability*)

$$\alpha = \min\left\{1, \frac{L(\theta^*|x)\ \pi(\theta^*)\ \ q(\theta^{(i)}|\theta^*)}{L(\theta^{(i)}|x)\pi(\theta^{(i)})q(\theta^*|\theta^{(i)})}\right\}.$$

3. Simuliramo u iz enakomerne zvezne porazdelitve na [0,1].
4. Ce je $u \leq \alpha$, izberemo kandidata (*accept*) in postavimo $\theta^{(i+1)} = \theta^*$.
   Ce je $u > \alpha$, zavrnemo kandidata (*reject*) in postavimo $\theta^{(i+1)} = \theta^{(i)}$.

3 Algoritem Metropolis-Hastings za primer normalnega modela z znano varianco

Uporabili bomo algoritem Metropolis-Hastings za primer iz 3. sklopa, kjer so bili nasi podatki vzorec visin (metri) studentov moskega spola:

```
x <- c(1.91, 1.94, 1.68, 1.75, 1.81, 1.83, 1.91, 1.95, 1.77, 1.98,
       1.81, 1.75, 1.89, 1.89, 1.83, 1.89, 1.99, 1.65, 1.82, 1.65,
       1.73, 1.73, 1.88, 1.81, 1.84, 1.83, 1.84, 1.72, 1.91, 1.63)
```

Privzeli smo normalni model $N(\theta, \sigma^2 = 0.1^2)$ in zeleli oceniti θ.

Verjetje tega modela je enako

$$L(\theta \mid x) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,0.1} e^{-\frac{(x_i-\theta)^2}{2\cdot(0.1)^2}}.$$

Za apriorno porazdelitev smo si izbrali normalno porazdelitev (konjugirana v tem modelu) s povprecjem $\mu_0 = 1.78$ in varianco $\sigma_0^2 = 0.2^2$.

Za aposteriorno porazdelitev smo zato dobili normalno porazdelitev s parametroma μ_n in σ_n^2, kjer je

$$\frac{1}{\sigma_n^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2},$$

$$\mu_n = \frac{1/\sigma_0^2}{1/\sigma_0^2 + n/\sigma^2}\,\mu_0 + \frac{n/\sigma^2}{1/\sigma_0^2 + n/\sigma^2}\,\bar{x}.$$

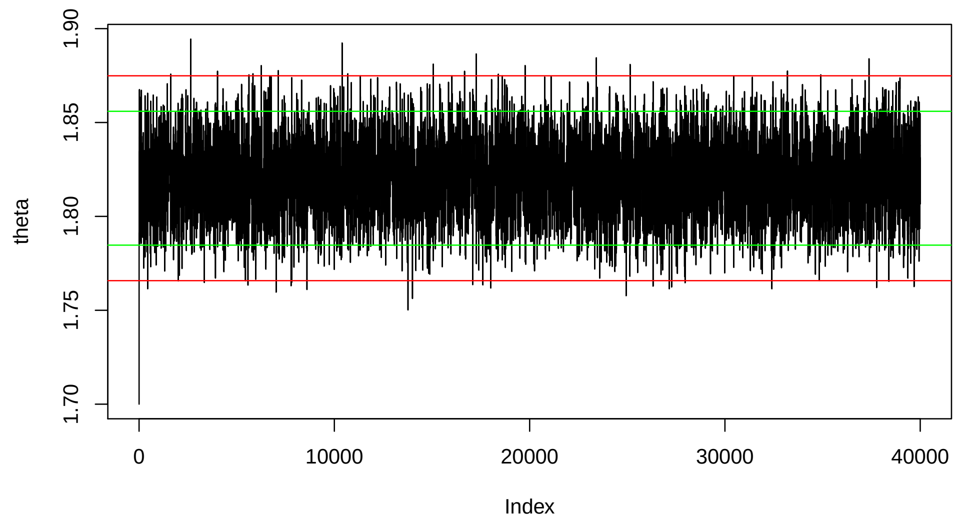
(Zapisemo lahko tudi preko *precision*=1/varianca.)

Pravo aposteriorno porazdelitev torej poznamo.

Sedaj jo bomo aproksimirali s pomocjo Metropolis-Hastings algoritma.

Najprej si moramo smiselno izbrati *proposal distribution* $q(\cdot|\theta^{(i)})$. Katero bi si izbrali? Normalno s povprecjem $\theta^{(i)}$ in nekim standardnim odklonom.

Primer zaporedja iz aposteriorne porazdelitve, ki *izgleda dobro*:



Na sliki smo za boljso predstavo oznacili 95% referencni interval prave aposterirone porazdelitve (zeleni crti) in odmik od povprecja aposteriorne porazdelitve za 3 standardne odklone, tj. 99.7% referencni interval (rdeci crti). **Pozor:** S tem smo uporabili vedenje o pravi aposteriorni porazdelitvi, ki v realni situaciji ni znana (ravno zato jo z MCMC metodami tudi ocenjujemo).

Pomembno: Cilj konvergence je porazdelitev, ne pa stevilo.

3.1 Druga domaca naloga

Za primer iz 3. sklopa (uporabite zgornje podatke, model z $\sigma^2 = 0.1^2$ in zgornjo apriorno porazdelitev z $\mu_0 = 1.78$ in $\sigma_0^2 = 0.2^2$ – ti parametri so fiksni) aproksimirajte aposteriorno porazdelitev s pomocjo algoritma Metropolis-Hastings, kjer sledite spodnjim korakom.

1. Sami v R-u sprogramirajte algoritem Metropolis-Hastings za primer ocenjevanja enega parametra oz. za nas primer. Kljucno je, da ga sprogramirate sami, pri cemer splosnost kode in efektivnost implementacije nista pomembni. (Za ta preprost primer boste npr. 40000 iteracij dobili v zelo kratkem casu, ne glede na izbor parametrov v spodnjih tockah ali efektivnost implementacije.)
2. Preizkusite ga na nasem primeru, kjer si sami izberite neko smiselno zacetno vrednost in varianco *proposal distribution*. Rezultate predstavite na naslednji nacin:
   - Narisite celotno dobljeno zaporedje $\theta^{(i)}$ (glede na iteracije i).
   - Narisite le prvih 500 ali pa 5000 clenov.
   - Narisite celotno zaporedje, kjer uporabite ustrezen *burn-in*.
   - Za tako izbrano zaporedje graficno predstavite aposteriorno porazdelitev in jo graficno primerjajte s pravo aposteriorno porazdelitvijo.
   - Ocenite parameter in 95% interval zaupanja za parameter iz izbranega zaporedja ter primerjajte z ocenami iz prave aposterirone porazdelitve.
3. Pozenite vas algoritem pri neki nesmiselni zacetni vrednosti. **Pozor:** ce boste α implementirali po formuli iz str. 2, potem algoritem pri zelo nesmiselnih zacetnih vrednostih ne bo deloval – zato je potrebno implementirati na ravni logaritma (primerno prilagodite korake algoritma). Rezultate predstavite:
   - Opisite, zakaj konkretno so se pojavile tezave, ce ste uporabili zelo nesmiselno zacetno vrednost in osnovno verzijo algoritma (brez logaritmiranja).
   - Narisite celotno dobljeno zaporedje $\theta^{(i)}$ (glede na iteracije i).
   - Narisite le prvih 500 ali pa 5000 clenov.
   - Narisite celotno zaporedje, kjer uporabite ustrezen *burn-in*.
4. Pri neki smiselni zacetni vrednosti pozenite algoritem pri nekaj razlicnih variancah za *proposal distribution*. Pri izboru pretiravajte v obe smeri (spomnite se, kaksni so po velikosti nasi podatki), tako da boste graficno opazili razlike na prvih npr. 500 iteracijah. Rezultate predstavite:
   - Za vsak primer narisite prvih nekaj (nekje med 500 in 5000) clenov in se celotno zaporedje.
   - Komentirajte razlike in zakaj do njih pride. Kaj in zakaj vas moti pri izbranih primerih?
   - **Bonus vprasanje:** Kaksen bi bil v splosnem (ne vezano na nas vzorec) vas predlog glede izbora variance *proposal distribution* oz. kaksen bi bil predlog za izbor koncnega zaporedja?