Problema 1

(Problema en Ecología) Sea $X_1, X_2, ..., X_m$ variables aleatorias donde X_i denota el número de individuos de una especie en cierta región. Suponga $X_i|N, p \sim Binomial(N, p)$, entonces

$$f(\bar{x}|N,p) = \prod_{i=1}^{m} \frac{N!}{x_i!(N-x_i)!} p^{x_i}(1-p)^{N-x_i}$$

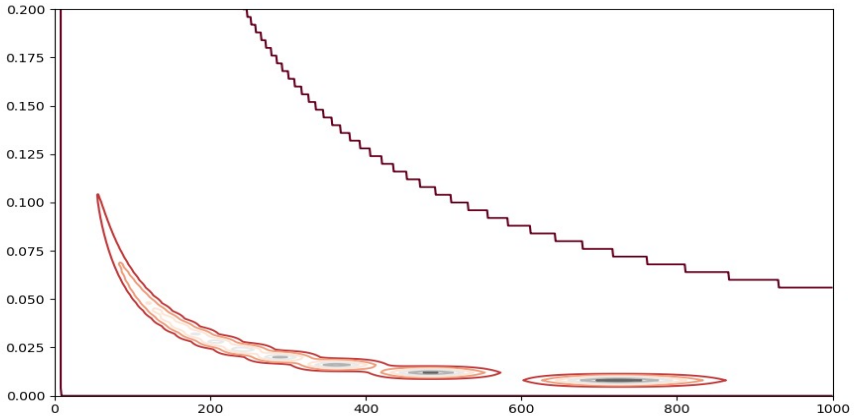
Asumiendo la distribución a priori $p \sim Beta(\alpha, \beta)$ y $N \sim h(.)$, donde h es una dist. discreta en $\{0, 1, 2, ..., N_{max}\}$, se tiene definida la distribución posterior $f(N, P|\bar{x})$.

A partir del algoritmo MH, simule valores de la distribución posterior usnado un kernel hìbrido.

Lo primero que estudiaremos será la forma explícita de la distribución posterior, de donde despues podremos determinar una factorización para un kernel Gibbs para p y un posiblemente otras propuestas. Tenemos que,

$$\begin{aligned}
\pi(N,p|\bar{x}) &= f(\bar{x}|N,p)f(N)f(p) && (1)\\
&= \prod_{i=1}^{m} \frac{N!}{x_i!(N-x_i)!} p^{x_i}(1-p)^{N-x_i} \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1}}{Beta(\alpha,\beta)} \frac{1}{N_{max}+1} && (2)\\
&\propto p^{(\alpha+\sum_i x_i)-1}(1-p)^{(\beta+mN-\sum x_i)-1} \prod_{i=1}^{m} \frac{N!}{x_i!(N-x_i)!} && (3)
\end{aligned}$$

Visualizemos las curvas de nivel de nuestra distribución posterior para darnos una idea de la forma de las muestras que esperamos simular.



Notemos que se pueden observar distintas modas en la distribución posterior, de modo que en las muestras posiblemente observaremos 'islas'. Posiblemente nuestra simulación pueda converjer a una sola de las modas.

Ahora notemos que de aquí podemos factorizar la distribución posterior de la siguiente manera,

$$\pi(N, p|\bar{x}) \propto f(p|N, \bar{x}) f(N|\bar{x}),$$

obteniendo la siguiente una propuesta Gibbs con la siguiente distribución.

(Propuesta 1) Gibbs Sampler - prob .3

$$p'|N, \bar{x} \sim Beta(\alpha + \sum_{i=1}^{m} x_i, \beta + mN - \sum_{i=1}^{m} x_i)$$

Siendo esta una propuesta Gibbs, no rechaza niguna de las propuestas generadas. Podemos separar en dos categorías las propuestas que intuitivamente (sin un argumento formal, solo cómo comentario) representan la 'exploración' del soporte de la distribución (explorar regiones poco visitadas donde podría encontrarse un región donde se acepten las poropuestas) y la 'explotación' donde sabemos que nuestras propuestas serán casí siempre aceptadas, aunque no exploren mucho otras regiones. De esta manera decimos que como la propuesta de Gibbs se concentra en lugares 'conocidos' de la distribución, entonces es de 'explotación'.

La siguiente propuesta que consideramos es la utilizando la distribución a priori de p :

(Propuesta 2) - prob .1

$$p' \sim Beta(\alpha, \beta)$$

Despues de varios experimentos notamos que el porcentaje de rechazo de esta propuesta siempre es alrededor del 95 %, por lo que es muy poco eficiente, aunque podría explorar regiones del soporte de la distribución posterior. Siendo una propuesta de 'exploración' y le asignamos una probabilidad de .3 de ser escogida como kernel.

Una propuesta que directamente podemos aplicar a nuestra problema es el de una caminata aleatoria con un paso 'Normal' alrededor de nuestro parámetro actual p, tomando una valor de σ fijo,

(Propuesta 3 - Caminata Aleatoria p) - prob .1

$$p'|N, p \sim \mathcal{N}(p, .01)$$

Como escogimos un valor de $\sigma = .01$ (tamaño de paso) pequeño, puesto que despues de varios experimentos notamos que rechaza alrededor del 15 % de la propuestas generadas despues

del **burn-in**. De modo que consideramos a esta propuesta como de 'explotación'.

Siendo esta las propuestas de kernel para el parámetro p. Ahora presentaremos las propuestas que utilizamos para el parámetro N.

(Propuesta 4) - prob .1

$$N' \sim \mathcal{U}_d\{0, 1, \ldots, N_{max}\}$$

Esta propuesta es la obtenida al usar la distribución a-priori del parámetro N. Despues de varios experimentos notamos que se rechaza alrededor del 95 % de estas propuestas (igual que la propuesta 'a-priori' de p).

(Propuesta 5) - prob .1

$$N'|N, p \sim N + \textbf{Poisson}(\lambda := N(1-p))$$

Escogimos un propuesta Poisson con parámtro $\lambda = N(1-p)$ esto inspirado teorícamente por la propuesta Gibs de un modelo 'Binomial-Beta-Poisson', como aparece en [3], que es similar nuestra modelo y porque empíricamente notamos que rechaza menos propuestas que usar parámetros como $\lambda = N$ o $\lambda = Np$.

(Propuesta 6 - Caminata Aleatoria N) - prob .2

$$N' = N + \epsilon, \mathbb{P}(\epsilon = 1) = \frac{1}{2} = \mathbb{P}(\epsilon = -1)$$

Esta propuesta es de 'explotación' pues el tamaño de paso es muy pequeño, de modo que en regiones conocidas con 'pasos pequeños' se aceptan casi todas la propuestas.

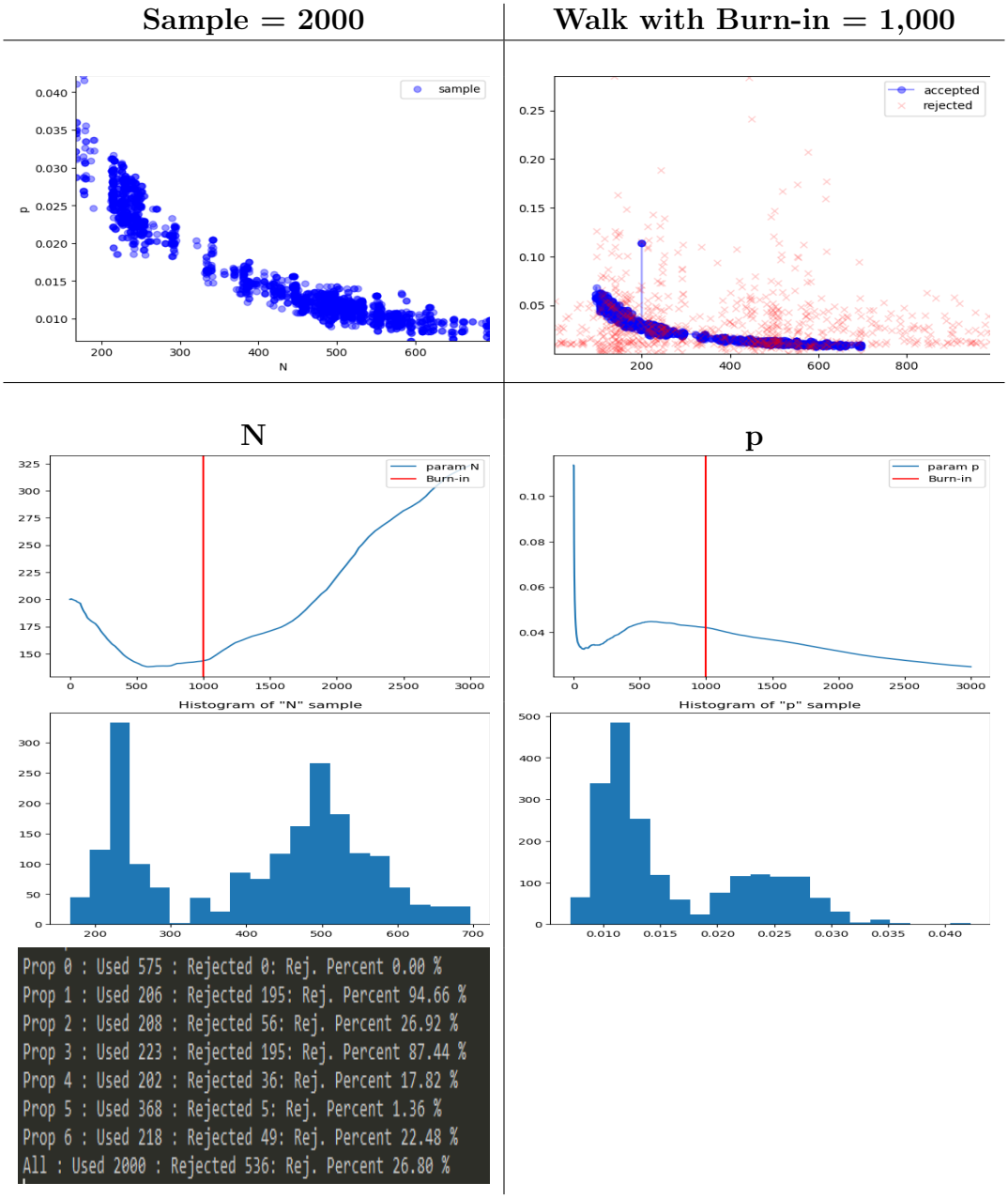
Y finalmente nuestra **propuesta 7 (prob .1)** es la combinación de las propuestas de caminata aleatoria, osea usamos las **propuestas 3 y 6** al mismo tiempo.

Como distribución inicial de nuestro algoritmo MH nos quedamos con la propuesta presentada en el enunciado, puesto que en los resultados se han mostrado diferentes comportamientos a explorar con estos puntos iniciales.

$$p \sim \mathcal{U}(0, 1), \quad N \sim \mathcal{U}_d\{\text{máx}(x_i), \ldots, N_{max}\}$$

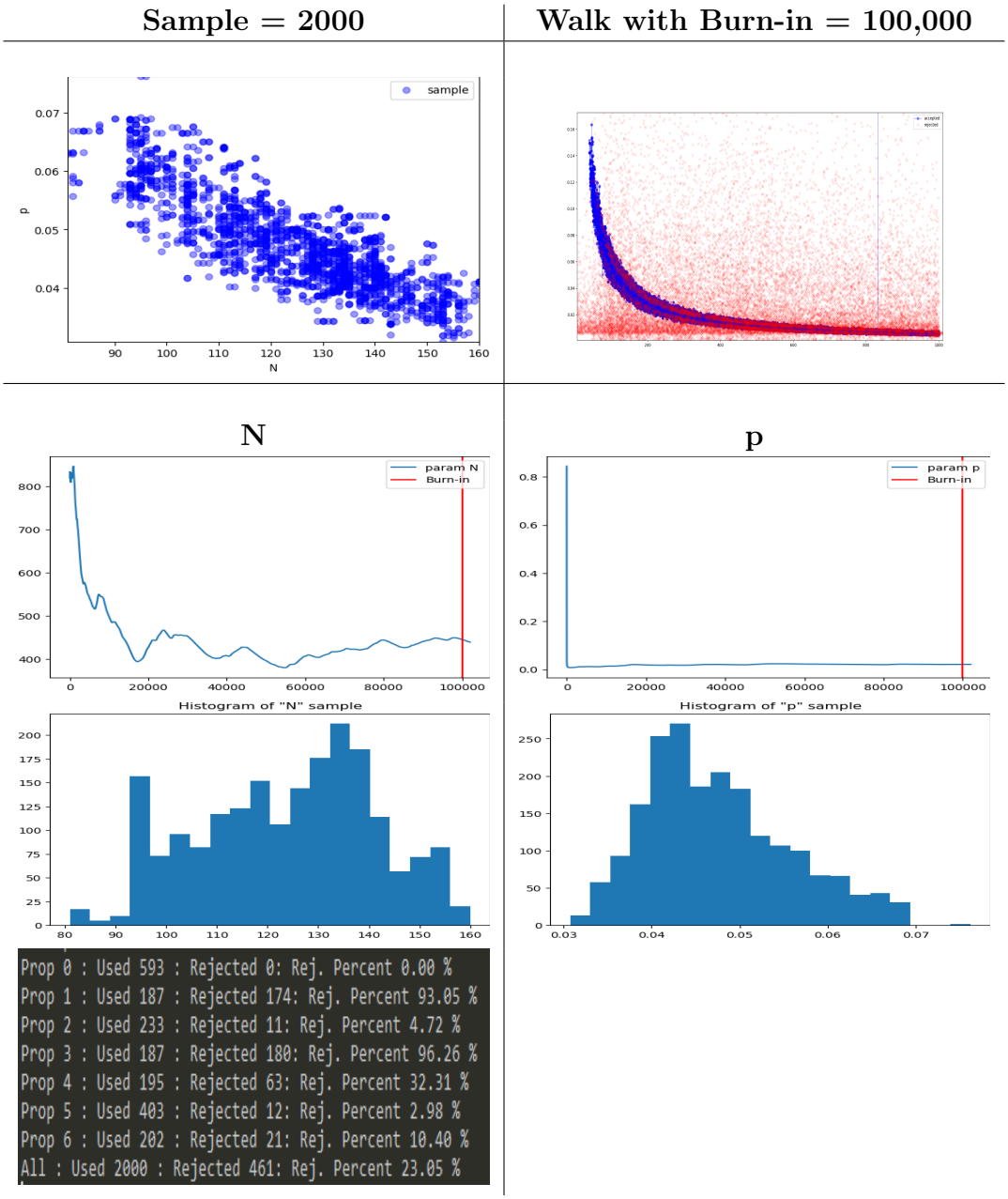
Algo que debemos mencionar sobre la nuestra implementación particular del algoritmo de **Metropolis-Hastings** es que todo se trabaja en el espacio **logaritmico**, aprovechando las implementaciones de **scipy** de la **logpdf** de muchas distribuciones. e.g. **beta.logpdf(**x**,** α**,**β**)**. La misma razón de aceptación se calcula con el logartimo de las densidades y al final solo se calcula su exponecial para determinar la aceptación o el rechazo. Esto, como se mencionó en clase, evita problemas numéricos puesto que el **soporte numérico** de las densidades será inmensamente mayor. Todo el código de esta implementación se encuentra en el archivo **metropolis_hastings_hybrid_kernels.py**.

Ahora estudiemos los resultados de usar el algoritmo de MH con Kerneles Híbridos, escogiendo cada de las propuestas como se mencionó anteriormente con la notación **prob k**. Realizaremos 2 experimentos donde en cada uno obtendremos una muestra de tamaño 2000, pero con diferentes valores de **burn-in** 1000 **y** 100000.



En este primero caso podemos observar que nuestra algoritmo no ha convergirdo a ninguna de las modas que observamos inicialmente en las curvas de nivel y se encuentra explorando

distintas regiones de alta densidad. En las gráficas de 'burn-in' donde observamos el cambio de la media, claramente notamos como cambian la distribución a N y p en distintas regiones. También en el histograma de muestras individuales observamos claramente dos modas. La eficacia de nuestras propuestas en conjunto es del 74 %, puesto que pesamos las propuestas usando nuestra intuición de que hace cada una de ellas. A estos resultados nos referíamos cuando comentabamos la taza de rechazo al definir nuestras propuestas.



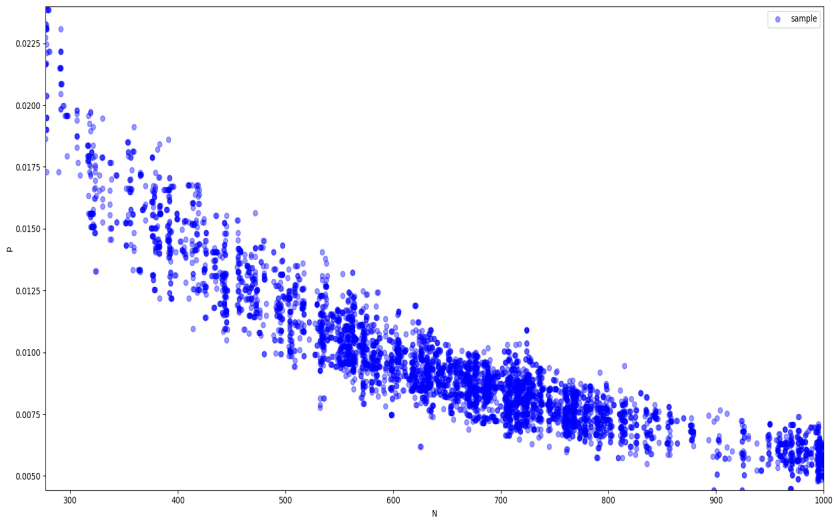
En el segundo caso despues de haber hecho 'burn-in' por mucho tiempo, 100000 iteraciones,

observamos que al final converge nuestra moda en particular con $N \approx 130$ y $p \approx .05$. Esto no quiere decir que más adelante no vaya a explorar de nuebo otra región. De la caminata completa donde también se gráfican las propuestas rechazadas notamos que se exploró todas las regiones que observamos en las curvas de nivel. La eficacia de nuestras propuestas en conjunto es del 77 %, puesto que pesamos las propuestas usando nuestra intuición de que hace cada una de ellas. Como comentario final podemos estimamos visualmente la media de los dos parámetros,

$$\hat{N} = 120, \quad \hat{p} = .05$$

describiendo un poco más la muestra obtenida.

Ahora estudiemos una muestra de tamaño 5000 al haber usado 2000 iteraciones de burn-in que representa la exploración de todas las regiones de 'alta probabilidad' que observamos en las curvas de nivel de la distribución posterior.



Notamos que hay una relación entre los valores simulados de N y p. Esto intuitivamente se entiende por que estamos ajustando un modelo **Binomial** a nuestros 20 datos $\{X_i\}$ y como su media es $\mathbb{E}[X] = Np$, tenemos que hay una relación **inversamente proporcional** entre los parámetros N y p. E.g Si hacemos más ensayos Bernoulli, N grande, entonces p debe ser pequeño por que sabemos que la especie que estamos observando no es muy abundante. De esto anterior podríamos hacer una regresión para ajustar una curva.

Ahora para hablar de la distribución de los puntos de nuestra muestra notamos que hay mucha más densidad en los valores alrededor de $N \approx 600$, haciendo alusión a una moda localizada

en mismo lugar en la gráfica de los contornos de nivel. Si hicieramos una estimación buscando los puntos $\hat{N}$,$\hat{p}$ que maximizan la distribución posterior (MAP) se encontrían en esta región, basandonos en nuestras observaciones anterior.

Problema 2

(Estudio de mercado) Se tiene un producto y se realiza una encuesta con el fin de estudiar cuánto se consume dependiendo de la edad. Sea Y_i el monto de compra y X_i la covariable la cual representa la edad.

Suponga que $Y_i \sim Po(\lambda_i)$ (distribución Poisson con intensidad λ_i)

$$\lambda_i = cg_b(x_i - a)$$

para g_b la siguiente función de liga

$$g_b(x_i - a) = exp(-\frac{x^2}{2b_2})$$

Usando Metropolis-Hastings simule de la distribución posterior.

Escribamos explícitamente la distribución posterior de los parámetros a, b y c de nuestra regressión Poisson, suponiendo que nuestros valores de a, b y c estan en el soporte de sus distribuciones a-priori respectivas,

$$\begin{aligned}
\pi(a,b,c|\bar{y},\bar{x}) &= f(\bar{y},\bar{x}|a,b,c)f(a)f(b)f(c) && (4)\\
&= \left(\prod_{i=1}^{m} \frac{\lambda_i^{y_i} e^{-\lambda_i}}{y_i!}\right) f(a)f(b)f(c) && (5)\\
&\propto \left(\prod_{i=1}^{m} \frac{\lambda_i^{y_i} e^{-\lambda_i}}{y_i!}\right) \left(e^{-\frac{(a-35)^2}{25^2}}\right) \left(b^3 e^{-\frac{2b}{5}}\right) \left(c^2 e^{-\frac{3c}{950}}\right) && (6)\\
&\propto \left(e^{-(\sum_i \lambda_i)-(\sum_i y_i(x_i-a)^2/2b^2)} c^{(\sum_i \lambda_i)}\right) \left(e^{-\frac{(a-35)^2}{25^2}}\right) \left(b^3 e^{-\frac{2b}{5}}\right) \left(c^2 e^{-\frac{3c}{950}}\right) && (7)
\end{aligned}$$

De donde despues podríamos hacer una factorización para obtener una propuesta Gibbs si encontraramos una forma de alguna densidad conocida.

A continuación presentaremos las propuestas que utilizamos para cada parámetro a, b y c que utilizamos en nuestro algoritmo :

(Propuesta 1) - Caminata Aleatoria - prob .3

$$a'|a,b,c \sim \mathcal{N}(a, .01)$$

(Propuesta 2) - Caminata Aleatoria - prob .3

$$b'|a, b, c \sim \mathcal{N}(b, .01)$$

(Propuesta 3) - Caminata Aleatoria - prob .4

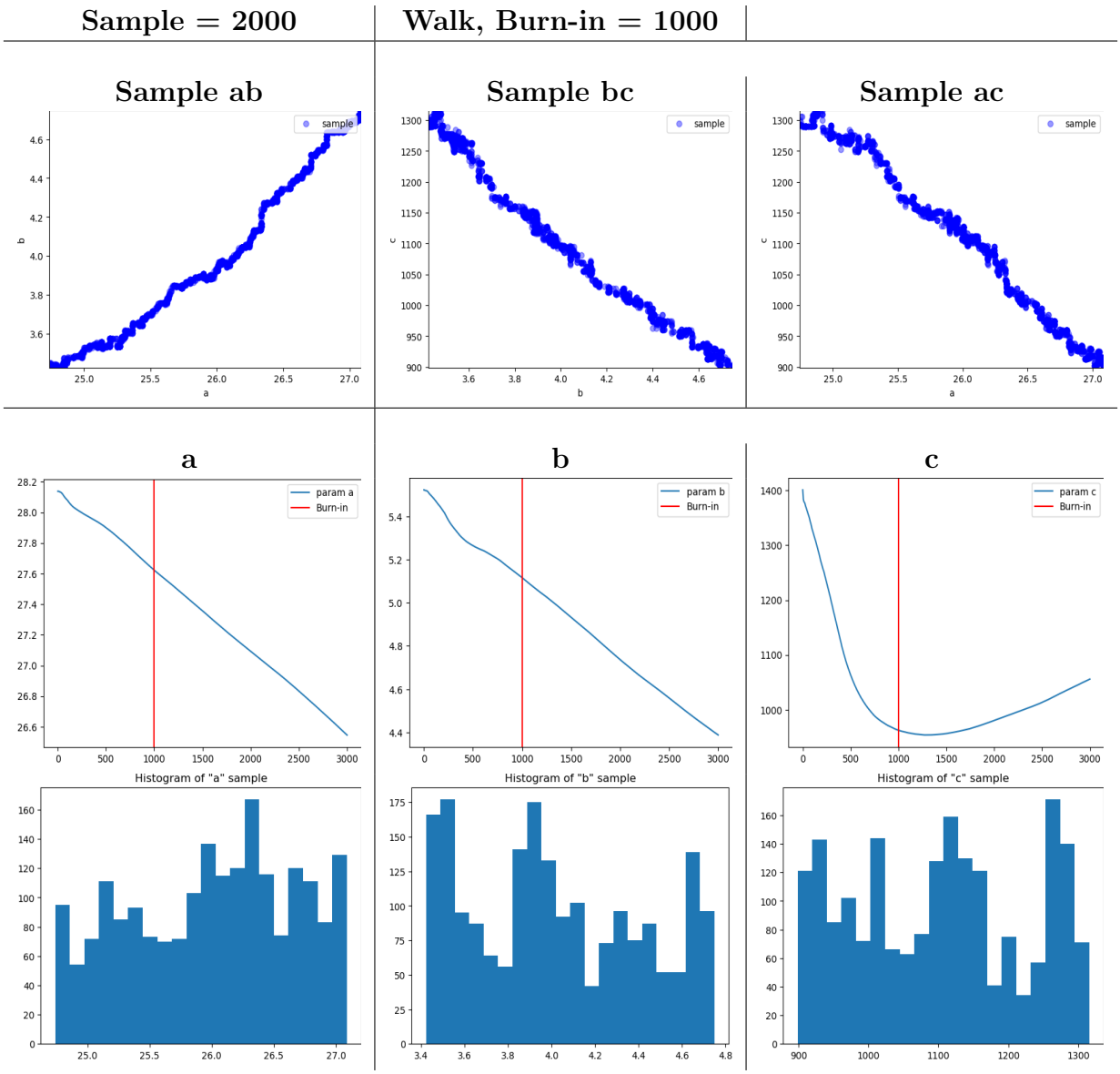
$$c'|a, b, c \sim \mathcal{N}(c, 10)$$

Escogimos una varianza más alta para aproximar la forma de la distribución de este parámetro que al ser en **pesos** tiene una varianza más grande que la **edad**. Los parámetros de σ en cada una de las propuestas fueron escogidos despues de varios experimentos donde estos mostraron mejores resultados.

Como distribución inicial de nuestro algoritmo MH usamos la siguiente propuesta, que fue determinada despues de varios experimentos para poder observar sin demasiadas iteraciones iniciales la convergencia.

$$a \sim \mathcal{U}(20, 30), \quad b \sim \mathcal{U}(0, 10), \quad c \sim \mathcal{U}(1300, 1500)$$

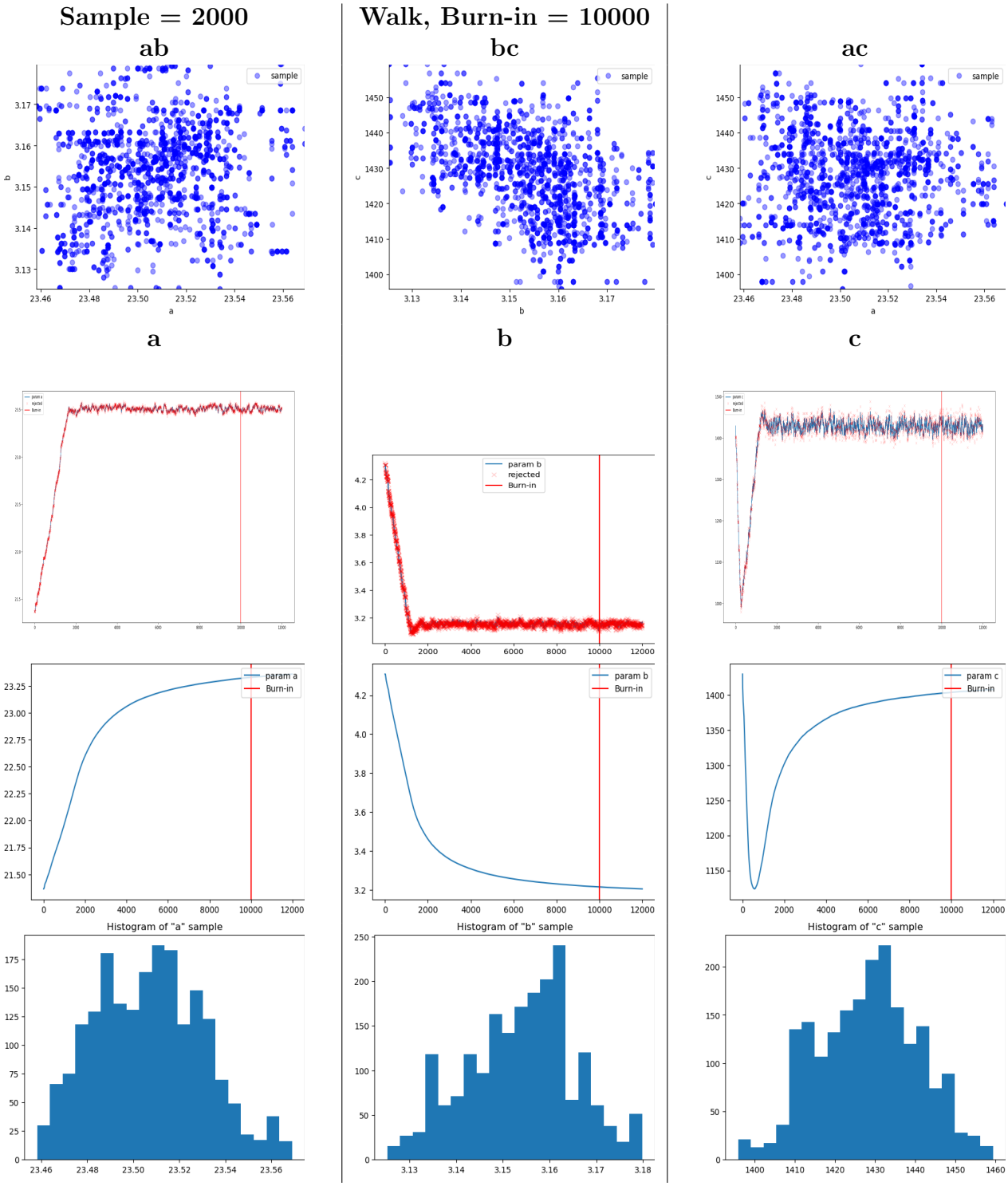
Ahora estudiaremos los experimentos para un tamaño de muestra 2000 con diferentes valores de **burn-in = 1000, 10,000**.




```
Prop 0 : Used 614 : Rejected 300: Rej. Percent 48.86 %
Prop 1 : Used 628 : Rejected 170: Rej. Percent 27.07 %
Prop 2 : Used 758 : Rejected 261: Rej. Percent 34.43 %
All : Used 2000 : Rejected 731: Rej. Percent 36.55 %
```

Notamos que con 1000 iteraciones de burn-in no converge a ningun valor la media de nuestro parámetros. Esto claramente lo podemos observar en las muestra puesto que presentan más un comportamiento de seguir explorando el soporte de la distribución posterior También podemos notar una eficiencia global del 64 % de nuestra cadena, siendo la primera propuesta

con un porcentaje de 48 % de rechazo la menos eficaz en esta etapa de la cadena cuando seguimos explorando.



```
Prop 0 : Used 582 : Rejected 86: Rej. Percent 14.78 %
Prop 1 : Used 581 : Rejected 149: Rej. Percent 25.65 %
Prop 2 : Used 837 : Rejected 229: Rej. Percent 27.36 %
All : Used 2000 : Rejected 464: Rej. Percent 23.20 %
```

En el caso de $10,000$ iteraciones de burn-in podemos observar que converje claramente a una región de alta densidad de la distribución posterior. Esto mismo se puede corroborar con los porcentajes de rechazo y de exito para generar la muestra de tamaño 2000, donde observamos una eficacia del $77\,\%$. De modo, que nuestra propuesta es

De los resultados del último experimento sabemos que las medias de los parámetros converjen a valores alrededor de,

$$\hat{a} = 23.487388712622728, \quad \hat{b} = 3.1624298746162607, \quad \hat{c} = 1426.1552131989615$$

Tenemos confianza en estos valores, pues la distribución resultante que observamos en las gráficas ab, bc y ac muestra muy poco varianza. Por la forma en la que aplicamos nuestra regressión Poisson, hay una interpretabilidad clara de estos valores. El primero nos está diciendo que en nuestros datos la edad promedio es de **23 años** en un segmento de edad de ancho $2\hat{b} \approx 6$ de compradores y que el gasto promedio de este segmento de edades es $\hat{c} = 1426$ pesos.

Problema 3

Investiga y describe muy brevemente los softwares OpenBugs, Nimble, JAGS, DRAM, Rtwalk, Mcee Hammer, PyMCMC.

- **OpenBugs :** OpenBugs es la versión opensource del paquete de software BUGS (**B**ayesian inference **U**sing **G**ibbs **S**ampling) que como su nombre nos dice, sirve para efectuar inferencia bayesiana con Gibbs Sampling de modelos jerarquicos de relaciones entre los parámetros. Las relaciones entres los parámetros se definen basandose en la estuctura de un DAG (Directed Acyclic Graph), con un lenguaje especializado en el software para definarlas.
- **Nimble :** NIMBLE es una extensión del lenguaje de BUGS para definir estructuras jerarquicas de los parámetros de un modelo, pero sin restringirlo a su utilización con algoritmos de MCMC, sino explotar esta estructura con otros posibles algoritmos. Está implementado en R, por lo que está acompañado de todas las herramientas ya conocidas de este lenguaje.

- **JAGS :** Las siglas de JAGS significan Just Another Gibbs Sampler. Es un programa de analisis bayesiano de modelos jerarquicos usando simulación MCMC. No es muy distinto que BUGS. Los 3 objetivos que se tuvieron al crear JAGS fueron : 1) Que sea una implementación mutliplataforma de BUGS, siendo este distribuido bajo una licencia GNU, 2) Que sea flexible y facil de extender con otras distribuciones o samplers, 3) Que se una herramientas para la exploración de ideas en modelación Bayesiana.

- **DRAM :** Las siglas de DRAM significan Delayed Rejection Adaptive Metropolis siendo esta una implemetnación en Matlab de un algoritmo de MCMC que combina las dos ideas de Adaptive Metropolis, Haario, et al. 2001,. y Delayed Rejection. Adaptive Metropolis consiste en ajustar la covarianza en cada iteración cuando se usa una kernel normal, destruyendo la propiedad Markoviana de la cadena, pero preservando propiedades de ergodicidad. Delayed Rejection consiste en generar una segunda propuesta cuando se rechaza la primera propuesta, en vez de solo descartar la primera propuesta y mantenerse en la posición actual.

- **Rtwalk :** Es una implelmentación en R del algoritmo 't-walk' [2] que es un algoritmo de MCMC usado para muestrear de distribuciones continuas sin tener que escoger ningun hiperparámetro y asegurando la convergencia con algunas pequeñas restricciones simples. El algoritmo de t-walk matiene en cada iteración dos puntos independientes en el espacio y se tiene una razón de aceptación igual a la de MH en el espacio producto. Se restringen las propuestas o 'pasos' a casos donde estas sean invariantes a escala y transformaciones afines.

- **Mcee Hammer : Emcee** es una implementación estable del sampler en conjunto (ensemble) para MCMC presentado por Goodman & Weare (2010). Esta implemtanción es opensource y está hecha en Python.

- **PyMCMC :** PyMC es un modulo de python que implementa varios modelos estadísticos Bayesianos y los algoritmos para ajustarlo. En particular se implementan algoritmos MCMCM. Tiene implementadas muchas herramientas para medir que tan bueno es el ajuste los modelos y explota todas las capacidades de python usando lo más posible la librería **numpy**.

Referencias

[1] (Springer Texts in Statistics) - Monte Carlo Statistical Methods (2004), Christian Robert, George Casella

[2] A General Purpose Sampling Algorithm for Continuous Distributions (the t-walk), J. Andres Christen, Colin Fox

[3] Some Examples on Gibbs Sampling andMetropolis-Hastings methods, University of New Mexico, http://www.stat.unm.edu/ ghuerta/stat574/notes-gibbs-metro.pdf