Implementando modelos estatísticos de maneira eficiente com o TMB

Um tutorial



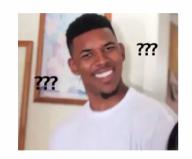
Henrique Laureano, Ricardo Petterle & Wagner Bonat

LEG @ UFPR

9 de setembro, 2021

TMB: Template Model Builder









O quê? Por quê? Como?

O que é o Template Model Builder?



Pelas palavras dos autores:



Kristensen et al. (2016).

Um pacote R (R Core Team 2021) para a rápida implementação de complexos modelos de efeitos aleatórios através de simples templates C++.

Complexos modelos de efeitos aleatórios? Do simples ao complicado.

De modelos simples como um

- um modelo linear (LM) ou
- um modelo linear generalizado (GLM),

até

- modelos não-lineares com efeitos aleatórios e
- complexos modelos espaço-temporais.

Inúmeras possibilidades...



- 1 Estudar o efeito de características numa certa variável? Modelos lineares (LM);
- 2 A resposta é não-Normal/Gaussiana? Modelos lineares generalizados (GLM);
- 3 Função não-linear nos parâmetros? **Modelos não-lineares**;
- Múltiplas respostas/variáveis? Modelos multivariados;
- 6 Presença de dependência não-observada/latente? Modelos de efeito aleatório/latente/misto.
 - 1 Modelos para dados longitudinais (medidas repetidas, séries temporais);
 - 2 Modelos para dados espaciais e espaço-temporais;
- 6 ...

O TMB possibilita o ajuste de todos esses modelos.

TMB: Automatic Differentiation and Laplace Approximation



Características-chave:

 Diferenciação automática;
o estado-da-arte na computação de derivadas

2 Aproximação de Laplace. Uma maneira eficiente de aproximar as integrais do efeito aleatório

Um pouco de matemática para justificar as coisas...

Considere que $f(u, \theta)$ seja o

negativo da sua função de log-verossililhança conjunta nII),

em que $u \in \mathbb{R}^n$ são os efeitos aleatórios desconhecidos e $\theta \in \mathbb{R}^m$ são os parâmetros.

Conjunta? Num modelo estatístico especificamos uma distribuição de probabilidade para o que observamos (dados) e outra para o que não observamos (efeito aleatório). E é aí que mora o problema!

Por que usar o TMB?



Paradigmas: Verossimilhancista e Bayesiano.

Bayesiano: Atribuição de distribuições ã *priori* para os parâmetros, que passam a serem vistos como variáveis. Não mais estimamos os "parâmetros", e sim amostramos de sua distribuição a *posteriori*. Funciona, mas é **computacionalmente intensivo**.

Verossimilhancista: Temos um problema, já que o efeito aleatório é não observável. Contudo, da estatística básica: se temos uma conjunta, basta integrarmos na variável que não queremos mais. Resultando numa

Função de verossimilhança marginal : $L(\theta) = \int_{\mathbb{R}^n} \exp(-f(u, \theta)) du$.

Bem, essa é a ideia básica. Na prática não é bem assim...

Na prática



Quando a distribuição que especificamos pro **dado** não é Gaussiana, não conseguimos resolver aquela integral analíticamente.

Aí que entra a aproximação de Laplace : $L^*(\theta) = \sqrt{2\pi}^n \det(H(\theta))^{-1/2} \exp(-f(\hat{u}, \theta)),$

- com
 - H
 - 1

Workflow

- Write your objective function in a .cpp through a #include <TMB.hpp>;
- 2 Compile and load it in R via TMB::compile() and base::dyn.load(TMB::dynlib());
- 3 Compute your objective function derivatives with obj <- TMB::MakeADFun();</p>
- Perform the model fitting, opt <- base::nlminb(obj\$par, obj\$fn, obj\$gr);</p>
- **6** Compute the parameters standard deviations, TMB::sdreport(obj).

TMB



Key features:

 Automatic differentiation;
The state-of-art in derivatives computation 2 Laplace approximation. An efficient fashion to approximate the latent effect integrals



Ideia de estrutura (slide 1 de 2)



Quatro pontos principais:

o que é, por quê usar, estrutura e características, e exemplos.

- 1 Explicar em um slide o que é o TMB;
- 2 Tá, mas por que usar o TMB?
 - Motivação: modelos mistos;
 - 2 Exemplos: dados longitudinais, modelos multivariados, espaciais (espaço-temporal, talvez pra mostrar quão longe podemos ir);
 - Não dá pra falar bem dessas coisas sem explicar o que é e qual a estrutura de um GLM e de um GLMM;
 - 4 Consequentemente, falar do calcanhar de Aquiles dum GLMM: como fazer a marginalização de maneira eficiente -> aproximação de Laplace;

Ideia de estrutura (slide 2 de 2)



- 3 Estrutura e características do TMB:
 - 1 C++;
 - 2 Bibliotecas eficientes (listar elas) e paralelismo;
 - Diferenciação automática (um exemplo, talvez o da minha dissertação);

Referências



Kristensen, K., A. Nielsen, C. W. Berg, H. J. Skaug, and B. M. Bell. 2016. "TMB: Automatic Differentiation and Laplace Approximation." *Journal of Statistical Software* 70 (5): 1–21.

Laureano, H. A. 2021. "Modeling the Cumulative Incidence Function of Clustered Competing Risks Data: A Multinomial Glmm Approach." Master's thesis, Federal University of Paraná (UFPR).

R Core Team. 2021. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria.