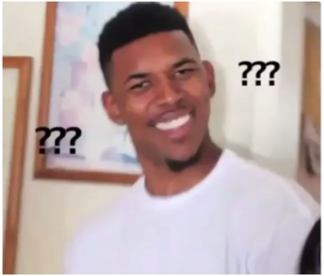
Implementando modelos estatísticos de maneira eficiente com o TMB

Um tutorial

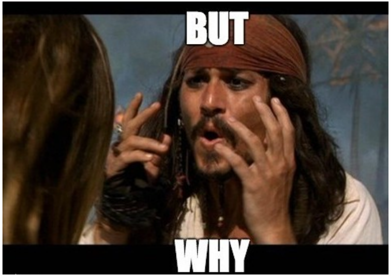
Henrique Laureano, Ricardo Petterle & Wagner Bonat
LEG @ UFPR

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**;
4. Múltiplas respostas/variáveis? **Modelos multivariados**;
5. 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: Background ideas

Características-chave:

1. 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-verossimilhança **conjunta** **(nll)**,

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**!

TMB: Lidando com efeitos aleatórios

Paradigmas: Verossimilhancista e Bayesiano.

Bayesiano: Atribuição de distribuições a *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** : $L^\star(\theta) = \sqrt{2\pi}^n \det(H(\theta))^{-1/2} \exp(-f(\hat{u}, \theta))$,

com

- $H(\theta) = f''_{uu}(\hat{u}(\theta), \theta)$ sendo o Hessiano de $f(u, \theta)$ w.r.t. u e avaliado em $\hat{u}(\theta)$;
- $\hat{u}(\theta) = \arg\min_u f(u, \theta)$ sendo o minimizador de $f(u, \theta)$ w.r.t. u.

Finalmente,
a função objetivo final a ser minimizada em termos de θ é

$$-\log L^\star(\theta) = -n \log \sqrt{2\pi} + \frac{1}{2} \log \det(H(\theta)) + f(\hat{u}, \theta),$$

i.e., o **log negativo da aproximação de Laplace**.

Automatic Differentiation (AD)

Uncertainty quantification: Método-δ

$$\text{VAR}(\phi(\hat{\theta}) = -\phi_{\theta}^{'}(\hat{\theta}))(\triangledown^2 \log L^{\star}(\hat{\theta}))^{-1}\phi_{\theta}^{'}(\hat{\theta})^{\top},$$

ou seja,
conseguimos quantificar a incerteza da estimativa $\hat{\theta}$, e de qualquer função diferenciável da estimativa $\phi(\hat{\theta})$.

Em todas as etapas

- Aproximação de Laplace (*otimização interna*);
- Log negativo da aproximação de Laplace (*otimização externa*);
- Quantificação da incerteza,

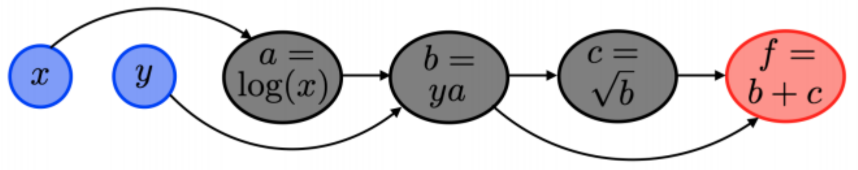
o cálculo de derivadas (1a e 2a ordem) é essencial.
Portanto, sermos capazes de usar a **maneira mais eficiente existente** *hoje* pra calcular essas derivadas, é uma tremenda **qualidade**.

Diferenciação automática (AD) em um exemplo

Considere a função (exemplo retirado de Peyré (2020, página 33))

$$f(x, y) = y \log(x) + \sqrt{y \log(x)}$$

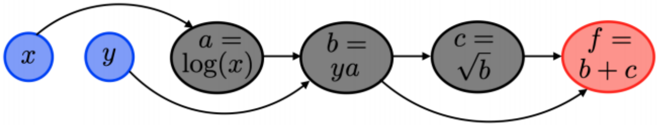
O que a **AD** internamente faz é decompor a função em *nodos*, construir um ***grafo***



e trabalhar em cima do mesmo.

Existem dois **modos** de avaliar a função via **AD**. O modo **forward** e o modo **reverse**.
O que o **TMB** faz é a **reverse**, **computationalmente mais eficiente**.

AD: modo reverso



Função:

$$f(x, y) = y\log(x) + \sqrt{y\log(x)}$$

$$\frac{\partial f}{\partial f} = 1$$

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{\partial f}{\partial f}\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{\partial f}{\partial f}1 \qquad \{c \mapsto f = b + c\}$$

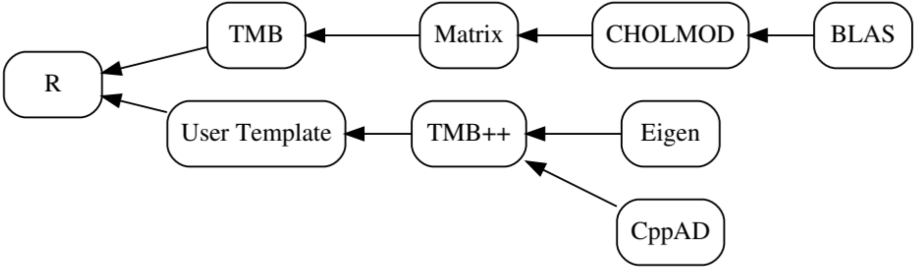
$$\frac{\partial f}{\partial b} = \frac{\partial f}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial b} + \frac{\partial f}{\partial f}\frac{\partial f}{\partial b} = \frac{\partial f}{\partial c}\frac{1}{2\sqrt{b}} + \frac{\partial f}{\partial f}1 \qquad \{b \mapsto c = \sqrt{b},\ b \mapsto f = b + c\}$$

$$\frac{\partial f}{\partial a} = \frac{\partial f}{\partial b}\frac{\partial b}{\partial a} = \frac{\partial f}{\partial b}y \qquad \{a \mapsto b = ya\}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial b}\frac{\partial b}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial b}a \qquad \{y \mapsto b = ya\}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial a}\frac{\partial a}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial a}\frac{1}{x} \qquad \{x \mapsto a = \log(x)\}$$

TMB package design (Kristensen et al. (2016))



Combinação de algums softwares *estado-da-arte*:

- `CppAD`, um pacote `C++` para AD https://coin-or.github.io/CppAD/;
- Bibliotecas de álgebra como a `Eigen` (Guennebaud, Jacob, and others (2010), em `C++`), a `CHOLMOD` (https://developer.nvidia.com/cholmod, em `C`) e a `Matrix` (Bates and Maechler (2019), usando a `LAPACK` http://www.netlib.org/lapack/ e a `SuiteSparse` https://sparse.tamu.edu/);
- Paralelismo através da `BLAS` (http://www.netlib.org/blas/, em `Fortran`).

TMB: Template Model Builder

Como usar?

Workflow

1. Escreva sua função objetivo em um `.cpp` com `#include <TMB.hpp>`;
2. Compile e carregue seu arquivo `.cpp` em R via `TMB::compile()` e `base::dyn.load(TMB::dynlib())`;
3. Compute as derivadas da sua função objetivo com `obj <- TMB::MakeADFun()`;
4. Faça o ajuste do modelo, `opt <- base::nlminb(obj$par, obj$fn, obj$gr)`;
5. Quantifique a incerteza dos parâmetros, `TMB::sdreport(obj)`.

(Extra) Funcionalidades

- Paralelização;
- Simulação;
- Esparsidade;
- Perfis de verossimilhança;
- ...

TMB: Template Model Builder, Exemplos

- Lista online dos usuários de TMB: https://groups.google.com/g/tmb-users;
- Tutorial online: https://kaskr.github.io/adcomp/_book/Tutorial.html;
- Para mais detalhes sobre TMB, AD e aproximação de Laplace: Laureano (2021).
- Tutorial completo disponível em https://github.com/henriquelaureano

Referências

Bates, D., and M. Maechler. 2019. *Matrix: Sparse and Dense Matrix Classes and Methods*. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria.

Guennebaud, G., B. Jacob, and others. 2010. “Eigen V3.” http://eigen.tuxfamily.org.

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).

Peyré, G. 2020. “Course Notes on Optimization for Machine Learning.” May 10, https://mathematical-tours.github.io/book-sources/optim-ml/OptimML.pdf.

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