Simulación

3. Monte Carlo a través de Cadenas de Markov (MCMC) Gibbs Sampler

Jorge de la Vega Góngora

Departamento de Estadística, Instituto Tecnológico Autónomo de México

Clase 10



Gibbs Sampler

Gibbs Sampler I

- El Gibbs Sampler es un caso particular del algoritmo de Metropolis-Hastings.
- Se aplica cuando la distribución objetivo $\pi(\theta)$ de la que se quiere tomar una muestra es una distribución multivariada.
- Idea:
 - $\boldsymbol{\theta}$ se puede particionar en k subvectores: $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \dots, \boldsymbol{\theta}_k)$
 - La cadena de Markov se genera a través de muestrear de las distribuciones condicionales de la distribución objetivo:

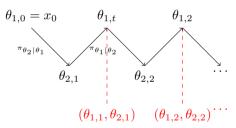
$$\pi(\boldsymbol{\theta}_j|\boldsymbol{\theta}_{-j},y), \text{ donde } \boldsymbol{\theta}_{-j}=\boldsymbol{\theta}\setminus\boldsymbol{\theta}_j, \quad j=1,\ldots,k$$

iterando sobre los k subvectores de parámetros θ_{-j} .

- En el caso bidimensional, $\theta=(\theta_1,\theta_2)\sim\pi(\theta_1,\theta_2)$. Se genera una cadena de Markov $(\theta_{1t},\theta_{2t})$ del siguiente modo. Para $n=1,2,\ldots$:
 - Se inicializa la cadena $\theta_{1,0}=x_0$.
 - Genera $\theta_{2t} \sim \pi_{\theta_2|\theta_1}(\cdot|\theta_{1,t-1})$.
 - ullet Genera $heta_{1t} \sim \pi_{ heta_1| heta_2}(\cdot| heta_{2t})$
 - Incrementa t a t+1 hasta n

Gibbs Sampler II

- En el caso del Gibbs sampler, a diferencia del Metropolis-Hastings, *cada candidato generado es aceptado*.
- Una representación gráfica del flujo del algoritmo se muestra a continuación:



Ejemplo 1 GS Normal bivariada I

Consideremos una normal bivariada $\mathcal{N}_2(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ con $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2)$ y $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho \\ \rho & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$. En este caso es fácil conocer las marginales:

$$Y_{n+1}|X_n \sim \mathcal{N}\left(\mu_2 + \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1}(X_n - \mu_1), (1 - \rho^2)\sigma_2^2\right)$$

 $X_{n+1}|Y_{n+1} \sim \mathcal{N}\left(\mu_1 + \rho \frac{\sigma_1}{\sigma_2}(Y_{n+1} - \mu_2), (1 - \rho^2)\sigma_1^2\right)$

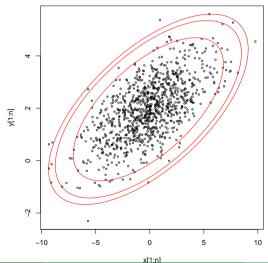
Entonces $(X_n,Y_n) \to \mathcal{N}_2(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$. A continuación se muestra la simulación para el caso $\rho=0.5$, $\mu_1=0, \mu_2=2, \sigma_1=1$ y $\sigma_2=2$.

◆ロト ◆回 ト ◆ 差 ト ◆ 差 ・ か Q (~)

Ejemplo 1 GS Normal bivariada II

```
library(mixtools) #para la función ellipse.
mixtools package, version 1.1.0, Released 2017-03-10
This package is based upon work supported by the National Science Foundation under Grant No. SES-0518772.
par(pty="s") #plot cuadrado
n <- 1000; x0 <- 0 #valor incial
x <- NULL; v <- NULL
x \leq -append(x0.x)
rho <- 0.5; mu1 <- 0; mu2 <- 2; sigma1 <- 1; sigma2 <- 2 #valores dados
for(i in 1:n){
        v <- append(v, rnorm(1,mean=mu2 + rho*sigma1/sigma2*(x[i]-mu1),sd=sqrt(1-rho^2))*sigma1)
        x <- append(x, rnorm(1,mean=mu1 + rho*sigma2/sigma1*(v[i]-mu2),sd=sqrt(1-rho^2))*sigma2)
plot(x[1:n], y[1:n], cex=0.5)
ellipse(mu = colMeans(cbind(x[1:n],v[1:n])), sigma = cov(cbind(x[1:n],v[1:n])).
              alpha = 0.005, npoints = 300, col="red")
ellipse(mu = colMeans(cbind(x[1:n],y[1:n])), sigma = cov(cbind(x[1:n],y[1:n])),
              alpha = 0.01, npoints = 300, col="red")
ellipse(mu = colMeans(cbind(x[1:n],y[1:n])), sigma = cov(cbind(x[1:n],y[1:n])),
              alpha = 0.05, npoints = 300, col="red")
```

Ejemplo 1 GS Normal bivariada III



GS multiestado

Si se particiona el vector \mathbf{X} en k componentes $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_k)$, y podemos simular de $f_i(\mathbf{x}_i | \mathbf{x}_{-i})$, entonces podemos aplicar el siguiente algoritmo:

Algoritmo Gibbs sampler

- $lackbox{1}$ Inicializar $\mathbf{X}^{(0)}=(\mathbf{X}_1^{(0)},\mathbf{X}_2^{(0)},\ldots,\mathbf{X}_k^{(0)})$ y j=1
- Obtener $\mathbf{X}^{(j)}$ a partir de $\mathbf{X}^{(j-1)}$ generando

$$\begin{array}{llll} \mathbf{x}_{1}^{(j)} & \sim & f(\mathbf{x}_{1}|\mathbf{x}_{2}^{(j-1)}, \ldots, \mathbf{x}_{k}^{(j-1)}) \\ \mathbf{x}_{2}^{(j)} & \sim & f(\mathbf{x}_{2}|\mathbf{x}_{1}^{(j)}, \mathbf{x}_{3}^{(j-1)}, \ldots, \mathbf{x}_{k}^{(j-1)}) \\ \mathbf{x}_{3}^{(j)} & \sim & f(\mathbf{x}_{3}|\mathbf{x}_{1}^{(j)}, \mathbf{x}_{2}^{(j)}, \ldots, \mathbf{x}_{k}^{(j-1)}) \\ & & \vdots & \\ \mathbf{x}_{k-1}^{(j)} & \sim & f(\mathbf{x}_{k-1}|\mathbf{x}_{1}^{(j)}, \mathbf{x}_{2}^{(j)}, \ldots, \mathbf{x}_{k}^{(j-1)}) \\ \mathbf{x}_{k}^{(j)} & \sim & f(\mathbf{x}_{k}|\mathbf{x}_{1}^{(j)}, \mathbf{x}_{2}^{(j)}, \ldots, \mathbf{x}_{k-1}^{(j)}) \end{array}$$

 $oxed{3}$ Hacer j:=j+1 y repetir el paso 2 hasta que la sucesión $\{\mathbf{X}^{(n)}\}$ converja a la distribución objetivo.

◆ロト ◆御 ト ◆ 恵 ト ◆ 恵 ・ 夕 ♀ ○

<u>Ejemplo, Casella y George (1992) I</u>

Supongan que X, P y N son tres variables aleatorias con densidad conjunta:

$$\pi(x, p, n) \propto \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x} \frac{4^n}{n!}$$

para $x \in \{0, 1, \dots, n\}$, $p \in (0, 1)$, $n \in \mathbb{N}$. ¿Cómo podemos obtener una muestra aleatoria de esta distribución? Notar que X v N son dependientes.

Con esta estructura, podemos establecer el muestreo de Gibbs de la siguiente manera:

- $X|\{P=p, N=n\} \propto \text{Bin}(n,p)$.
- $P|\{X = x, N = n\} \propto \mathcal{B}e(x+1, n-x+1).$
- $N|\{X=x,P=p\}\propto \frac{(1-p)^{n-x}4^n}{(n-x)!}$ para $n=x,x+1,\ldots$ Esta es una distribución Poisson desplazada con parámetro 4(1-p), es decir. $N|\{P=p, X=x\} \sim Z+x$ donde $Z \sim \mathcal{P}(4(1-p)).$

De acuerdo al algoritmo dado, la implementación se realiza de la siguiente manera:

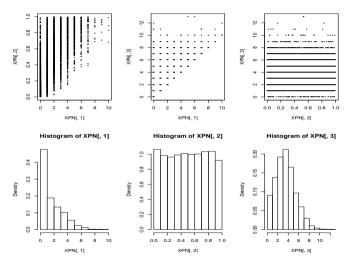
• Inicializar $(x_0, p_0, n_0) \leftarrow (1, 0.5, 2)$

Ejemplo, Casella y George (1992) II

- Para $m=1,\ldots,M$
 - $x_m \sim \text{Bin}(n_{m-1}, p_{m-1})$
 - $p_m \sim \mathcal{B}e(x_m + 1, n_{m-1} x_m + 1)$
 - $z \sim \mathcal{P}\left(4(1-p_m)\right)$ y $n_m = z + x_m$

El algoritmo anterior nos da la secuencia de valores $(x_0, p_0, n_0), (x_1, p_1, n_1), \dots (x_M, p_M, n_M)$. El sigiente código grafica las distribuciones bivariadas y las marginales en base a la muestra.

Ejemplo, Casella y George (1992) III



¿Porqué funciona el Gibbs sampler? I

- El Gibbs sampler funciona porque es un caso especial del algoritmo de Metropolis-Hastings.
- Para verlo, consideremos la actualización de uno de los subvectores en la iteración para mostrar la lógica. Todos los pasos en cada variable siguen el mismo razonamiento.
- Sea $i = (x_1, x_2, \dots, x_k) \in \mathcal{S}$ el estado actual.
- La distribución candidata $q(\cdot|\cdot)$ será la distribución condicional de X_1 dados X_2,\ldots,X_k . Con esta distribución, se obtiene y $j=(x_1^*,x_2,\ldots,x_k)$, el estado propuesto.

¿Porqué funciona el Gibbs sampler? II

• La probabilidad de aceptación del paso es $\alpha(i,j)=rac{\pi_j q(i|j)}{\pi_i q(j|i)}=rac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}}$. Entonces

$$\pi_{j}q_{ji} = \pi(x_{1}^{*}, x_{2}, \dots, x_{k})f_{X_{1}|X_{2}, \dots, X_{k}}(x_{1}|x_{2}, \dots, x_{k})
= \pi(x_{1}^{*}, x_{2}, \dots, x_{k}) \left(\frac{\pi(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{k})}{\int \pi(x, x_{2}, \dots, x_{k}) dx}\right)
= \pi(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{k}) \left(\frac{\pi(x_{1}^{*}, x_{2}, \dots, x_{k})}{\int \pi(x, x_{2}, \dots, x_{k}) dx}\right)
= \pi(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{k})f_{X_{1}|X_{2}, \dots, X_{k}}(x_{1}^{*}|x_{2}, \dots, x_{k})
= \pi_{i}q_{ij}$$

Así que $\alpha(i,j)=1$, lo que implica que con esta elección de función q el estado propuesto siempre se acepta.

Ejemplo 2: GS en modelos jerárquicos I

Modelo jerárquico Binomial-beta

El Gibbs sampler se hizo muy popular en los 90's por sus aplicaciones en estadística Bayesiana, sobre todo en los problemas de estimación de modelos jerárquicos, ya que se cuenta con las marginales de manera explícita.

Ejemplo

Consideren el modelo jerárquico

$$x|\theta \sim \operatorname{Bin}(n,\theta)$$

 $\theta \sim \operatorname{Be}(a,b)$

• Los parámetros n, a y b son parámetros molestos (nuisance) o hiperparámetros, en el sentido de que no son de interés de la estimación. Son muy comunes en los modelos jerárquicos.

• Entonces se tiene que la densidad conjunta de X y θ se puede escribir como

$$f(X,\theta) = f(X|\theta)f(\theta) = f(\theta|X)f(X) = \binom{n}{x}\theta^x (1-\theta)^{n-x} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \theta^{a-1} (1-\theta)^{b-1}$$
$$f(\theta|X) = \frac{f(X,\theta)}{f(X)} \propto \binom{n}{x}\theta^{x+a-1} (1-\theta)^{n-x+b-1}$$

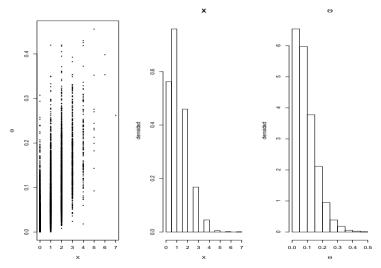
- Entonces $\theta|X \sim \mathcal{B}e\ (x+a,n-x+b)$ (beta y binomial son familias conjugada). Así que para generar una muestra (X,θ) se puede generar observaciones de las marginales $f(X|\theta)$ y de $f(\theta|X)$.
- Queremos obtener muestras de la conjunta de los datos y el parámetro. Se considera una binomial con n=15, con a=1 y b=8, como ejemplo

Ejemplo 2: GS en modelos jerárquicos III

Modelo jerárquico Binomial-beta

Ejemplo 2: GS en modelos jerárquicos IV

Modelo jerárquico Binomial-beta



Podríamos incluir a los parámetros molestos como parámteros de interés y tener un modelo Jorge de la Vega Góngora (ITAM)

Aplicación: Análisis de punto de cambio I

• **Problema**: Considerar el siguiente proceso Poisson con punto de cambio:

$$X_{t} \sim \begin{cases} \mathcal{P}(\mu t) & 0 < t \leq k \\ \mathcal{P}(\lambda t) & t > k \end{cases}$$

Dada una muestra de n observaciones del proceso anterior, estimar μ , λ y k.

- Este es un proceso muy común y que ha sido ampliamente estudiado. Hay varias opciones de especificación de modelos Bayesianos para resolverlo.
- Una aplicación concreta del problema anterior se relaciona con los datos publicados en el artículo de R.G. Jarret: A note on the intervals between coal-mining disasters. Biometrika, 66:191-193, 1979. Los datos se encuentran en coal, en el paquete de R boot y corresponden a las fechas de 191 explosiones en minas de carbón que resultaron en más de 10 fatalidades desde marzo 15, 1851 hasta marzo 22, 1962.

Aplicación: Análisis de punto de cambio II

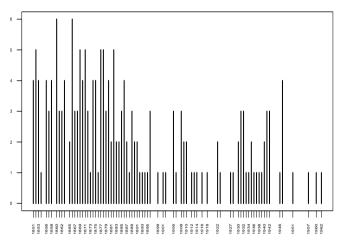
```
library(boot)
par(mar=c(2,2,3,1))
data(coal)
head(coal) #fecha en numeros consecutivos desde 1851

date

1 1851.203
2 1851.632
3 1851.969
4 1851.975
5 1852.314
6 1852.334
año <- floor(coal) #tomamos el año del evento
y <- table(año) #tumamos el año del evento
por canada de eventos por año
plot(y,1as=2,main="Accidentes en Minas por año 1851-1962",cex.axis=0.4)
```

Aplicación: Análisis de punto de cambio III

Accidentes en Minas por año 1851-1962



Aplicación: Análisis de punto de cambio IV

Los datos muestran un cambio en el número promedio de desastres por año alrededor de 1900. Los números anuales de accidentes se crean a continuación:

```
año <- floor(coal[[1]]) #extrae las fechas como vector
y <- tabulate(año) #usa tabulate para obtener los años con frecuencia 0
y <- y[1851:length(y)]
y

[1] 4 5 4 1 0 4 3 4 0 6 3 3 4 0 2 6 3 3 5 4 5 3 1 4 4 1 5 5 3 4 2 5 2 2 3
[36] 4 2 1 3 2 2 1 1 1 1 3 0 0 1 0 1 1 1 0 0 3 1 0 3 2 2 0 1 1 1 0 1 0 1 0 0
[71] 0 2 1 0 0 0 1 1 0 2 3 3 1 1 2 1 1 1 1 2 3 3 0 0 0 1 4 0 0 0 1 0 0 0
[106] 0 1 0 0 1 0 1

[106] 0 1 0 0 1 0 1

[106] 0 1 0 0 1 0 1
```

Modelado:

• Sea $Y_i =$ número de desastres en el año i (1851=1). Entonces, si k es el año punto de cambio,

$$Y_i \sim \mathcal{P}(\mu), \qquad i = 1, \dots k,$$

 $Y_i \sim \mathcal{P}(\lambda), \qquad i = k + 1, \dots, n$

Hay n=112 observaciones terminando en el año 1962. El parámetro a estimar es $\pmb{\theta}=(k,\mu,\lambda)$.

Aplicación: Análisis de punto de cambio V

- Se requiere estimar como distribución objetivo la posterior $\pi(\theta|y) = \pi(k,\mu,\lambda|y)$, y en particular, la distribución posterior de k, $\pi(k|y,\mu,\lambda)$.
- Se puede construir un modelo Bayesiano con las siguientes distribuciones iniciales *independientes*:

$$k \sim U\{1, 2, \dots, n\},$$

 $\mu \sim \mathcal{G}(a_1, b_1),$
 $\lambda \sim \mathcal{G}(a_2, b_2)$

donde a_1 , a_2 , b_1 y b_2 son hiperparámetros que se pueden fijar o bien, se pueden considerar a su vez aleatorios. Para este ejercicio se considerarán dados.

- Definimos:
 - $S_k = \sum_{i=1}^k Y_i$ el número de accidentes hasta el periodo de cambio
 - $S_k^c = S_n S_k$ el número de accidentes posteriores al cambio.



Aplicación: Análisis de punto de cambio VI

Estas variables son sumas de gammas independientes. Para aplicar el GS, se necesita especificar las distribuciones condicionales posteriores. Las densidades condicionales para k, μ , λ , están dadas por:

$$\mu|y,k \sim \mathcal{G}(a_1 + S_k, k + b_1)$$

$$\lambda|y,k \sim \mathcal{G}(a_2 + S_k^c, n - k + b_2)$$

$$k|y,\mu,\lambda \sim \frac{L(Y|k,\mu,\lambda)}{\sum_{j=1}^n L(Y|j,\mu,\lambda)}$$

con función de verosimilitud

$$L(Y|k,\mu,\lambda) = e^{k(\lambda-\mu)} \left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{S_k}.$$

Aplicación: Análisis de punto de cambio VII

Por ejemplo, para encontrar la distribución de $\mu|y,k$ usamos la siguiente relación:

$$\pi(\mu|y,k) \propto \pi(y|k,\mu)\pi(k,\mu) = \pi(y|k,\mu)\pi(k)\pi(\mu)$$

$$\propto \prod_{i=1}^{k} e^{-\mu}\mu^{y_i}e^{-b_1\mu}\mu^{a_1-1}$$

$$\propto e^{-k\mu-b_1\mu}\mu^{S_k+a_1-1}$$

que corresponde al kernel de una distribución $\mathcal{G}\left(S_{k}+a_{1},k+b_{1}
ight)$, por lo que

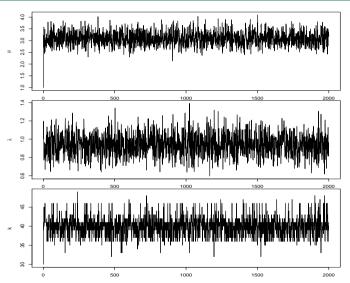
$$\mu|y,k \sim \mathcal{G}\left(S_k + a_1, k + b_1\right)$$
.

Aplicación: Análisis de punto de cambio VIII

```
# Simulación de los datos para la distribución del punto de cambio.
n <- length(v)
                                # longitud de los datos
m < -2000
                                # longitud de la cadena
mu <- lambda <- k <- numeric(m) # inicializa mu, lambda u k
I <- numeric(n)
k[1] <- sample(1:n, 1) # valor inicial del vunto de cambio (seleccionado al azar)
mu[1] <- 1
lambda[1] <- 1
b1 <- b2 <- 1
a1 <- a2 <- 2
for (i in 2.m) {
            mu[i] <- rgamma(1, shape = a1 + sum(v[1:k[i-1]]), rate = k[i-1] + b1) # genera mu
        lambda[i] \leftarrow rgamma(1, shape = a2 + sum(y) - sum(y[i:k[i-1]]), rate = n - k[i-1] + b2) # genera lambda
# Construye la función de verosimilitud
for(| in 1:n){
L[j] <- exp((lambda[i]-mu[i])*j) * (mu[i]/lambda[i])^sum(y[1:j])
I. <- I./sum(I.)
#genera k de la distribución discreta L en 1:n
k[i] \leftarrow sample(1:n, prob = L, size = 1)
```

```
par(mfrow = c(3,1))
par(mar = c(2,4,0,1))
plot(mu, type = "1", ylab = expression(mu))
plot(lambda, type = "1", ylab = expression(lambda))
plot(k, type = "1", ylab = "k")
```

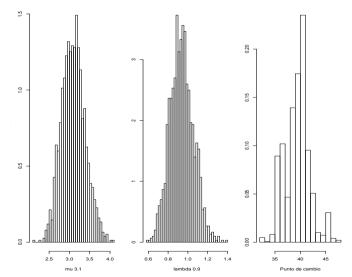
Aplicación: Análisis de punto de cambio IX



Aplicación: Análisis de punto de cambio X

```
# histogramas de las muestras del GS
b <- 500
                     # burn-in
par(mar=c(4,3,0,1))
par(mfrow=c(1,3))
label1 <- paste("mu", round(mean(mu[b:m]), 1))</pre>
label2 <- paste("lambda", round(mean(lambda[b:m]), 1))</pre>
hist(mu[b:m], main="", xlab=label1, breaks = 30, prob=TRUE) #mu posterior
hist(lambda[b:m], main="", xlab=label2, breaks = 30, prob=TRUE) #lambda posterior
hist(k[b:m], breaks = min(k[b:m]):max(k[b:m]), prob=TRUE, main="", xlab = "Punto de cambio")
```

Aplicación: Análisis de punto de cambio XI



Aplicación: Análisis de punto de cambio XII

Entonces el punto de cambio está alrededor de $\hat{k}=40$, que corresponde al año 1851+40=1891. De 1851 a 1890 la media Poisson es alrededor de $\hat{\mu}\approx 3.1$ y del año 1891 hacia adelante la media es $\hat{\lambda}\approx 0.93$

GS Software

Software relacionado al GS I

- BUGS (Bayesian Analysis using Gibbs Sampler) es un programa que permite realizar el análisis Bayesiano de modelos estadísticos complicados, utilizando métodos MCMC y extraer muestras de distribuciones posteriores. Fue desarrollado del 89 al 97 por un equipo en Cambridge dirigido por David Spiegehalter.
- De este modo, podemos enfocarnos en el modelado estadístico, que es el principal interés, y dejar los cálculos a la computadora. La sintaxis de *BUGS es similar a la de R, pero hay diferencias que hay que notar.
- BUGS tiene dos sabores: WinBUGS, versión para Windows con interfaz gráfica y OpenBUGS, que
 es la versión de consola, abierta y extendida a más plataformas. Ahora también tiene su
 versión GUI.
- WinBUGS ya no se actualiza y se ha sustituído principalmente por OpenBUGS. BRugs y R20penBUGS son paquetes interfaz entre OpenBUGS y R.
- Una buena manera de aprender lo básico de WinBUGS es ver: WinBUGS The Movie
- JAGS (Just Another Gibbs Sampler) es otro proyecto independiente de BUGS para hacer análisis de modelos jerárquicos bayesianos usando MCMC. Desarrollado por Martyn Plummer

Software relacionado al GS II

 Stan Stan es un lenguaje y librerias para obtener inferencia Bayesiana utilizando muestreo MCMC, utilizando como interfase a R, pero también puede ser Python, MATLAB, JULIA y Stata.
 A la fecha es uno de las implementaciones con más interés en desarrollo. La documentación se puede encontrar aquí.

Aún cuando hay muchas implementaciones, el lenguaje básico es muy similar en todas ellas, y es muy parecida a la de BUGS, por lo que nos concentraremos en esa versión.

Modelado en BUGS

- Para llevar a cabo un análisis en BUGS, se requiere realizar el siguiente procedimiento:
 - Definir el modelo
 - Incluir los datos observados
 - Dar valores iniciales para los parámetros.
 - Estimar el modelo
 - Realizar evaluación de diagnósticos.
 - Analizar los resultados
- A continuación seguiremos el procedimiento en WinBUGS a través de un ejemplo sencillo, y lo haremos también a través de la interfase a R utilizando BRugs.

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado I

• Paso 1: Consideremos un modelo normal conjugado:

$$y|\theta \sim \mathcal{N}\left(\theta, \sigma^2\right)$$

donde σ^2 es conocido, y la prior de la media θ también es normal,

$$\theta | \eta \sim \mathcal{N}\left(m, \tau^2\right)$$

donde m y τ son hiperparámetros conocidos, donde $\eta=(m,\tau)$; entonces la distribución posterior, $\theta|y$ también es normal:

$$\theta|y \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma^2 m + \tau y}{\sigma^2 + \tau^2}, \frac{\sigma^2 \tau^2}{\sigma^2 + \tau^2}\right)$$

= $\mathcal{N}\left(Bm + (1 - B)y, B\tau^2\right)$

donde $B = \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + \tau^2} \in (0, 1)$, se puede interpretar como un factor de compresión de la media.

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado II

 En estadística Bayesiana, es común pensar en términos del concepto de precisión más que de varianza.

Precisión

La precisión es el recíproco de la varianza: si σ^2 es la varianza, la precisión es $1/\sigma^2$.

• Tomando una muestra aleatoria y_1, \ldots, y_n , la información de toda la muestra se puede combinar en la *estadística suficiente* \bar{y} , y entonces la posterior en términos de una muestra queda como:

$$\theta | \bar{y} \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma^2 m + \tau^2 \bar{y}}{\sigma^2 / n + \tau^2}, \frac{\frac{\sigma^2}{n} \tau^2}{\sigma^2 / n + \tau^2}\right)$$
$$= \mathcal{N}\left(\frac{\sigma^2 m + n \tau \bar{y}}{\sigma^2 + n \tau^2}, \frac{\sigma^2 \tau^2}{\sigma^2 + n \tau^2}\right)$$

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado III

• Pasos 2 y 3: Por ejemplo, si m=2, $\tau=\sigma=1$ y $\bar{y}=6$, podemos obtener la distribución posterior para diferentes tamaños n de la muestra.

Aunque este modelo está resuelto de manera analítica, se puede usar como referencia para aprender WinBUGS.

Para ejecutar este modelo desde R usando BRugs, seguimos el mismo proceso.

• Paso 4: Escribimos el modelo a un archivo, y se "checa" el modelo:

```
library(BRugs) #Paquete que establece la conexión de OpenBUGS y R

Welcome to BRugs connected to OpenBUGS version 3.2.3

setud("-/Dropbox/Academia/ITAM/SimS18-II/bugs/modelo1/")

Modelo <- "model(
prec.ybar <- n/sigma2 #Los modelos normales en BUGS usan precision, no varianza
prec.theta <- 1/tau2

ybar - dnorm(theta,prec.ybar)

theta - dnorm(mu,prec.theta)
}"

writelines(Modelo, con = "Modelo.txt")

model(heck("Modelo.txt")

model is syntactically correct
```

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado IV

② Cargamos los datos y los valores iniciales a un archivo. Cargamos los datos del modelo. Aquí suponemos que n=10.

```
datos <- "list(ybar=6, mu=2, sigma2=1, tau2=1, n=10)"
writeLines(datos, con = "datos.txt")

vinit <- "list(theta=0)"
writeLines(vinit, con = "vinit.txt")

modelData("datos.txt")
data loaded</pre>
```

A continuación se compila el modelo y se inicializa la cadena.

```
modelCompile() #compilación del modelo
model compiled
modelInits("vinit.txt") #Se da un valor inicial para el modelo o se puede usar modelGenInits() para valores generados
Initializing chain 1:
model is initialized
```

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado V

3 Ahora ejecutamos el modelo. Por ejemplo, consideramos un burn-in de 1,000 observaciones y generamos 10,000 datos adicionales. Necesitamos monitorear a θ :

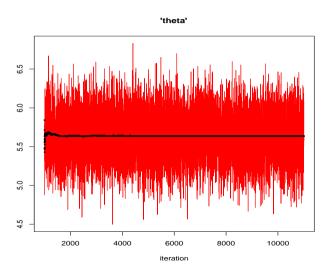
```
modelUpdates took 0 s
samplesSet("theta") #Define el monitor de la variable
monitor set for variable 'theta'
modelUpdate(10000) #Generamos n iteraciones
10000 updates took 0 s
samplesStats("theta") #podemos usar "*" o un vector con los nombres de las variables a monitorear entre comillas
mean sd MC_error val2.5pc median val97.5pc start sample
theta 5.635 0.3028 0.003174 5.046 5.638 6.228 1001 10000
```

samplesStats devuelve los valores de la muestra obtenida

Paso 5: Podemos ahora generar las gráficas del modelo

```
a <- samplesHistory("*",mfrow=c(1,1),ask = F)
points(1001:11000,cumsum(a$theta)/(i:length(a$theta)),pch=16,cex=0.5)
```

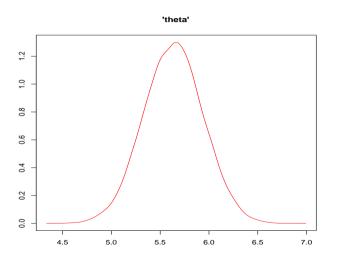
Ejemplo 3: Modelo normal conjugado VI



Ejemplo 3: Modelo normal conjugado VII

samplesDensity("theta",mfrow=c(1,1))

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado VIII



Ejemplo 3 con Modelo normal conjugado con R20penBUGS I

Ejecutamos el mismo ejemplo previo usando el paquete R2OpenBUGS. El modelo se escribe con la misma sintaxis que antes y está en el archivo Modelo.txt.

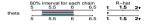
Este programa da una salida ligeramente diferente a la de OpenBUGS con información adicional.

Ejemplo 3 con Modelo normal conjugado con R20penBUGS II

```
library(R2OpenBUGS)
setwd("~/Dropbox/Academia/ITAM/SimS18-TI/bugs/modelo1/") #define el directorio de trabajo.
datos <- list(vbar=6, mu=2, sigma2=1, tau2=1, n=10) #define los valores de los datos
inits <- function(){list(theta = 0)} #se requiere función para tener inicializadas múltiples cadenas
mod.sim <- bugs(datos, inits, model.file = "Modelo.txt",
                               parameters = c("theta"), n.chains = 20,
                               n.burnin = 1000, n.iter = 5000)
print(mod.sim)
Inference for Bugs model at "Modelo.txt",
Current: 20 chains, each with 5000 iterations (first 1000 discarded)
Cumulative: n.sims = 80000 iterations saved
         mean sd 2.5% 25% 50% 75% 97.5% Rhat n.eff
         5.6 0.3 5.0 5.4 5.6 5.8 6.2 1 80000
theta
deviance 1.8 2.6 = 0.5 = 0.1 0.9 2.8 8.7
                                            1 80000
For each parameter, n.eff is a crude measure of effective sample size,
and Rhat is the potential scale reduction factor (at convergence, Rhat=1).
DIC info (using the rule, pD = Dbar-Dhat)
pD = 0.9 and DIC = 2.7
DIC is an estimate of expected predictive error (lower deviance is better).
plot(mod.sim)
```

Ejemplo 3 con Modelo normal conjugado con R20penBUGS III

Bugs model at "Modelo.txt", 20 chains, each with 5000 iterations (first 1000 discarded)



medians and 80% intervals





Explicación de los elementos de la salida de OpenBUGS I

- La interpretación de esta salida es muy similar a la que se obtendría en Stan también.
- En la salida de los resultados del modelo, se pueden ver los siguientes elementos para cada parámetro estimado:
 - mean es la media posterior estimada, calculada como el promedio de las salidas de la cadena.
 - sa es la desviación estándar de las observaciones, que conforme el tamaño de muestra tiende a infinito, se acerca a la desviación estándar posterior del parámetro.
 - 2.5%, 25%, 50%, 75%, 97.5% son cuantiles de la distribución posterior
 - Rhat corresponde al factor de reducción potencial de escala \hat{R} que se mencionó antes, que vale $\hat{R}=1$ cuando todas las cadenas se han mezclado
 - n.eff es el tamaño de muestra efectivo, que tiene una fórmula dada por:

$$\hat{n}_{eff} = \frac{mn}{1 + 2\sum_{i=1}^{T} \hat{\rho}_t}$$

 ho_t es la autocorrelación de la sucesión $\{X_n\}$ en el rezago t,n es el número de simulaciones de cada cadena y m es el número de cadenas simuladas, y T es el primer entero impar para el cual $\hat{
ho}_{T+1}+\hat{
ho}_{T+2}<0$. (ver detalles en Gelman, et.al BDA3, sección 11.5) Basta tomar como referencia que $\hat{n}_{eff}\geq 10m$ es un síntoma de que la cadena se ha mezclado adecuadamente.

Selección de Modelo I

- En la práctica, la selección estadística apropiada de un mejor modelo en una colección de modelos jerárquicos es problemática, debido a la ambigüedad del tamaño de esos modelos.
- Spiegelhater et al. (2002) sugiere una generalización del Criterio de Información de Akaike (AIC) que se basa en la distribución posterior de la estadística *devianza*:

$$D(\theta) = -2\log f(y|\theta) + 2\log h(y)$$

donde $f(y|\theta)$ es la verosimilitud de los datos observados, dado el parámetro θ y h(y) es alguna función estandarizada que sólo depende de los datos (y que no tiene importancia en la selección del modelo).

• En este enfoque, el ajuste de un modelo queda resumido por la esperanza posterior de la devianza, $\bar{D}=E_{\theta|y}[D]$, mientras que la complejidad del modelo se captura en el número efectivo de parametros p_D que hay en el modelo:

$$p_D = E_{\theta|y}[D] - D(E_{\theta|y}[\theta]) = \bar{D} - D(\bar{\theta})$$



Selección de Modelo II

• El Criterio de Información de la Devianza (DIC) se define como

$$DIC = \bar{D} + p_D = 2\bar{D} - D(\bar{\theta})$$

- Valores pequeños de DIC indican un modelo que ajusta mejor.
- Comparando modelos, los que tienen las máximas diferencias son los que tienen mayor cambio y mejoran más.

Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. I

- coda significa Convergence and diagnostics analysis for MCMC. El paquete coda, permite
 hacer análisis de salida y diagnósticos para MCMC. coda trata de responder a la pregunta: ¿ha
 tenido el sampler suficiente adaptación (burn-in) para justificar que la muestra proviene de la
 posterior de interés?
- Un paquete similar es boa que sirve para evaluar la convergencia de cadenas MCMC. boa surge de reescribir de las funciones y la interfase de CODA, que es la versión original del paquete de R coda. El orden es:

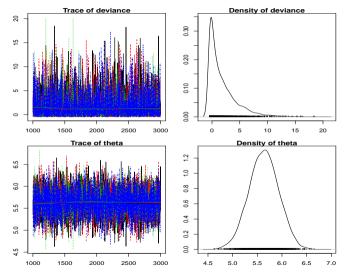
$$\mathtt{CODA} o \mathtt{boa} o \mathtt{coda}$$

• Usualmente tenemos que analizar las muestras *después* del periodo burn-in para detectar algún tipo de anomalía. El paquete coda ofrece algunas funciones de diagnóstico para para facilitar el análisis.

Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. II

• Podemos obtener la traza y las densidades de las variables de interés del modelo. Estas ya las obteníamos desde antes.

Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. III



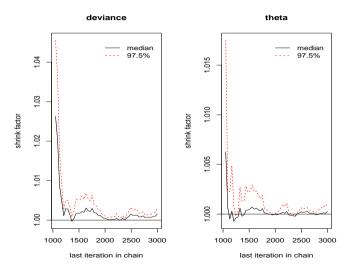
Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. IV

- ullet Otra herramienta de diagnóstico que ya mencionamos antes son los gráficos de Gelman, que grafican el valor de \hat{R} .
- La gráfica de Gelman mide si hay una diferencia significativa entre la varianza al interior de varias cadenas y la varianza entre las cadenas.
- gelman.diag devuelve el factor de reducción para cada parámetro. Un factor de 1 significa que la intravarianza y la intervarianza son iguales. Valores grandes denotan que hay diferencias notables entre las cadenas.

Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. V

```
gelman.diag(read.bugs(mod.sim2))
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Potential scale reduction factors:
         Point est. Upper C.I.
deviance
theta
Multivariate psrf
gelman.plot(read.bugs(mod.sim2))
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting theta ... 2000 valid values
```

Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. VI



Ejemplo: Modelo normal conjugado y coda. VII

De acuerdo al profesor Charles Geyer, de la Universidad de Minnesota, el periodo de burn-in es completamente innecesario

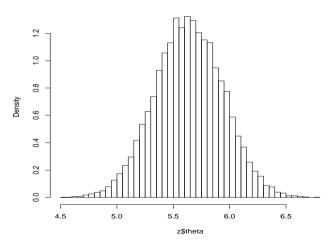
Ejemplo 3: Modelo normal conjugado con JAGS y rjags I

Para ejecutar el programa ahora usamos JAGS El archivo con el modelo siguie teniendo la misma especificación y está en Modelo.txt. Obviamente primero se requiere tener instalado JAGS en la computadora.

```
library(rjags)
Linked to JAGS 4.3.0
Loaded modules: basemod, bugs
setwd("~/Dropbox/Academia/ITAM/SimS18-II/bugs/modelo1/") #define el directorio de trabajo.
jags <- jags.model("Modelo.txt",</pre>
                   data = list(ybar=6, mu=2, sigma2=1, tau2=1, n=10), #define los valores de los datos
                   n.chains = 20.
                   n.adapt = 1000) # burn-in
Compiling model graph
   Resolving undeclared variables
   Allocating nodes
Graph information:
   Observed stochastic nodes: 1
   Unobserved stochastic nodes: 1
  Total graph size: 9
Initializing model
update(jags,1000)
z <- jags.samples(jags.c("theta"),1000)
hist(z$theta.breaks = 50.prob=T)
```

Ejemplo 3: Modelo normal conjugado con JAGS y rjags II





Ejemplo 3: Modelo normal conjugado con JAGS y rjags III

Información adicional y ejemplos se pueden encontrar en este tutorial.

Ejemplo 4: Simulación de transformación de variable aleatoria I

Problema: Si tenemos $Z \sim N(0,1)$ y transformamos a $Y = (2Z+1)^3$. Queremos obtener la distribución de Y, su media y P(Y>k) para alguna k, por ejemplo k=10. El problema es difícil de resolver de manera analítica pero es fácil de simular.

Ejemplo 4: Simulación de transformación de variable aleatoria II

```
Modelo2 <- "
model {
Z ~ dnorm(0,1) #Hay que considerar que en BUGS se lee la precisión, no la varianza
Y \leftarrow pow(2*Z+1.3)
P10 <- step(Y-10) #step es la indicadora de la condición > 0 Suponemos k=10
writeLines(Modelo2.con="Modelo2.txt")
modelCheck("Modelo2 txt")
model is syntactically correct
modelCompile()
model compiled
modelGenInits() #inicializa al azar
initial values generated, model initialized
modelUpdate(10000) #burn-in
10000 undates took 0 s
samplesSet(c("Y", "P10"))
monitor set for variable 'Y'
monitor set for variable 'P10'
modelUpdate(50000)
```

Simplificación de proceso I

Como pueden ver, varios pasos se repiten con frecuencia. Entonces, podemos tratar de escribir una función que haga todo el proceso sin tener que reescribirlo todo el tiempo.

```
run.model <- function(modelo, muestras, datos = list(), longcadena = 10000, burnin = 0.10.
vinit, nchains=1.thin=1) {
        writeLines(modelo, con="modelg.txt")
        modelCheck("modelg.txt")
                                   #Envía el modelo a BUGS, para verificar sintaxis
        if(length(datos)>0)
                                   #Si hav datos disponibles.
        modelData(bugsData(datos)) #BRugs los pone en un archivo y los envía a BUGS
        modelCompile(nchains)
                                     #BRuas compila el modelo
        if(missing(vinit)) {
                modelGenInits()
                                          #Inicializa la cadena al azar si no hav valores iniciales
        } else {
                for(chain in 1:nchains) modelInits(bugsInits(vinit))
        modelUpdate(longcadena*burnin) #porcentaje de las simulaciones a descartarse
        samplesSet(muestras)
        samplesSetThin(thin)
        modelUpdate(longcadena)
```

Entonces el ejercicio previo lo pudimos haber ejecutado de la siguiente manera:

Simplificación de proceso II

```
run.model(Modelo2, muestras=c("Y", "P10"),longcadena = 50000)

model is symiactically correct
model compiled
initial values generated, model initialized
5000 updates took 0 s
monitor set for variable 'Y'
monitor set for variable 'P10'
50000 updates took 0 s
```

Eiemplo 5: Estimación de número de reparaciones I

Problema: Tenemos 100 computadoras que requieren reparación. El costo unitario de reparación depende de las piezas que tenga descompuesta la computadora, y usualmente el costo es una variable aleatoria que se puede modelar como una gamma con media 100 y desviación estándar 50. Si tenemos un presupuesto de 10.000 para reparaciones, ¿cuántas reparaciones en promedio podemos hacer?

Recuerden que la distribución $\mathcal{G}(a,b)$ tiene media $\frac{a}{b}$ y varianza $\frac{a}{b^2}$ Entonces la costo en el ejercicio tiene distribución $\mathcal{G}(4, 0.04)$.

Para simular el ejercicio, generamos 100 datos de costos con la distribución dada. Entonces obtenemos una muestra Y_1, \ldots, Y_{100} donde Y_i es el costo de reparar la computadora i. El problema consiste en estimar M tal que $\sum_{i=1}^{M} Y_i <= 10,000$ Como podemos ver M es aleatorio completamente.

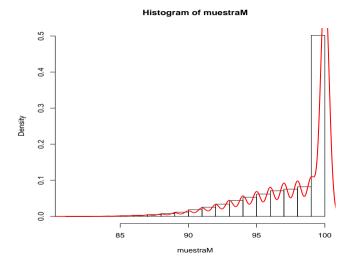
Ejemplo 5: Estimación de número de reparaciones II

```
modelo3 <- "
model {
for(i in 1:100) {Y[i] ~ dgamma(4,0.04)}
sumacosto[1] <- Y[1]
for(i in 2:100) {sumacosto[i] <- sumacosto[i-1] + Y[i]}</pre>
for(i in 1:100) {cum.step[i] <- i * step(10000 - sumacosto[i]) } #1,2,...,M,0,...
M <- ranked(cum.step[],100)
30
run.model(modelo3, muestras=c("M", "sumacosto[100]"),longcadena = 50000)
model is syntactically correct
model compiled
initial values generated, model initialized
5000 undates took 0 s
monitor set for variable 'M'
monitor set for variable 'sumacosto[100]'
50000 updates took 7 s
```

Para ver los resultados

Ejemplo 5: Estimación de número de reparaciones III

Ejemplo 5: Estimación de número de reparaciones IV



Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal I

En el siguiente modelo será $au=rac{1}{\sigma^2}$. Se supone que la precisión tiene una distribución inicial de la forma gamma (ϵ,ϵ) , en la parametrización de la Gamma en BUGS, tiene media $rac{\epsilon}{\epsilon}=1$ y varianza $rac{\epsilon}{\epsilon^2}=rac{1}{\epsilon}=10$.

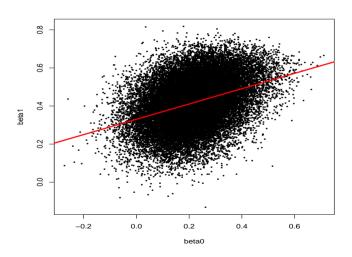
```
modelo4 <- "
model {
for (i in 1:n) {
logx[i] \leftarrow log(x[i])
v[i] ~ dnorm(mu[i], tau)
mu[i] <- beta0 + beta1*logx[i]
# priors para los parámetros de regresión
beta0 ~ dnorm(0,100)
beta1 ~ dnorm(0,100)
# prior para la precisión del parámetro
tau ~ dgamma(0.1,0.1)
sigma <- 1/sqrt(tau)
run.model(modelo4, muestras=c("beta0","beta1","sigma"),
              datos = list(x = c(1.0, 1.5, 1.5, 1.5, 2.5, 4.0, 5.0, 5.0, 7.0,
                                                         8.0, 8.5, 9.0, 9.5, 9.5, 10.0, 12.0, 12.0, 13.0,
                                                         13.0, 14.5, 15.5, 15.5, 16.5, 17.0, 22.5, 29.0,31.5),
                                           v = c(1.80, 1.85, 1.87, 1.77, 2.02, 2.27, 2.15, 2.26, 2.47,
                                                         2.19, 2.26, 2.40, 2.39, 2.41, 2.50, 2.32, 2.32, 2.43,
                                                         2.47, 2.56, 2.65, 2.47, 2.64, 2.56, 2.70, 2.72, 2.57),
                                           n = 27).
                                   longcadena = 30000,burnin = 0.20)
model is syntactically correct
data loaded
model compiled
initial values generated, model initialized
6000 undates took 0 s
monitor set for variable 'beta0'
monitor set for variable 'beta1'
```

monitor set for variable 'siama'

Modelo de Regresión Lineal I

Después de obtener las iteraciones analizamos los resultados. Noten en la gráfica conjunta de (β_0, β_1) la fuerte correlación que hay entre los dos parámetros La correlación se puede eliminar si la variable x se centra alrededor de su propia media.

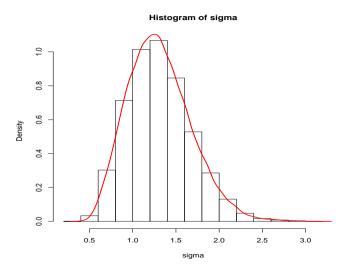
Modelo de Regresión Lineal II



Modelo de Regresión Lineal III

```
hist(sigma, probability = T)
lines(density(sigma),col="red",lwd=2)
```

Modelo de Regresión Lineal IV



Modelo de Regresión Lineal V

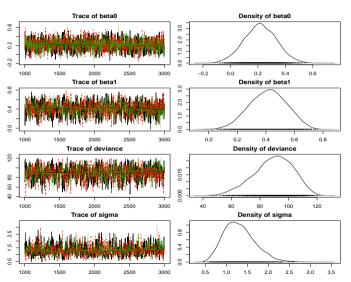
Versión con OpenBUGS para incluir análisis de coda

Modelo de Regresión Lineal VI

```
par(mar=c(2,2,2,1))
plot(read.bugs(mod.sim1))

Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
```

Modelo de Regresión Lineal VII



Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal I

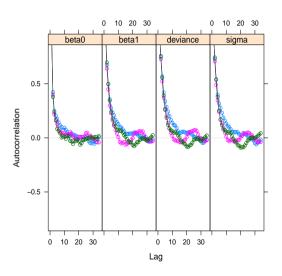
```
gelman.diag(read.bugs(mod.sim1))
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Potential scale reduction factors:
         Point est. Upper C.I.
hetaO
                          1 00
                         1 02
heta1
deviance
                         1.01
sigma
Multivariate psrf
```

Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal II

```
acfplot(read.bugs(mod.sim1))

Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting jegma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting aigma ... 2000 valid values
Abstracting jegma ... 2000 valid values
Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting jegma ... 2000 valid values
```

Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal III



Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal IV

```
par(mar = c(3,3,1,1))
gelman.plot(read.bugs(mod.sim1))

Abstracting beta0 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting digma ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting beta1 ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting deviance ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
Abstracting sigma ... 2000 valid values
```

Ejemplo 6: Modelo de Regresión Lineal V

