ECN 6338 Cours 9

La génération de variables aléatoires multivariées

William McCausland

2022-03-17

L'exercice Monte Carlo

Situations où l'intégration par Monte Carlo est convenable :

- Les problèmes de haute dimension (> 20)
- Les problèmes où on veut calculer plusieurs intégrales de la forme

$$E_p[g_i(\theta)] = \int_D p(\theta) g_i(\theta)\, d\theta, \quad i = 1, \ldots, J,$$

- Souvent, p est la densité *a posteriori* $p(\theta|y)$ pour un modèle bayésien, où θ est un vecteur de paramètres et y est un échantillon.

L'exercise Monte Carlo est de générer un échantillon $\theta^{(m)}$, $m = 1, \ldots, M$ tel que

$$\sum_{m=1}^{M} g(\theta^{(m)}) \xrightarrow{p} \int p(\theta) g(\theta)\, d\theta$$

quand l'espérance à droite est finie.

Monte Carlo avec chaînes markoviennes (MCMC)

- Le simple fait qu'on peut écrire la densité cible $p(\theta|y)$ sur Θ ne veux pas dire qu'il est facile de tirer un échantillon iid de la loi cible $\theta|y$.
- En fait, les tirages iid sont infaisables pour tous les modèles sauf les plus simples.
- En pratique, on se contente de simuler une chaîne markovienne dont la loi cible est la loi stationnaire de la chaîne :
  - Une chaîne markovienne sur Θ a une loi de transition $\theta^{(m+1)}|\theta^{(m)}$.
  - La loi cible est une loi stationnaire de la chaîne si $\theta^{(m+1)}$ suit la loi cible quand $\theta^{(m)}$ la suit.
  - Quand la loi cible est une loi stationnaire, on peut dire que la transition markovienne *préserve* la loi cible.
  - Si la chaîne est ergodique, la loi stationnaire est unique et il y a une loi de grands nombres et un théorème central limite qui s'appliquent.

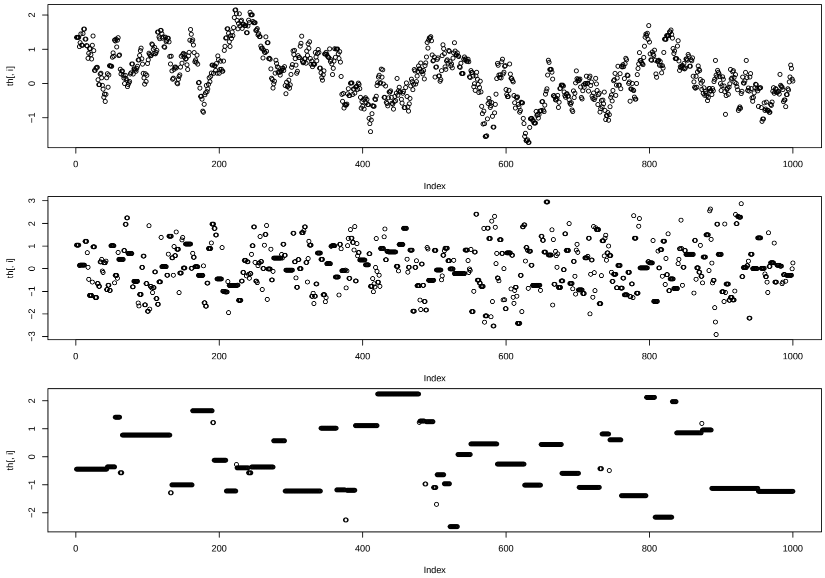
Mise à jour du type marche aléatoire de Metropolis

- Supposons que la loi cible $\theta|y$ ait un noyau de densité $k(\theta) \propto p(\theta|y)$.
- La loi cible est l'unique loi invariante de la transition de Markov suivante, de $\theta^{(m)}$ à $\theta^{(m+1)}$:
  1. Tirer $\theta^* \sim N(\theta^{(m)}, \Sigma)$.
  2. Tirer U de la loi uniform sur $[0, 1]$.
  3. Si $U \leq \frac{k(\theta^*)}{k(\theta^{(m)})}$ fixe $\theta^{(m+1)} = \theta^*$, sinon fixe $\theta^{(m+1)} = \theta^{(m)}$.
- La loi normale de l'étape 1 peut être remplacée par n'importe quelle loi symétrique autour de zéro.
- Elle peut être remplacé par une loi asymétrique, avec une modification appropriée du seuil à l'étape 3. (Mise à jour Metropolis-Hastings)
- Notez que le *ratio de Hastings* $k(\theta^*)/k(\theta^{(m)})$ égale à $p(\theta^*|y)/p(\theta^{(m)}|y)$ pour la densité cible normalisée $p(\theta|y)$.

Random walk Metropolis (N(0,1) target, $\sqrt{\Sigma} = 0.1, 1, 10$)

```
set.seed(1234567890)
M = 1000
sigma = c(0.1, 1.0, 10.0) * 2.4 # 2.4 optimal dans le cas u
th = array(0, dim=c(M, 3))
for (i in 1:3) {
  th[1, i] = rnorm(1); pth = dnorm(th[1, i])
  for (m in 2:M) {
    thst = th[m-1, i] + rnorm(1, 0, sigma[i])
    pthst = dnorm(thst)
    if (runif(1, 0, 1) < pthst/pth) {
      th[m, i] = thst; pth <- pthst
    }
    else
      th[m, i] = th[m-1, i]
    end
  }
}
```

Graphiques, $\Sigma = 0.24, 2.4, 24$



Un modèle à deux paramètres

Nous avons le modèle suivant : pour $i = 1, \ldots, n$,

$$y_i = \mu + e_i \quad e_i \sim \mathrm{iid}\, N(0, h^{-1}).$$

La densité des données :

$$p(y_1, \ldots, y_n | \mu, h) = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^{n/2} \exp\left[-\frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_t - \mu)^2\right].$$

Une loi *a priori* pour le modèle à deux paramètres

Nous complétons le modèle avec la loi *a priori* où μ and h sont indépendants et

$$\mu \sim N(\bar{\mu}, \bar{\omega}^{-1}), \quad \bar{s}^2 h \sim \chi^2(\bar{\nu}).$$

Ainsi

$$p(\mu, h) = p(\mu) p(h),$$

où

$$p(\mu) = \left(\frac{\bar{\omega}}{2\pi} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \bar{\omega} (\mu - \bar{\mu})^2 \right],$$

$$p(h) = [2^{\bar{\nu}/2} \Gamma(\bar{\nu}/2)]^{-1} (\bar{s}^2)^{\bar{\nu}/2} h^{(\bar{\nu}-2)/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \bar{s}^2 h \right].$$

La loi *a posteriori* pour le modèle gaussien simple

La densité conjointe de μ, h et y :

$$
\begin{aligned}
p(\mu, h, y) &= p(\mu)p(h)p(y|\mu, h) \\
&= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{n/2} \left(\frac{\bar{\omega}}{2\pi}\right)^{1/2} [2^{\bar{\nu}/2}\Gamma(\bar{\nu}/2)]^{-1}(\bar{s}^2)^{\bar{\nu}/2} \\
&\cdot h^{(\bar{\nu}+n-2)/2} \exp\left\{-\frac{\bar{\omega}}{2}(\mu-\bar{\mu})^2 - \frac{h}{2}\left[\bar{s}^2 + \sum_{t=1}^{n}(y_t-\mu)^2\right]\right\}
\end{aligned}
$$

La densité *a posteriori* est proportionnelle à la densité conjointe :

$$
p(\mu, h|y) = \frac{p(\mu, h, y)}{p(y)} \propto p(\mu, h, y).
$$

Ainsi

$$
p(\mu, h|y) \propto h^{(\bar{\nu}+n-2)/2} \exp\left\{-\frac{\bar{\omega}}{2}(\mu-\bar{\mu})^2 - \frac{h}{2}\left[\bar{s}^2 + \sum_{t=1}^{n}(y_t-\mu)^2\right]\right\}.
$$

Données artificielles pour le modèle à deux paramètres

```r
# Vraies valeurs des paramètres
vrai_mu <- 6
vrai_h <- 0.04
vrai_sigma <- 1/sqrt(vrai_h)

# Données artificielles, statistiques exhaustives
set.seed(123456789)
n <- 10
y <- rnorm(n, vrai_mu, vrai_sigma)
y_bar <- mean(y)
y2_bar <- mean(y^2)

# Hyperparamètres
nu_bar <- 4
s2_bar <- 0.01
mu_bar <- 10
omega_bar <- 0.01
```

Fonctions de log densité

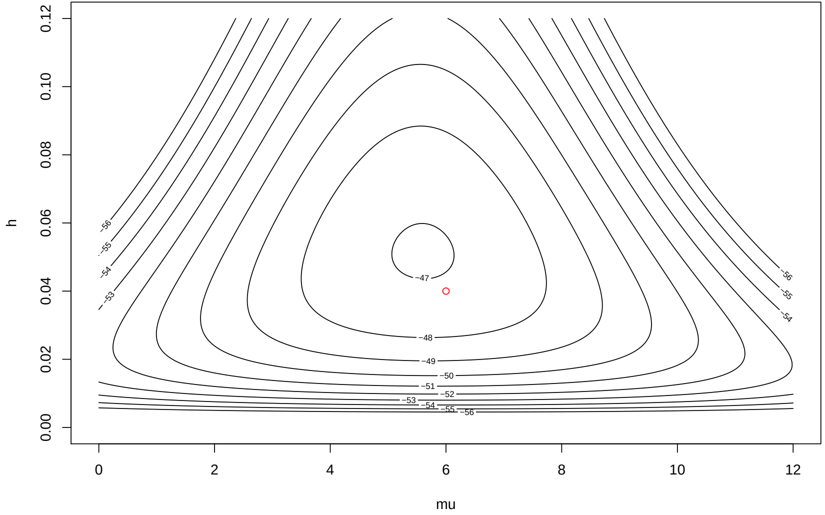
```
# Log densité des données
lnp_y__mu_h = function(mu,h) {
  lnp <- (n/2)*(log(h) - log(2*pi)) -
      0.5*h*n*(y2_bar - 2*y_bar*mu + mu^2)
}

# Log densités a priori de (mu, h)
lnp_mu <- function(mu, mu_bar=10, omega_bar=0.01) {
  lnp <- dnorm(mu, mu_bar, 1/sqrt(omega_bar), log=T)
}
lnp_h <- function(h, nu_bar=4, s2_bar=0.01) {
  lnp <- log(s2_bar) + dchisq(h*s2_bar, nu_bar, log=T)
}

# Log densité a posteriori de (mu, h)|y, pas normalisée
lnp_mu_h__y <- function(mu, h) {
  lnp <- lnp_mu(mu) + lnp_h(h) + lnp_y__mu_h(mu, h)
}
```

La densité a posteriori, code pour un graphique

```
# Faire la graphique de la log densité a posteriori,
# comme fonction de (mu, h)
lnp_post <- function() {
    mu <- seq(0, 12, by=0.01)
    h <- seq(0, 0.12, by=0.0001)
    lnp <- outer(mu, h, FUN=lnp_mu_h__y)
    contour(mu, h, lnp, xlab='mu', ylab='h',
        levels=seq(-56, -46))
    points(vrai_mu, vrai_h, col='red')
}
```

La densité a posteriori, graphique

```
lnp_post()
```

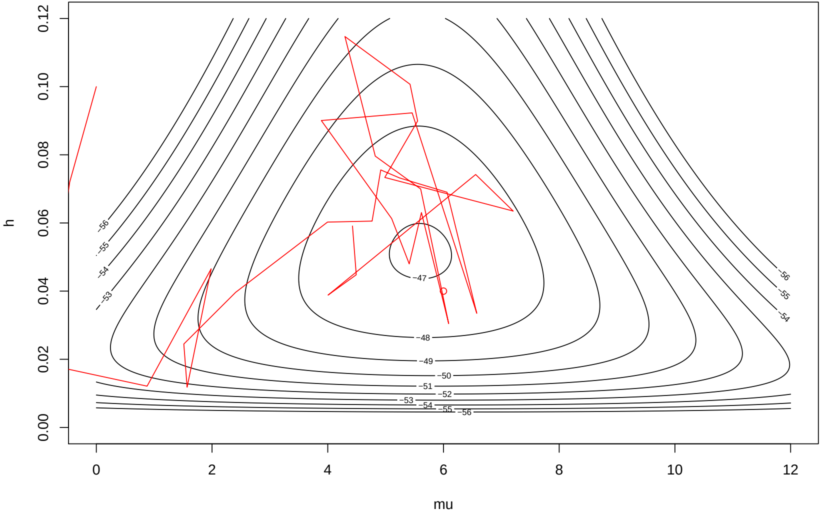


Code Metropolis pour le modèle à deux paramètres

```
Metro.sim = function(M) {
  mu <- vector('numeric',M); mu[1] <- 0
  h <- vector('numeric',M); h[1] <- 0.1
  p <- ((nu_bar+n-2)/2)*log(h[1]) -
    (omega_bar/2)*(mu[1]-mu_bar)^2 -
    (h[1]/2)*(s2_bar+n*(y2_bar-2*mu[1]*y_bar+mu[1]^2))
  for (m in seq(2, M)) {
    h_et <- rnorm(1, h[m-1], 0.05)
    mu_et <- rnorm(1, mu[m-1], 2.0)
    p_et <- ((nu_bar+n-2)/2)*log(h_et) -
      (omega_bar/2)*(mu_et-mu_bar)^2 -
      (h_et/2)*(s2_bar + n*(y2_bar-2*mu_et*y_bar+mu_et^2))
    if (runif(1) < exp(p_et - p) && (h_et > 0.0)) {
      h[m] <- h_et; mu[m] <- mu_et; p <- p_et
    }
    else { h[m] <- h[m-1]; mu[m] <- mu[m-1] }
  }
  list(mu=mu, h=h)
}
```

Trajet Metropolis

```
lnp_post(); set.seed(123); sim <- Metro.sim(100); lines(sim
```



Échantillonage de Gibbs

- Décomposer le vecteur θ en blocs : $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_J)$
- L'idée de base : une mise à jour de θ_i à θ_i' qui préserve la distribution conditionnelle $\theta_i | \theta_{-i}, y$ préserve la distribution $\theta | y$.
- Exemples :
  - Tirage directe de θ_i de la distribution $\theta_i | \theta_{-i}, y$,
  - marche aléaoire Metropolis pour la loi cible $\theta_i | \theta_{-i}, y$.
- Un balayage (sweep) qui préserve la loi cible $\theta | y$:
  - Tirer $\theta_1^{(m+1)}$ de la loi $\theta_1 | \theta_2^{(m)}, \ldots, \theta_J^{(m)}, y$
  - Tirer $\theta_2^{(m+1)}$ de la loi $\theta_2 | \theta_1^{(m+1)}, \theta_3^{(m)}, \ldots, \theta_J^{(m)}, y$
  - $\vdots$
  - Tirer $\theta_J^{(m+1)}$ de la loi $\theta_J | \theta_1^{(m+1)}, \ldots, \theta_{J-1}^{(m+1)}, y$

Échantillonage de Gibbs pour modèle à deux paramètres

Si on connaissait h, tirer μ de la loi $\mu|h,y$ serait simple :

$$
\begin{aligned}
p(\mu|h,y) &\propto \exp\left[-\frac{\bar{\omega}}{2}(\mu-\bar{\mu})^2 - \frac{h}{2}\sum_{t=1}^{n}(y_t-\mu)^2\right] \\
&= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\bar{\omega}(\mu^2-2\mu\bar{\mu}+\bar{\mu}^2) + h(n\bar{y}^{(2)} - 2\mu n\bar{y} + n\mu^2)\right]\right\}
\end{aligned}
$$

où $\bar{y}^{(2)} = n^{-1}\sum_{t=1}^{n} y_t^2$ et $\bar{y} = n^{-1}\sum_{t=1}^{n} y_t$. Alors

$$
\begin{aligned}
p(\mu|h,y) &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[(\bar{\omega}+hn)\mu^2 - 2(\bar{\omega}\bar{\mu}+hn\bar{y})\mu\right]\right\} \\
&\propto \exp\left[-\frac{1}{2}(\bar{\omega}+hn)\left(\mu - \frac{\bar{\omega}\bar{\mu}+hn\bar{y}}{\bar{\omega}+hn}\right)^2\right].
\end{aligned}
$$

Alors $\mu|h,y \sim N(\bar{\bar{\mu}}, \bar{\bar{\omega}}^{-1})$, où $\bar{\bar{\omega}} = \bar{\omega} + hn$ et

$$
\bar{\bar{\mu}} = \frac{\bar{\omega}}{\bar{\omega}+hn}\bar{\mu} + \frac{hn}{\bar{\omega}+hn}\bar{y} = \bar{\bar{\omega}}^{-1}(\bar{\omega}\bar{\mu}+hn\bar{y}).
$$

Échantillonage de Gibbs, tirage de h

Si on connaissait μ, tirer h de $h|\mu, y$ serait simple :

$$p(h|\mu, y) \propto h^{(\bar{\nu}+n-2)/2} \exp\left\{-\frac{h}{2}\left[\bar{s}^2 + \sum_{t=1}^{n}(y_t - \mu)^2\right]\right\}.$$

Rapellons que $\bar{s}^2 h \sim \chi^2(\bar{\nu})$ et

$$p(h) = [2^{\bar{\nu}/2}\Gamma(\bar{\nu}/2)]^{-1}(\bar{s}^2)^{\bar{\nu}/2} h^{(\bar{\nu}-2)/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\bar{s}^2 h\right].$$

Alors

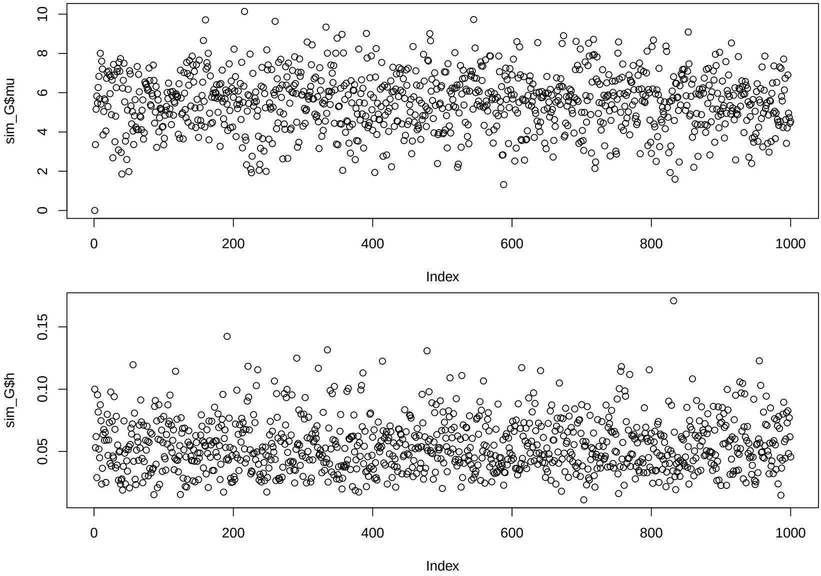
$$\bar{\bar{s}}^2 h|\mu, y \sim \chi^2(\bar{\bar{\nu}}),$$

où $\bar{\bar{s}}^2 = \bar{s}^2 + \sum_{t=1}^{n}(y_t - \mu)^2$ et $\bar{\bar{\nu}} = \bar{\nu} + n$.

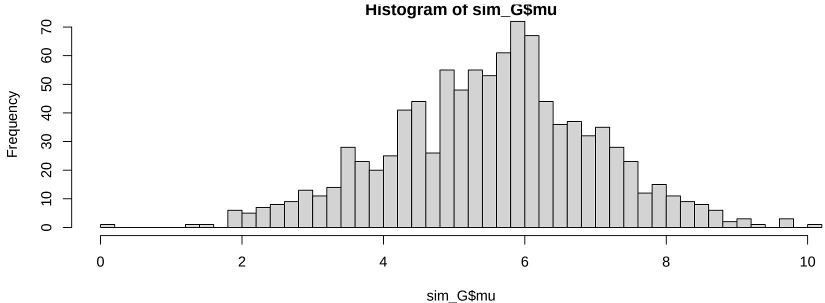
Échantillonage de Gibbs, code

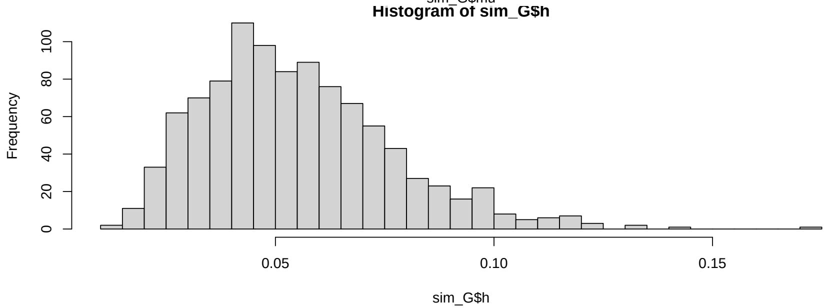
```
Gibbs.sim <- function(M) {
  # Stockage, valeurs initiales
  mu <- vector('numeric', M); mu[1] <- 0
  h <- vector('numeric', M); h[1] <- 0.1

  nu_bar.bar <- nu_bar + n; y.bar = mean(y)
  for (m in seq(2,M)) {
    s2_bar.bar <- s2_bar + sum((y-mu[m-1])^2)
    h[m] <- rchisq(1, nu_bar.bar) / s2_bar.bar

    omega_bar.bar <- omega_bar + h[m]*n
    mu_bar.bar <- (omega_bar*mu_bar+h[m]*n*y.bar)/
                    omega_bar.bar
    mu[m] <- rnorm(1, mu_bar.bar,
                        1/sqrt(omega_bar.bar))
  }
  list(mu=mu, h=h)
}
```

Résultats, trace



Résultats, histograms





Résultats, écarts-types numériques pour μ

```
library(mcmcse)
mcse(sim_G$mu)
```

```
## $est
## [1] 5.535818
##
## $se
## [1] 0.04966814
```

```
sd(sim_G$mu)
```

```
## [1] 1.458128
```

Résultats, écarts-types numériques pour h

```
library(mcmcse)
mcse(sim_G$h)
```

```
## $est
## [1] 0.05507961
##
## $se
## [1] 0.0006833799
```

```
sd(sim_G$h)
```

```
## [1] 0.02161037
```

Augmentation des données

- La densité *a posteriori* non-normalisé pour le modèle Probit :

$$f(\beta|y) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}(\beta-\bar{\beta})^\top \bar{H}(\beta-\bar{\beta})\right] \prod_{i=1}^{n} \Phi(x_i\beta)^{y_i}(1-\Phi(x_i\beta))^{1-y_i}.$$

- Un modèle d'utilité aléatoire où pour chaque femme i :
  - y_i^* est la différence d'utilité entre participer dans la population active et ne pas participer.
  - Sachant x_i et β, $y_i^* = x_i\beta - u$ où $u_i \sim N(0,1)$.
  - $y_i = 1$ si $y_i^* \geq 0$.
- Notez que

$$\begin{aligned}
\Pr[y_i = 1|x_i,\beta] &= \Pr[y_i^* \geq 0|x_i,\beta] \\
&= \Pr[x_i\beta - u_i \geq 0|x_i,\beta] \\
&= \Pr[u_i \leq x_i\beta|x_i,\beta] \\
&= \Phi(x_i\beta).
\end{aligned}$$

Augmentation des données

- Densité *a posteriori* non-normalisée pour le modèle augmenté :

$$
\begin{aligned}
f(\beta, y^*|y) \propto \exp & \left[-\tfrac{1}{2}(\beta-\bar{\beta})^\top \bar{H}(\beta-\bar{\beta})\right] \\
& \cdot \exp\left[-\tfrac{1}{2}(y^*-X\beta)^\top (y^*-X\beta)\right] \\
& \cdot \prod_{i=1}^{n} [y_i 1_{[0,\infty)}(y_i^*) + (1-y_i) 1_{(-\infty,0)}(y_i^*)]
\end{aligned}
$$

- Maintenant on va dériver les lois conditionnelles *a posteriori*
  - $f(y_i^*|y_{-i}^*, \beta, y) \propto f(\beta, y^*|y)$, $i = 1, \ldots, n$.
  - $f(\beta|y^*, y) \propto f(\beta, y^*|y)$

Densité conditionnelle *a posteriori* de y_i^*

- Densité conditionnelle *a posteriori* :

$$f(y_i^* | y_{-i}^*, \beta, y) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}(y_i^* - x_i\beta)^2\right] \cdot [y_i 1_{[0,\infty)}(y_i^*) + (1 - y_i) 1_{(-\infty,0)}(y_i^*)]$$

- La loi conditionnelle *a posteriori* est $N(x_i\beta, 1)$ tronquée à
  - $[0, \infty)$ si $y_i = 1$,
  - $(-\infty, 0)$ si $y_i = 0$.

Densité conditionnelle *a posteriori* de β

- Densité conditionnelle *a posteriori* :

$$f(\beta|y^*, y) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[(\beta-\bar{\beta})^\top \bar{H}(\beta-\bar{\beta}) + (y^*-X\beta)^\top(y^*-X\beta)\right]\right.$$

- L'expression $[\cdot]$ entre crochets est quadratique en β, et

$$\begin{aligned}
(\beta-\bar{\beta})^\top \bar{H}(\beta-\bar{\beta}) &+ (y^*-X\beta)^\top(y^*-X\beta) \\
&= \beta^\top(\bar{H}+X^\top X)\beta^\top \\
&- \beta^\top(\bar{H}\bar{\beta}+X^\top y^*) \\
&- (\bar{\beta}^\top \bar{H} + (y^*)^\top X)\beta \\
&+ \bar{\beta}^\top \bar{H}\bar{\beta} + (y^*)^\top y^*
\end{aligned}$$

- Comme $ax^2+bx+c = a(x-h)^2+k$, pour $h=-b/2a$ et $k=c-b^2/4a$ par la complétion du carré, on peut exprimer la forme quadratique $[\cdot]$ dans la forme $(\beta-\bar{\bar{\beta}})^\top \bar{\bar{H}}(\beta-\bar{\bar{\beta}})+k$.

Densité conditionnelle *a posteriori* de β

- On obtient
$$\bar{\bar{H}} = \bar{H} + X^\top X$$
$$\bar{\bar{\beta}} = \bar{\bar{H}}^{-1}(\bar{H}\bar{\beta} + X^\top y^*) = \bar{\bar{H}}^{-1}(\bar{H}\bar{\beta} + X^\top X b),$$
où $b = (X^\top X)^{-1} X^\top y^*$.
- Puisque
$$f(\beta|y^*, y) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}(\beta - \bar{\bar{\beta}})^\top \bar{\bar{H}}(\beta - \bar{\bar{\beta}})\right]$$
$$\beta|y^*, y \sim N(\bar{\bar{\beta}}, \bar{\bar{H}}^{-1}).$$

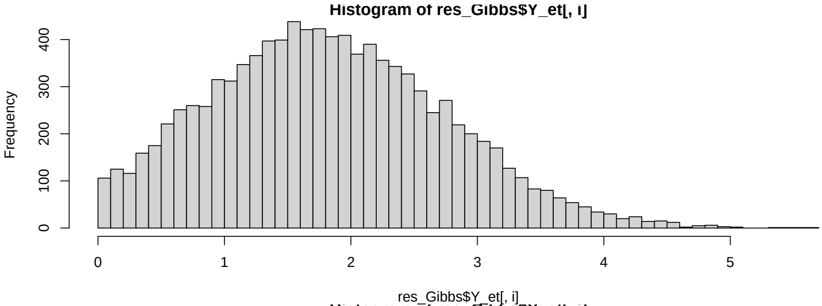
Quatre femmes

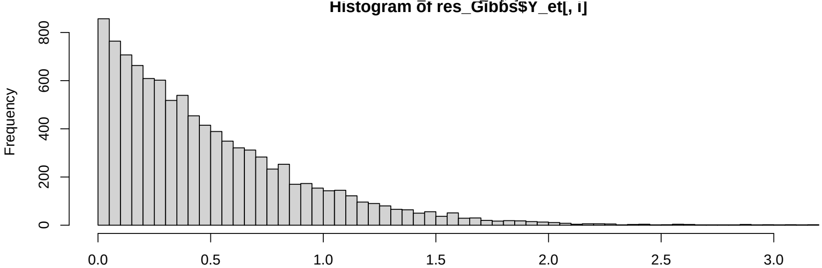
```
source('pop_active.R')
X_tbl[c(26, 119, 502, 715),]
```

```
##      nwifeinc educ exper expersq age kidslt6 kidsge6 cons
## 26   27.34999   17    21     441  43       0       2
## 119  91.00000   17     1       1  38       1       3
## 502  24.00000   16     8      64  33       0       0
## 715  51.20000   15     5      25  31       3       0
```

Deux femmes qui sont dans la population active

```r
par(mfrow = c(2, 1), mar = c(4, 4, 0.5, 0.5))
for (i in c(26, 119)) {hist(res_Gibbs$Y_et[, i], 50)}
```





Deux femmes qui ne sont pas dans la population active

```r
par(mfrow = c(2, 1), mar = c(4, 4, 0.5, 0.5))
for (i in c(502, 715)) {hist(res_Gibbs$Y_et[, i], 50)}
```