ECN 6338 Cours 9

La génération de variables aléatoires multivariées

William McCausland

2025-03-16

Survol du cours 9

- L'idée de l'exercice Monte Carlo, Monte Carlo avec chaînes markoviennes (MCMC)
- 2. MCMC avec le marche aléatoire de Metropolis
- 3. Un modèle à deux paramètres
- 4. Marche aléatoire pour le modèle à deux paramètres
- 5. Échantillonage de Gibbs
- Exemple probit, participation des femmes dans la population active
- 7. Augmentation des données (data augmentation)

L'exercice Monte Carlo

Situations où l'intégration par Monte Carlo est convenable :

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

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

où $p(\theta)$ est une densité commune, la densité cible. Souvent, p est la densité a posteriori $p(\theta|y)$ d'une analyse bayésienne, θ est un vecteur de paramètres d'un modèle et y est un échantillon.

L'exercice Monte Carlo est de tirer $\theta^{(m)}$, $m=1,\ldots,M$, tel que pour chaque $g(\theta)$ où l'espérance à droite est finie,

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

et un théorème central limite s'applique.

Monte Carlo avec chaînes markoviennes (MCMC)

- Le simple fait qu'on peut écrire la densité cible $p(\theta|y)$ ne veux pas dire qu'il est facile de tirer un échantillon iid de $\theta|y$.
- ► 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 avec densité $p(\theta|y)$ est une loi stationnaire de la chaîne si

$$\theta^{(m)} \sim p(\theta|y) \Rightarrow \theta^{(m+1)} \sim p(\theta|y).$$

- 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 $k(\theta) \propto p(\theta|y)$. Par exemple, $k(\theta) \equiv p(\theta)p(y|\theta) = p(\theta|y)p(y)$
 - La loi cible $\theta|y$ est l'unique loi invariante de la transition de Markov suivante, de $\theta^{(m)}$ à $\theta^{(m+1)}$, où Σ est n'importe quelle matrice définie positive :
 - 1. Tirer $\theta^* \sim N(\theta^{(m)}, \Sigma)$
 - Tirer *U* de la loi uniform sur [0, 1].
 Si *U* ≤ k(θ*)/k(d(m)) fixe θ(m+1) = θ*, sinon fixe θ(m+1) = θ(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 $p(\theta|y)$.

```
Metropolis, N(0,1) target, \sqrt{\Sigma} = 0.24, 2.4, 24
   set.seed(1234567890)
   M = 1000
   sigma = c(0.1, 1.0, 10.0) * 2.4 # 2.4 optimal dans le cas
   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) {
```

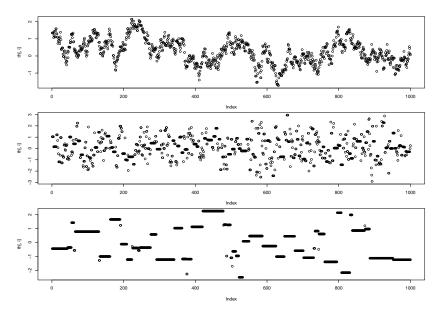
th[m, i] = thst; pth <- pthst

th[m, i] = th[m-1, i]

else

end

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



L'écart-type et l'efficacité numérique de la moyenne

- ▶ Il y a un théorème central limite pour $M^{-1} \sum_{m=1}^{M} g(\theta^{(m)})$.
- Le paquet mcmcse calcule l'écart-type de cette moyenne.
- L'efficacité numérique relative donne le nombre de tirages iid qui équivaut à chaque tirage MCMC.
- ▶ Voici les calcules pour $M^{-1} \sum_{m=1}^{M} \theta^{(m)}$ (pour $g(\theta) = \theta$)

Résultats

tbl <- tibble(sigma=sigma, mn=mn, sd=sd, nse=nse, rne=rne)
kable(tbl)</pre>

sigma	mn	sd	nse	rne
0.24	0.2591129	0.7128065	0.1804449	0.0156046
2.40	0.0870327	0.9832893	0.0647938	0.2303010
24.00	-0.0946788	1.1585067	0.2616325	0.0196071

Un modèle à deux paramètres

Nous avons le modèle suivant : pour i = 1, ..., n,

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

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

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

οù

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

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

La loi a posteriori pour le modèle gaussien simple

La densité conjointe de μ , h et y:

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

La densité a posteriori est proportionnelle à la densité conjointe :

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

Ainsi

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

Données artificielles pour le modèle à deux paramètres

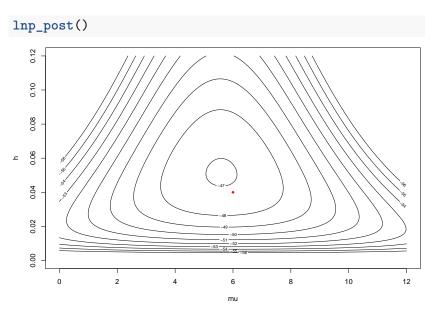
```
# Vraies valeurs des paramètres
vrai mu <- 6
vrai h <- 0.04
vrai sigma <- 1/sqrt(vrai h)</pre>
# Données artificielles, statistiques exhaustives
set.seed(123456789)
n < -10
v <- rnorm(n, vrai_mu, vrai_sigma)</pre>
y_bar <- mean(y)</pre>
y2 bar \leftarrow mean(y^2)
# Hyper-paramètres
nu bar <- 4
s2 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 \leftarrow (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) {</pre>
     lnp <- dnorm(mu, mu bar, 1/sqrt(omega bar), log=T)</pre>
   lnp_h <- function(h, nu_bar=4, s2_bar=0.01) {</pre>
     lnp <- log(s2_bar) + dchisq(h*s2_bar, nu_bar, log=T)</pre>
   # Log densité a posteriori de (mu, h)/y, pas normalisée
   lnp_mu_h_y <- function(mu, h) {</pre>
     lnp \leftarrow 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() {</pre>
    mu \leftarrow seq(0, 12, by=0.01)
    h \leftarrow seq(0, 0.12, by=0.0001)
    lnp <- outer(mu, h, FUN=lnp mu h y)</pre>
    contour(mu, h, lnp, xlab='mu', ylab='h',
        levels=seq(-56, -46)
    points(vrai mu, vrai h, col='red', pch=18)
```

La densité a posteriori, graphique



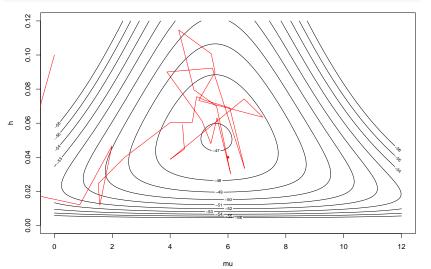
```
Code Metropolis pour le modèle à deux paramètres
   Metro.sim = function(M) {
     mu <- vector('numeric',M); mu[1] <- 0</pre>
     h <- vector('numeric', M); h[1] <- 0.1
     p \leftarrow ((nu bar+n-2)/2)*log(h[1]) -
        (omega bar/2)*(mu[1]-mu bar)^2 -
        (h[1]/2)*(s2 bar+n*(y2 bar-2*mu[1]*y bar+mu[1]^2))
     for (m in seq(2, M)) {
       h_{et} \leftarrow rnorm(1, h[m-1], 0.05)
       mu et \leftarrow 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(sin</pre>



Échantillonage de Gibbs

- ▶ Décomposer le vecteur θ en blocs : $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_J)$
- 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 $\theta_i | \theta_{-i}, y$,
 - ightharpoonup marche aléaoire Metropolis pour la loi cible $\theta_i|\theta_{-i},y$.
- Un balayage (sweep) qui préserve la loi cible $\theta|y$:
 - ightharpoonup 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 $\theta_2|\theta_1^{(m+1)},\theta_3^{(m)},\ldots,\theta_J^{(m)},y$

 - lacksquare Tirer $heta_J^{(m+1)}$ de la loi $heta_J| heta_1^{(m+1)},\dots, heta_{J-1}^{(m+1)},y$
- On répète le balayage M fois pour obtenir un échantillon $\theta^{(m)}$, $m=1,\ldots,M$.
- "Diviser pour vaincre", si l'ensemble d'étapes est plus facile que le problème entier.

Échantillonage de Gibbs, modèle à deux paramètres

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

$$\begin{split} \rho(\mu|\textbf{h},y) &\propto \exp\left[-\frac{\bar{\omega}}{2}(\mu - \bar{\mu})^2 - \frac{\textbf{h}}{2}\sum_{t=1}^n (y_t - \mu)^2\right] \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\bar{\omega}(\mu^2 - 2\mu\bar{\mu} + \bar{\mu}^2) + \textbf{h}(n\bar{y}^{(2)} - 2\mu n\bar{y} + n\mu^2)\right]\right\} \\ \text{où } \bar{y}^{(2)} &= n^{-1}\sum_{t=1}^n y_t^2 \text{ et } \bar{y} = n^{-1}\sum_{t=1}^n y_t. \text{ Alors} \\ \rho(\mu|\textbf{h},y) &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[(\bar{\omega} + \textbf{h}n)\mu^2 - 2(\bar{\omega}\bar{\mu} + \textbf{h}n\bar{y})\mu\right]\right\} \end{split}$$

 $\propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\bar{\omega} + hn) \left(\mu - \frac{\bar{\omega}\bar{\mu} + hn\bar{y}}{\bar{\omega} + hn} \right)^2 \right].$

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

$$ar{ar{\mu}} = rac{ar{\omega}}{ar{\omega} + rac{hn}{n}}ar{\mu} + rac{hn}{ar{\omega} + rac{hn}{n}}ar{y} = ar{ar{\omega}}^{-1}(ar{\omega}ar{\mu} + rac{hnar{y}}{n}).$$

Échantillonage de Gibbs, tirage de h

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

$$p(\mathbf{h}|\mu,y) \propto \mathbf{h}^{(ar{
u}+n-2)/2} \exp\left\{-rac{\mathbf{h}}{2}\left[ar{\mathbf{s}}^2 + \sum_{t=1}^n (y_t - \mu)^2
ight]
ight\}.$$

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

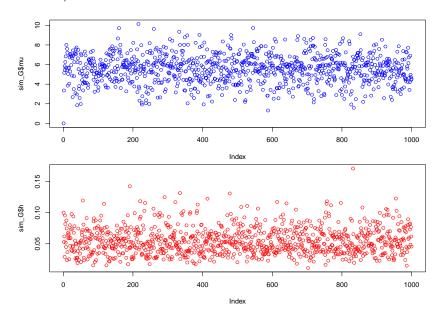
$$\bar{\bar{s}}^2 \mathbf{h} | \mu, y \sim \chi^2(\bar{\bar{\nu}}),$$

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

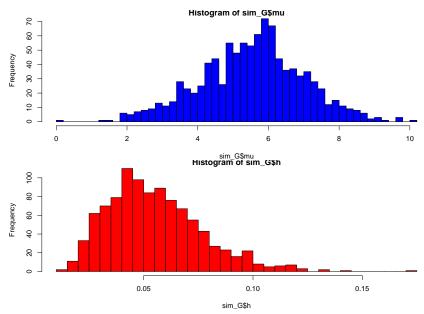
Code pour l'échantillonage, modèle à deux paramètres

```
Gibbs.sim <- function(M) {</pre>
  # Stockage, valeurs initiales
  mu <- vector('numeric', M); mu[1] <- 0</pre>
  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)/</pre>
                   omega_bar.bar
    mu[m] <- rnorm(1, mu_bar.bar,</pre>
                        1/sqrt(omega_bar.bar))
  }
  list(mu=mu, h=h)
```

Résultats, trace



Résultats, histograms



Résultats, écarts-types numériques pour μ

[1] 1.458128

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

## $est
## [1] 5.535818

##
## $se
## [1] 0.04966814

sd(sim_G$mu)
```

Résultats, écarts-types numériques pour h

[1] 0.02161037

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

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

sd(sim_G$h)
```

Exemple économétrique (Exemple 17.1 de Wooldridge)

- Un modèle de la participation des femmes dans la population active (jeu de données MROZ)
- ▶ On observe un échantillon de n = 753 femmes mariées.
- La variable endogène est la décision d'être dans la population active ou non :

$$y_i = \begin{cases} 1 & \text{la femme } i \text{ est dans la population active} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

- Variables exogènes : nwifeinc, educ, exper, exper², age, kidslt6, kidsge6, constant, avec les données de la femme i organisées dans un vecteur x_i.
- ▶ Modèle probit : $\Pr[y_i = 1] = \Phi(x_i^\top \beta)$, où β est un vecteur de paramètres, $\Phi(\cdot)$ est la fonction de répartition de la loi N(0, 1).
- Une loi a priori pour β : $\beta \sim N(\bar{\beta}, \bar{H}^{-1})$.

L'idée de l'augmentation des données

- Un exemple de "reculer pour mieux sauter".
- ▶ Supposez qu'il soit difficile de simuler $\theta|y$.
- ► Cependant, il y a une variable aléatoire z telle que on peut simuler facilement
 - $\triangleright \theta | z, y,$
 - $\triangleright z|\theta, y.$
- On utilise l'échantillonage de Gibbs pour tirer un échantillon de θ , z|y.
- ▶ On peut toujours ignorer z, mais z peut être utile.

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 , $y_i^* = x_i\beta u_i$ où $u_i \sim N(0,1)$.
 - ▶ $y_i = 1 \text{ si } y_i^* \ge 0.$
- Notez que

$$Pr[y_i = 1 | x_i, \beta] = Pr[y_i^* \ge 0 | x_i, \beta]$$

$$= Pr[x_i\beta - u_i \ge 0 | x_i, \beta]$$

$$= Pr[u_i \le x_i\beta | x_i, \beta]$$

$$= \Phi(x_i\beta).$$

Augmentation des données

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

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

$$\cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(y^* - X\beta)^\top (y^* - X\beta)\right]$$

$$\cdot \prod_{i=1}^n [y_i 1_{[0,\infty)}(y_i^*) + (1 - y_i) 1_{(-\infty,0)}(y_i^*)]$$

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

Densité conditionnelle a posteriori de y_i^*

Densité conditionnelle a posteriori :

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

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

Densité conditionnelle a posteriori de β

Densité conditionnelle a posteriori :

$$f(eta|y^*,y) \propto \exp\left\{-rac{1}{2}\left[(eta-ar{eta})^{ op}ar{H}(eta-ar{eta}) + (y^*-Xeta)^{ op}(y^*-Xeta)
ight]$$

▶ L'expression [·] entre crochets est quadratique en β , et

$$(\beta - \bar{\beta})^{\top} \bar{H}(\beta - \bar{\beta}) + (y^* - X\beta)^{\top} (y^* - X\beta)$$

$$= \beta^{\top} (\bar{H} + X^{\top} X) \beta^{\top}$$

$$- \beta^{\top} (\bar{H} \bar{\beta} + X^{\top} y^*)$$

$$- (\bar{\beta}^{\top} \bar{H} + (y^*)^{\top} X) \beta$$

$$+ \bar{\beta}^{\top} \bar{H} \bar{\beta} + (y^*)^{\top} y^*$$

► 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 $(\beta - \bar{\beta})^{\top} \bar{H}(\beta - \bar{\beta}) + k$.

Densité conditionnelle a posteriori de β

On obtient

$$\begin{split} \bar{\bar{H}} &= \bar{H} + X^\top X \\ \bar{\bar{\beta}} &= \bar{\bar{H}}^{-1} (\bar{H}\bar{\beta} + X^\top y^*) = \bar{\bar{H}}^{-1} (\bar{H}\bar{\beta} + X^\top Xb), \end{split}$$
 où $b = (X^\top X)^{-1} X^\top y^*.$

Puisque

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

Quatre femmes de l'échantillon

- Les 2 premières femmes ci-bas sont dans la population active
 - la décision de la femme 26 est relativement attendue
 - la décision de la femme 119 est relativement inattendue
- Les 2 dernières ne sont pas dans la population active
 - la décision de la femme 502 est relativement inattendue
 - la décision de la femme 715 est relativement attendue

```
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

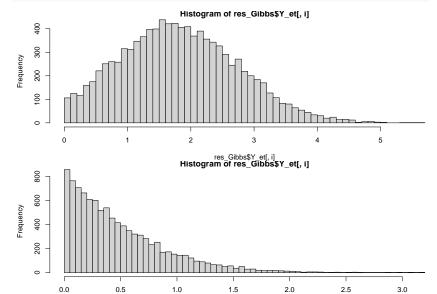
## 502 24.00000 16 8 64 33 0 0

## 715 51.20000 15 5 25 31 3 0
```

▶ Voir les distributions des y_i^* pourrait être utile.

Deux femmes qui sont dans la population active

```
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 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)}

